

ISSN 2415-7058

**Вестник  
Донецкого  
национального  
университета**



НАУЧНЫЙ  
ЖУРНАЛ  
*Основан  
в 1997 году*

---

*Серия А*  
**Естественные  
науки**

---

**2/2016**

---

## Редакционная коллегия серии А (естественные науки)

**Главный редактор** – д-р физ.-мат. наук, проф. **С.В. Беспалова**

**Зам. главного редактора** – д-р биол. наук, проф. **О.С. Горецкий**

**Ответственные секретари:** канд. физ.-мат. наук, доц. **Е.В. Алтухов**; канд. физ.-мат. наук **М.В. Фоменко**

**Члены редколлегии:** д-р хим. наук, проф. **А.С. Алемасова**; д-р экон. наук., проф. **В.Н. Андриенко**; д-р техн. наук, проф. **В.В. Белоусов**; д-р биол. наук, проф. **М.И. Бойко**; д-р физ.-мат. наук, проф. **Б.В. Бондарев**; д-р физ.-мат. наук, проф. **Вал.В. Волчков**; д-р физ.-мат. наук, проф. **Вит.В. Волчков**; д-р биол. наук, проф. **А.З. Глухов**; д-р физ.-мат. наук, проф. **А.С. Гольцев**; д-р физ.-мат. наук, проф. **Г.В. Горр**; д-р техн. наук, проф. **В.В. Данилов**; д-р физ.-мат. наук, проф. **С.А. Калоеров**; д-р физ.-мат. наук, проф. **А.Г. Милославский**; д-р хим. наук, проф. **В.М. Михальчук**; д-р техн. наук, проф. **Ф.В. Недопекин**; д-р техн. наук, проф. **А.Н. Семко**; д-р техн. наук, проф. **В.И. Сторожев**; д-р физ.-мат. наук, д-р техн. наук, проф. **В.К. Толстых**; д-р хим. наук, проф. **Т.Г. Тюрина**; д-р биол. наук, проф. **Н.Н. Ярошенко**.

## The Editorial Board of a Series A (Natural Sciences)

**The Editor-in-Chief** – Dr. of phys. and math., prof. **S.V. Bespalova**

**The Deputy of the Editor-in-Chief** – Dr. of biol., prof. **O.S. Goretskii**

**Executive Secretaries:** Cand. of phys. and math., docent **E.V. Altukhov**, Cand. of phys. and math. **M.V. Fomenko**

**The Members of the Editorial Board:** Dr. of chem., prof. **A.S. Alemasova**; Dr. of econ., prof. **V.N. Andrienko**; Dr. of tech., prof. **V.V. Belousov**; Dr. of biol., prof. **M.I. Boyko**; Dr. of phys. and math., prof. **B.V. Bondarev**; Dr. of phys. and math., prof. **Val.V. Volchkov**; Dr. of phys. and math., prof. **Vit.V. Volchkov**; Dr. of biol., prof. **A.Z. Glukhov**; Dr. of phys. and math., prof. **A.S. Goltsev**; Dr. of phys. and math., prof. **G.V. Gorr**; Dr. of tech., prof. **V.V. Danilov**; Dr. of phys. and math., prof. **S.A. Kaloerov**; Dr. of phys. and math., prof. **A.G. Miloslavsky**; Dr. of chem., prof. **V.M. Mikhal'chuk**; Dr. of tech., prof. **F.V. Nedopiokin**; Dr. of tech., prof. **A.N. Semko**; Dr. of tech., prof. **V.I. Storozhev**; Dr. of phys. and math., Dr. of tech., prof. **V.K. Tolstykh**; Dr. of chem., prof. **T.G. Tyurina**; Dr. of biol., prof. **N.N. Jaroshenko**.

**Адрес редакции:** ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»

ул. Университетская, 24

83001, г. Донецк

**Тел:** (062) 302-92-56, 302-92-93

**E-mail:** [vestnikdonnu\\_a@mail.ru](mailto:vestnikdonnu_a@mail.ru)

**URL:** <http://donnu.ru/vestnikA>

*Печатается по решению Ученого совета ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»  
Протокол № 5 от 29.04.2016 г.*

© ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», 2016

# Вестник Донецкого национального университета

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

ОСНОВАН В 1997 ГОДУ

Серия А. Естественные науки

№ 2

Донецк 2016

## СОДЕРЖАНИЕ

### *Механика*

- Горр Г.В., Пиллани Ю.Ю.* Об одном классе асимптотически-маятниковых движений тяжелого твердого тела, имеющего неподвижную точку 3
- Мазнев А.В., Белоконь Т.В.* Три инвариантных соотношения в задаче о движении гири с двумя вращающимися роторами 12
- Моисеенко И.А., Моисеенко В.А.* Спектры продольных волн в функционально-градиентных трансверсально изотропных цилиндрах с жидкостным заполнением 17
- Семко А.Н.* Механика пороховой гидропушки для несжимаемой жидкости 29
- Сторожев С.В., Номбре С.Б.* Нечеткие оценки для характеристик нелинейных вторых гармоник объемных волн сдвига в трансверсально-изотропной упругой среде 38

### *Физика*

- Абрамов В.С.* Вихри во фрактальной многослойной наносистеме 44
- Абрамова О.П.* Фрактальные объемные структуры и аттракторы в многослойной наносистеме 55
- Ефимович А.П.* Исследование нелинейных искажений высокочастотного насыщенного усилителя класса F<sub>3</sub> 65
- Метлов Л.С.* Неравновесная эволюционная термодинамика вакансий и межузельных атомов. Теория плавления твердых тел 70

### *Информатика, вычислительная техника и управление*

- Третьяков И.А., Павлов М.Л., Тебенева Т.С., Данилов В.В.* Оптические информационные технологии. Преобразование радиосигналов 83
- Шарий Т.В., Лялин Р.О., Гукай А.Е., Котенко В.Н.* Распознавание текста в зашумленных изображениях сканированных документов 91

### *Химические науки*

- Безбожная Т.В.* К вопросу о роли диметилформаида и механизме реакций С-С сочетания арилиодидов в системе диметилформаид – K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> – ArI 99
- Белый А.В., Белая Н.И.* Кинетика реакций моно- и дигидроксибензойных кислот с интермедиатами электровосстановления кислорода в нейтральных средах 106
- Правила для авторов 114

**CONTENTS**

***Mechanics***

- Gorr G.V., Pilpany Ju.Yu.* About one class of asymptotically-pendulum motions of heavy rigid body with a fixed point 3
- Maznyev A.V., Belokon T.V.* Three invariant relations in the motion of a gyrostat with two rotating rotors problem 12
- Moiseyenko I.A., Moiseyenko V.A.* The spectra of longitudinal waves in functionally graded transversely isotropic liquid-filled cylinders 17
- Semko A.N.* Mechanics of powder hydro cannon for an incompressible fluid 29
- Storozhev S.V., Nombre S.B.* Fuzzy evaluation for characteristics of nonlinear second harmonics of shear bulk waves in transversely isotropic elastic medium 38

***Physics***

- Abramov V.S.* Vortices in a fractal multilayer nanosystem 44
- Abramova O.P.* Fractal bulk structures and attractors in multilayer nanosystem 55
- Yefymovych A.P.* Investigation nonlinear distortion of the high frequency saturated class-F<sub>3</sub> amplifier 65
- Metlov L.S.* Nonequilibrium evolution thermodynamics of vacancies and interstitial atoms. Theory of solid melting 70

***Computer science, computer engineering and control***

- Tretyakov I.A., Pavlov M.L., Tiebienieva T.S., Danilov V.V.* Optical information technologies. Transformation of radio signals 83
- Sharii T.V., Lialin R.A., Gukai A.Ye., Kotenko V.N.* Text recognition in noisy images of scanned documents 91

***Chemical sciences***

- Bezbozhnaya T.V.* The role of dimethylformamide and mechanism of C-C coupling reactions of aryl iodides in the system dimethylformamide – K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> – ArI 99
- Belyj A.V., Belaya N.I.* The kinetics of reaction of mono- and dihydroxybenzoic acid with oxygen electroreduction intermediates in a neutral environment 106
- Правила для авторов 114

УДК 531.38

**ОБ ОДНОМ КЛАССЕ АСИМПТОТИЧЕСКИ-МАЯТНИКОВЫХ ДВИЖЕНИЙ ТЯЖЕЛОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА, ИМЕЮЩЕГО НЕПОДВИЖНУЮ ТОЧКУ**

© 2016. Г.В. Горр, Ю.Ю. Пилпани

В статье установлены новые классы асимптотически-маятниковых движений тяжелого твердого тела, имеющего неподвижную точку. Показано, что они характеризуются быстрыми вращениями предельного движения.

*Ключевые слова:* асимптотически-маятниковые движения, предельное движение.

**Введение.** Изучению маятниковых движений посвящено большое количество публикаций, которые основаны на различных подходах. Это связано с тем, что такие движения имеют широкий класс гироскопов, единственным условием на распределение масс которых служит свойство принадлежности центра масс тела главной плоскости эллипсоида инерции. Один из подходов использует первый метод Ляпунова [1]. В статье [2] показано существование асимптотически-маятниковых движений гироскопа Гесса–Аппельрота. Характерной особенностью этой статьи может служить результат интегрирования уравнений в вариациях в квадратурах. Статья [3] посвящена исследованию асимптотически-маятниковых движений в общем случае, для чего были получены уравнения Хилла, от решений которых зависело свойство асимптотичности. Частные варианты исследования условий существования асимптотически-маятниковых движений рассмотрены в работах [4–6]. Подход в изучении маятниковых движений, применяемый в [7–9] характеризуется анализом окрестности этих движений с помощью нелинейных методов аналитической механики.

В данной статье с помощью первого метода Ляпунова асимптотически-маятниковые движения исследуются в предположении быстрых вращений гиростата. Этот вариант ранее не изучался (см. [2–6]). Здесь построена область характерных параметров распределения масс без предварительных предположений о структуре гироскопа, для точек которой движение тела имеет свойство асимптотичности к маятниковому движению.

**Постановка задачи.** Рассмотрим движение тяжелого твердого тела с неподвижной точкой. Уравнения Эйлера–Пуассона запишем в виде [10]

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{x} \times \mathbf{a} \mathbf{x} + s(\mathbf{e} \times \mathbf{v}), \quad \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{v} \times \mathbf{a} \mathbf{x}. \quad (1)$$

В (1) использованы обозначения:  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  – момент количества движения;  $\mathbf{v} = (v, v_1, v_2)$  – единичный вектор, имеющий направление силы тяжести;  $\mathbf{a} = (a_{ij})$  – гирационный тензор;  $\mathbf{e} = (e_1, e_2, e_3)$  – единичный вектор, сонаправленный с вектором  $\overline{OC}$  ( $O$  – неподвижная точка,  $C$  – центр тяжести тела);  $s$  – произведение массы тела, ускорения свободного падения и расстояния от неподвижной точки до центра тяжести тела; точка над переменными  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{v}$  обозначает относительную производную по времени  $t$ .

Маятниковое движение, называемое иногда плоским движением тела, характеризуется неравномерным вращением тела относительно горизонтальной оси в пространстве. Следуя [10], запишем уравнения (1) в специальной системе координат.

Пусть  $e = (1, 0, 0)$ ,  $a_{13} = 0$ ,  $a_{23} = 0$ ,  $a_{12} = b_1$ ,  $a_{11} = a$ ,  $a_{22} = a_1$ ,  $a_{33} = a_2$ , то есть ось вращения тела является главной в теле. Из (1) имеем

$$\dot{x} = (a_2 - a_1)yz - b_1xz, \quad \dot{y} = (a - a_2)xz + b_1yz - sv_2, \quad \dot{z} = (a_1 - a)xy + b_1(x^2 - y^2) + sv_1, \quad (2)$$

$$\dot{v} = a_2zv_1 - (b_1x + a_1y)v_2, \quad \dot{v}_1 = (ax + b_1y)v_2 - a_2zv, \quad \dot{v}_2 = (a_1y + b_1x)v - (ax + b_1y)v_1. \quad (3)$$

Уравнения (2), (3) имеют первые интегралы

$$v^2 + v_1^2 + v_2^2 = 1, \quad xv + yv_1 + zv_2 = k, \quad ax^2 + a_1y^2 + a_2z^2 + 2b_1xy - 2sv = 2sh, \quad (4)$$

где  $k, h$  – произвольные постоянные.

Для маятниковых движений справедливы формулы [2, 9]

$$x^*(t) = 0, \quad y^*(t) = 0, \quad z^*(t) = \dot{\varphi}(t)/a_2, \quad v^*(t) = \cos \varphi, \quad v_1^*(t) = -\sin \varphi, \quad v_2^*(t) = 0, \quad (5)$$

где

$$\dot{\varphi} = \sqrt{2a_2s(h + \cos \varphi)}. \quad (6)$$

Положим, что параметр  $h > 1$ . Тогда из (6) получим

$$\varphi(t) = am\rho t, \quad \dot{\varphi}(t) = 2\rho \operatorname{dn} \rho t, \quad (\rho = \sqrt{a_2s(h+1)/2}). \quad (7)$$

Модуль эллиптических функций (7) имеет действительное значение

$$k_*^2 = a_2s(h+1)/2 \quad (8)$$

в силу выбора подвижной системы координат, для которой полагаем  $s > 0$ . Решение (5) в эллиптических функциях Якоби таково

$$\begin{aligned} x^*(t) = 0, \quad y^*(t) = 0, \quad z^*(t) = 2\rho \operatorname{dn} \rho t/a_2, \\ v^*(t) = 1 - \operatorname{sn}^2 \rho t, \quad v_1^*(t) = -2\operatorname{sn} \rho t \operatorname{cn} \rho t, \quad v_2^*(t) = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Для исследования условий существования асимптотически маятниковых движений с помощью первого метода Ляпунова введем возмущения  $x_1, x_2, x_3$  и  $y_1, y_2, y_3$  по формулам

$$\begin{aligned} x = x^*(t) + x_1, \quad y = y^*(t) + x_2, \quad z = z^*(t) + y_1, \quad v = v^*(t) + y_2, \\ v_1 = v_1^* + y_3, \quad v_2 = v_2^* + x_3. \end{aligned} \quad (10)$$

Поскольку в формулах (10) величины  $x_1, x_2, y_1$  имеют размерность параметра  $\sqrt{s/a_2}$ , а величины  $y_2, y_3, x_3$  безразмерны, то в дальнейшем это обстоятельство необходимо учитывать. В силу равенства (6)  $\dot{\varphi}(t) > 0$ , то есть вместо времени  $t$  введем монотонно возрастающую переменную  $\varphi$ . Используя данные свойства и обозначая дифференцирование по  $\varphi$  штрихом, получим следующую систему первого приближения в безразмерных переменных и параметрах

$$\begin{aligned} x_1' = (1 - \alpha_1)x_2 - bx_1, \quad x_2' = (\alpha - 1)x_1 + bx_2 - x_3/u(\varphi), \\ x_3' = [(b \cos \varphi + \alpha \sin \varphi)x_1 + (\alpha_1 \cos \varphi + b \sin \varphi)x_2]/u(\varphi), \end{aligned} \quad (11)$$

$$y_1' = \frac{y_3}{u(\varphi)}, \quad y_2' = \frac{-y_1 \sin \varphi + u(\varphi)y_3}{u(\varphi)}, \quad y_3' = -\frac{y_1 \cos \varphi + u(\varphi)y_2}{u(\varphi)}, \quad (12)$$

где  $u(\varphi) = \sqrt{2(h + \cos \varphi)}$ . Система (11) имеет один первый интеграл

$$x_1 \cos \varphi - x_2 \sin \varphi + u(\varphi)x_3 = c_1, \quad (13)$$

а система (12) имеет два первых интеграла

$$y_1 u(\varphi) - y_2 = c_2, \quad y_2 \cos \varphi - y_3 \sin \varphi = c_3. \quad (14)$$

Интегралы (13), (14) являются следствием интегралов (4).

Отметим, что в (11) введены новые параметры

$$\alpha = a/a_2, \quad \alpha_1 = a_1/a_2, \quad b = b_1/a_2. \quad (15)$$

В силу системы (5), (9) системы (11), (12) являются линейными системами с периодическими коэффициентами, период которых относительно переменной  $\varphi$  равен  $2\pi$ . Для нахождения периода движения предельного маятникового движения по переменной  $t$  необходимо обратиться к формулам (7).

Целью данной статьи является исследование условий существования асимптотически-маятниковых движений, то есть движений, которые при  $t \rightarrow \infty$  стремятся к движению физического маятника с вращательным свойством. Будет использован первый метод Ляпунова [1], в основе которого лежит свойство правильности системы в вариациях и наличие у этой системы определенного числа положительных характеристических чисел. В силу этого будем рассматривать лишь свойства решений систем (11), (12).

**Интегрирование системы (12).** Так как система (12) имеет интегралы (14), то это позволяет интегрирование системы (12) свести к квадратурам. Запишем общее решение системы (12)

$$y_1 = \frac{c_2 + c_3 \cos \varphi + \vartheta \sin \varphi}{\sqrt{2(h + \cos \varphi)}},$$

$$y_2 = c_3 \cos \varphi + \vartheta \sin \varphi, \quad y_3 = \vartheta \cos \varphi - c_3 \sin \varphi, \quad (16)$$

$$\vartheta = \sqrt{h + \cos \varphi} \left[ c_4 - \frac{c_2}{2} \int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{d\varphi}{(h + \cos \varphi)^{3/2}} - \frac{c_3}{2} \int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{\cos \varphi d\varphi}{(h + \cos \varphi)^{3/2}} \right].$$

Рассмотрим систему (11) с первым интегралом (13). Поскольку  $h > 1$ , то  $u(\varphi) \neq 0$  для всех  $\varphi$ . Используя это свойство, из (13) определим

$$x_3 = (c_1 - x_1 \cos \varphi + x_2 \sin \varphi)/u(\varphi). \quad (17)$$

Подставим выражение (17) в третье уравнение системы (11). Тогда из (11) получим

$$\begin{aligned} x_1' &= (1 - \alpha_1)x_2 - bx_1, \\ x_2' &= \frac{1}{2(h + \cos \varphi)} [x_1 (2h(\alpha - 1) + (2\alpha - 1) \cos \varphi) + x_2 (2bh - \sin \varphi + 2b \cos \varphi)]. \end{aligned} \quad (18)$$

В статье [2] показано, что при условиях

$$1 - \alpha_1 = 0, \quad b > 0 \quad (19)$$

система (18) имеет два решения, характеристичные числа которых противоположных знаков. Это означает, что система (11) имеет одно нулевое характеристичное число и два характеристичных числа разных знаков. Таким образом, в силу того, что решение (16) имеет нулевые характеристичные числа, полная система в вариациях (11), (12) имеет только одно положительное характеристичное число. Это значит [1], что соответствующая ей нелинейная система для возмущений  $x_i, y_i$  ( $i = \overline{1,3}$ ) допускает асимптотическое решение

$$x_i = \sum_{m=1}^{\infty} M_i^{(m)}(t) \beta^m (e^{-bt})^m, \quad y_i = \sum_{m=1}^{\infty} L_i^{(m)}(t) \beta^m (e^{-bt})^m, \quad (20)$$

где характеристичные числа функций  $M_i^{(m)}(t)$  и  $L_i^{(m)}(t)$  не менее нуля,  $\beta$  – малая произвольная постоянная. Так как при  $t \rightarrow \infty$   $x_i \rightarrow \infty$ ,  $y_i \rightarrow \infty$ , то тяжелое твердое тело, распределение масс которого удовлетворяет условиям (19), при  $t \rightarrow \infty$  асимптотически стремится к маятникообразному движению (5), (6), описываемому эллиптическими функциями (9) с модулем (8). На основании обозначений (15) из равенства  $1 - \alpha_1 = 0$  следует, что выполняется условие  $a_1 = a_2$ . В рассматриваемом случае гирационный эллипсоид описывается уравнением

$$ax^2 + a_1(y^2 + z^2) + 2b_1xy = \mu_0^2, \quad (21)$$

где  $\mu_0$  – параметр. Из векторного равенства  $e = (1, 0, 0)$  и соотношения (21) следует, что центр масс тела лежит на перпендикуляре, проведенном из центра масс тела к круговому сечению гирационного эллипсоида. Тело с таким распределением масс называют гироскопом Гесса [11]. Следовательно, в [2] показано существование асимптотически-маятниковых движений гироскопа Гесса для всех значений параметра  $h$ , которые удовлетворяют неравенству  $h > 1$ .

В статье [3] указаны условия существования асимптотически-маятниковых движений, в которых постоянная  $h$  и параметры  $\alpha$ ,  $\alpha_1$ ,  $b$  удовлетворяют некоторым условиям. Они имеют достаточно сложный вид и для их анализа в [3] не выделены достаточно интересные варианты, характеризующиеся либо большими значениями параметра  $h$ , либо конкретным распределением масс твердого тела.

**Интегрирование системы (11).** Если в уравнениях (11) положить  $1 - \alpha_1 = 0$ ,  $b = 0$ , то  $x_1 = c$  ( $c$  – произвольная постоянная). Следовательно, и нелинейная система (2) имеет первый интеграл  $x = \text{const}$ . Он характеризует случай Ж. Лагранжа. Для него в силу существования у уравнений в вариациях нулевых характеристичных чисел первый метод Ляпунова не применим. Поэтому в дальнейшем полагаем  $1 - \alpha_1 \neq 0$ .

Для понижения порядка системы (11) выразим  $x_2$  из первого уравнения системы (18) [2, 3]

$$x_2 = (x_1' + bx_1) / (1 - \alpha_1). \quad (22)$$

Подставим выражение (22) во второе уравнение (18). Полученное уравнение заменой

$$x_1 = w \sqrt[4]{h + \cos \varphi}, \quad (23)$$

где  $w$  – новая переменная, приведем к уравнению класса Хилла

$$w'' - \frac{w}{16(h + \cos \varphi)^2} F(\varphi) = 0, \quad (24)$$

где

$$F(\varphi) = 4(h + \cos \varphi) \times \\ \times \left\{ 4h \left[ b^2 + (\alpha - 1)(1 - \alpha_1) \right] + \left[ 4b^2 + 4\alpha(1 - \alpha_1) + 2\alpha_1 - 1 \right] \cos \varphi - 2b \sin \varphi \right\} + 5 \sin^2 \varphi. \quad (25)$$

Будем рассматривать функцию (25) при достаточно больших  $h$ , которые в силу структуры (25) обеспечивает условие Ляпунова [1]  $F(\varphi) > 0$ . Коэффициент при  $h^2$  содержит множитель  $b^2 + (\alpha - 1)(1 - \alpha_1)$ , который в силу обозначений (15) и условия  $a_2 > 0$  имеет знак выражения  $\varkappa_0 = b_1^2 + (a_2 - a_1)(a - a_2)$ .

Положим, что  $b_1 \neq 0$ . Запишем выражение для  $\varkappa_0$ , используя компоненты гирационного тензора  $a = (a_{ij})$ , то есть учтем условия:  $b_1 = a_{12}$ ,  $a = a_{11}$ ,  $a_1 = a_{22}$ ,  $a_2 = a_{33}$ . Тогда для  $\varkappa_0$  имеем

$$\varkappa_0 = a_{12}^2 + (a_{33} - a_{11})(a_{22} - a_{33}). \quad (26)$$

В соотношении (26) перейдем к компонентам тензора инерции  $A = a^{-1}$ . Обозначим компоненты тензора  $A$  через  $A_{ij}$ . Тогда очевидно (третья ось является главной)  $A_{13} = A_{23} = 0$ . Следовательно [11]

$$a_{12} = -\frac{A_{12}A_{33}}{|A|}, \quad a_{11} = \frac{A_{22}A_{33}}{|A|}, \quad a_{22} = \frac{A_{11}A_{33}}{|A|}, \quad a_{33} = \frac{A_{11}A_{22} - A_{12}^2}{|A|}. \quad (27)$$

Обозначим  $\sigma_0 = A_{11}A_{22} - A_{12}^2$ . В силу того, что матрица  $A$  положительно определена,  $\sigma_0 > 0$ . Учитывая данное обозначение, подставим (27) в (26)

$$\varkappa_0 = \sigma_0 \left[ A_{33} (A_{11} + A_{22} - A_{33}) - \sigma_0 \right] / |A|^2. \quad (28)$$

Известно, что компоненты  $A_{ij}$  из (27) удовлетворяют условиям  $A_{ii} > 0$  ( $i = \overline{1, 3}$ ) и (см., например, [9])

$$A_{11} + A_{22} > A_{33}, \quad A_{22} + A_{33} > A_{11}, \quad A_{33} + A_{11} > A_{22}, \quad |A_{12}| \leq A_{33}/2. \quad (29)$$

Потребуем, чтобы выражение в квадратных скобках формулы (28) было положительно. Тогда в силу обозначения для  $\sigma_0$  и последнего условия из (29) получим

$$0 < A_{11}A_{22} - A_{33}^2/4 \leq \sigma_0 < A_{33} (A_{11} + A_{22} - A_{33}). \quad (30)$$

Введем безразмерные параметры

$$\beta_1 = A_{11}/A_{33}, \quad \beta_2 = A_{22}/A_{33}. \quad (31)$$

С учетом (31), неравенства треугольника на осевые моменты инерции запишем в виде

$$\beta_1 + \beta_2 > 1, \quad \beta_2 + 1 > \beta_1, \quad \beta_1 + 1 > \beta_2. \quad (32)$$

Множество точек  $(\beta_1, \beta_2)$  на плоскости  $O\beta_1\beta_2$  ограничено прямыми  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ , причем

$$\gamma_1: \beta_2 = 1 - \beta_1, \quad \gamma_2: \beta_2 = \beta_1 - 1, \quad \gamma_3: \beta_2 = \beta_1 + 1. \quad (33)$$

Кроме (33) введем на плоскости  $O\beta_1\beta_2$  кривые

$$\gamma_4: \beta_2 = \frac{1}{4\beta_1}, \quad \gamma_5: \beta_2 = 1 + \frac{1}{4(\beta_1 - 1)}. \quad (34)$$

Используя обозначения (31), из условия (30) получим

$$\beta_1\beta_2 - \frac{1}{4} > 0, \quad 4\beta_2(\beta_1 - 1) - 4\beta_1 + 3 < 0. \quad (35)$$

На рис. 1, построение которого осуществляется с помощью уравнение (33), (34) множество точек  $(\beta_1, \beta_2)$  на плоскости обозначено через  $g(\beta_1, \beta_2)$  (граничные кривые, отмеченные жирными линиями, в это множество не входят).

Сопоставление области  $g(\beta_1, \beta_2)$  с областями, которые указаны в [2, 3], на соответствующие параметры, требует дополнительных рассуждений. Если параметры  $(\beta_1, \beta_2)$  принадлежат области  $g(\beta_1, \beta_2)$ , то для достаточно больших значений  $h$  функция (25) удовлетворяет условию  $F(\varphi) > 0$  для всех  $\varphi$ . В силу условия Ляпунова [1] уравнение (24) имеет решение с положительным характеристическим числом  $\mu^2$ :

$$w_1(\varphi) = e^{-\mu^2\varphi} \psi(\varphi), \quad (36)$$

где  $\psi(\varphi)$  – периодическая функция переменной  $\varphi$ . В силу формулы (23) решению (36) соответствует решение

$$x_1^*(\varphi) = \psi(\varphi) e^{-\mu^2\varphi} \sqrt{4h + \cos \varphi}, \quad (37)$$

характеристическое число которого также положительно. Из уравнения (22) на основании функции (37) определим функцию  $x_2^*(\varphi)$  с положительным характеристическим числом. С помощью функций  $x_1^*(\varphi), x_2^*(\varphi)$  из формулы (17), полагая  $c_1 = 0$  в силу метода Ляпунова, найдем решение  $x_3^*(\varphi)$ . Таким образом, установлены условия существования решения системы (11), имеющее положительное характеристическое число. Для построения решения системы (12), которое бы не изменило знака решения полной системы в вариациях (11), (12) полагаем в формулах (16)  $c_2 = c_3 = c_4 = 0$ . То есть для (11), (12) согласно методу Ляпунова принимаем решение

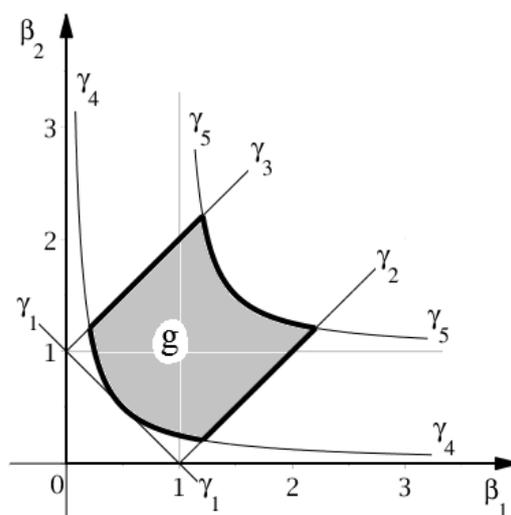


Рис. 1

$$x_1 = x_1^*(\varphi), \quad x_2 = x_2^*(\varphi), \quad x_3 = x_3^*(\varphi), \quad y_1 = 0, \quad y_2 = 0, \quad y_3 = 0. \quad (38)$$

Таким образом, для области  $g(\beta_1, \beta_2)$  найдено решение, имеющее положительное характеристическое число. Это свойство позволяет построить ряды Ляпунова (20) для соответствующей нелинейной системы и сделать вывод о том, что при  $(\beta_1, \beta_2) \in g$  существует однопараметрический ряд Ляпунова, описывающий асимптотически-маятниковые движения тяжелого твердого тела, имеющего неподвижную точку.

**Случай, когда барицентрическая ось является главной.** Пусть в формуле (26)  $a_{12} = 0$ , то есть центр тяжести тела принадлежит главной оси. Обозначим  $a_{11} = 1/A_1$ ,  $a_{22} = 1/A_2$ ,  $a_{33} = 1/A_3$ , где  $A_i$  – главные моменты инерции тела. Формула (26) примет вид

$$\varkappa_0 = (A_1 - A_3)(A_3 - A_2)/(A_1 A_2 A_3). \quad (39)$$

Функцию (25) будем рассматривать для больших положительных значений параметра  $h$ . Потребуем, чтобы в (39)  $\varkappa_0 > 0$ . Тогда должно выполняться неравенство

$$(A_1 - A_3)(A_3 - A_2) > 0. \quad (40)$$

Рассмотрим тела, имеющие динамическую симметрию (класса С. В. Ковалевской, Д. Н. Горячева). То есть, положим  $A_2 = A_1$ . В этом случае условие (40) нарушается. Изучим случай гироскопа Бобылева–Стеклова [10]:  $A_1 = 2A_2$ . Для параметров  $\beta_1 = A_1/A_3$ ,  $\beta_2 = A_2/A_3$  в силу принятого условия из неравенств (32) следует

$$\frac{1}{3} < \beta_2 < 1. \quad (41)$$

Подставим выражение  $A_1 = 2A_2$  в условие (40) и перейдем к параметру  $\beta_2$

$$(2\beta_2 - 1)(1 - \beta_2) > 0. \quad (42)$$

Из (41), (42) следует, что, если параметр  $\beta_2$  изменяется в промежутке  $(1/3, 1/2)$ , то в силу (25) при больших значениях  $h$  выполняется условие  $F(\varphi) > 0$ . При указанных значениях параметра  $\beta_2$  гироскоп Бобылева–Стеклова при определенном выборе начальных данных совершает асимптотически-маятниковое движение. Другим методом асимптотически-маятниковые движения данного гироскопа изучены в [9].

Перейдем в неравенстве (40) к параметрам  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  в общем случае, то есть осевые моменты инерции будут уже главными осями инерции, получим

$$(\beta_1 - 1)(1 - \beta_2) > 0. \quad (43)$$

Множество точек  $(\beta_1, \beta_2)$  плоскости  $O\beta_1\beta_2$ , координаты которых удовлетворяют условию (43) на рис. 1 обозначим через  $H_1(\beta_1, \beta_2)$ ,  $H_2(\beta_1, \beta_2)$  (граничные отрезки прямых исключаются). Следовательно, справедливо утверждение: для значений  $(\beta_1, \beta_2) \in H(\beta_1, \beta_2) = H_1(\beta_1, \beta_2) \cup H_2(\beta_1, \beta_2)$ , которое определяет распределение масс тяжелого твердого тела, существует асимптотическое решение уравнений Эйлера–

Пуассона, характеризующее асимптотически-маятниковые движения для достаточно больших значений параметра  $h$ . Область  $H(\beta_1, \beta_2)$  изображена на рис. 2, уравнения граничных отрезков имеют вид (33).

**Заключение.** В статье рассмотрена задача об условиях существования асимптотически-маятниковых движений тяжелого твердого тела. Показано, что при выполнении определенных ограничений на параметры распределения масс тела при неограниченном возрастании времени движение тела обладает свойством асимптотичности к маятниковому движению.

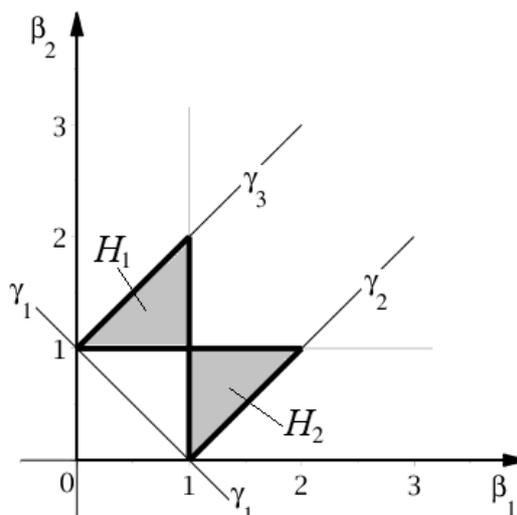


Рис. 2

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ляпунов А.М. Общая задача об устойчивости движения: Собр. соч. В 5 т. / А.М. Ляпунов. – М.-Л. : Изд.-во АН СССР, 1956. – Т. 2. – С. 7–263.
2. Вархалёв Ю.П. Асимптотически-маятниковые движения гироскопа Гесса–Аппельрота / Ю.П. Вархалёв, Г.В. Горр // Прикладная математика и механика. – 1984. – Т. 48, вып. 3. – С. 490–495.
3. Брюм А.З. Достаточные условия существования асимптотически-маятниковых движений тяжелого твердого тела с неподвижной точкой / А.З. Брюм, Г.В. Горр // Прикладная математика и механика. – 1986. – Т. 50, вып. 4. – С. 681–684.
4. Вархалёв Ю.П. Об асимптотически-маятниковых движениях одного типа гироскопов / Ю.П. Вархалёв // Механика твердого тела. – 1985. – Вып. 17. – С. 41–46.
5. Вархалёв Ю.П. Условия существования асимптотически-маятниковых движений твердого тела с центром масс на главной оси / Ю.П. Вархалёв // Прикладная механика. – 1988. – Т. 24, № 7. – С. 101–105.
6. Носырева Е.П. О достаточных условиях существования асимптотически-маятниковых движений твердого тела с неподвижной точкой / Е.П. Носырева // Механика твердого тела. – 1992. – Вып. 24. – С. 42–44.
7. Маркеев А.П. Об устойчивости плоских движений твердого тела в случае Ковалевской / А.П. Маркеев // Прикладная математика и механика. – 2001. – Т. 65, вып. 1. – С. 51–58.
8. Маркеев А.П. О маятникообразных движениях твердого тела в случае Горячева–Чаплыгина / А.П. Маркеев // Прикладная математика и механика. – 2004. – Т. 68, вып. 2. – С. 282–293.
9. Бардин Б.С. Об орбитальной устойчивости маятникообразных движений твердого тела в случае Бобылева–Стеклова / Б.С. Бардин // Нелинейная динамика. – 2009 – Т. 5, № 4. – С. 535–550.
10. Харламов П.В. Лекции по динамике твердого тела / П.В. Харламов. – Новосибирск: Изд.-во Новосиб. ун.-та. – 1965. – 221 с.
11. Горр Г.В. Динамика гиростата, имеющего неподвижную точку / Г.В. Горр, А.В. Мазнев. – Донецк : ДонНУ, 2010. – 364 с.

Поступила в редакцию 12.04.2016 г.

### ABOUT ONE CLASS OF ASYMPTOTICALLY-PENDULUM MOTIONS OF HEAVY RIGID BODY WITH A FIXED POINT

*G.V. Gorr, Ju.Yu. Pilpany*

The article is found new classes of asymptotically-pendulum movements of a heavy rigid body with a fixed point. It is shown that they are characterized by fast rotation limit movement.

**Keywords:** asymptotically-pendulum motion, the limit motion.

**Горр Геннадий Викторович**

доктор физико-математических наук, профессор  
ГУ «Институт прикладной математики и механики», г. Донецк,  
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк  
gvgorr@gmail.com  
83001, ул. Университетская, 24  
+38-050-959-17-38

**Пилпани Юлия Юрьевна**

ГУ «Институт прикладной математики и механики», г. Донецк  
juliet\_don@rambler.ru  
83114, г. Донецк, ул. Розы Люксембург, 74  
+38-050-553-45-78

**Gorr Gennadij Viktorovich,**

Doctor of Physico-Mathematical Sciences, Full Professor  
State Institution “Institute of Applied Mathematics and Mechanics,” Donetsk  
Donetsk National University, Donetsk

**Pilpany Julija Yur’evna**

State Institution “Institute of Applied Mathematics and Mechanics,” Donetsk

УДК 531.38

**ТРИ ИНВАРИАНТНЫХ СООТНОШЕНИЯ В ЗАДАЧЕ О ДВИЖЕНИИ ГИРОСТАТА С ДВУМЯ ВРАЩАЮЩИМИСЯ РОТОРАМИ**© 2016. *А.В. Мазнев, Т.В. Белоконь*

Найдены условия существования трех инвариантных соотношений в задаче о движении симметричного гиростата, несущего два вращающихся ротора. Получено новое решение уравнений движения гиростата с переменным гиростатическим моментом, которое выражено через элементарные функции времени.

**Ключевые слова:** гиростат; ротор; переменный гиростатический момент; инвариантные соотношения.

**Введение.** При рассмотрении задачи о движении гиростата возникают две самостоятельные проблемы. Первая из них относится к случаю, когда гиростатический момент постоянен и тогда для уравнений движения гиростата сохраняются три первых интеграла. В такой постановке значительные результаты получили Г. Кирхгоф, А. Клебш, В.А. Стеклов, А.М. Ляпунов, Д. Гриоли, В.Н. Рубановский, Х.Я. Яхья. Ряд существенных результатов получено в Донецкой школе механиков: П.В. Харламовым, А.М. Ковалевым, Г.В. Горром, А.Я. Савченко и их учениками. Достаточно полный обзор результатов, полученных в исследовании движений гиростата с постоянным гиростатическим моментом, приведен в [1]. Вторая проблема исследования движения гиростата относится к случаю, когда гиростатический момент зависит от времени. Постановка соответствующей модельной задачи принадлежит В. Вольтера, Ж. Лиувиллю, Н.Е. Жуковскому. Ряд результатов получен в предположении, что гиростатический момент формируется одним или двумя вращающимися роторами [2–5]. Однако в этом случае сохраняются только два первых интеграла, что существенно усложняет интегрирование уравнений движения гиростата.

Построение частных решений уравнений движения гиростата можно осуществлять с помощью метода инвариантных соотношений. Определение системы инвариантных соотношений (ИС) впервые было дано А. Пуанкаре [6]. Теорию ИС исследовал Т. Леви-Чивита [7], который получил дифференциальное уравнение для функции, задающей одно ИС, и систему дифференциальных уравнений для функций, задающих систему ИС. Методы ИС, с помощью которых можно осуществлять интегрирование уравнений движения, приведены в работе [8].

В данной работе исследованы условия существования у уравнений движения гиростата с двумя вращающимися роторами трех инвариантных соотношений. На основе метода инвариантных соотношений для неавтономных дифференциальных уравнений [9] построено новое решение уравнений движения гиростата с переменным гиростатическим моментом.

**Постановка задачи.** Рассмотрим механическую систему, состоящую из тел  $S_0, S_1, S_2$ . Тело-носитель  $S_0$  имеет неподвижную точку  $O$ , а тела  $S_1, S_2$  либо геометрически симметричны (роторы), либо динамически симметричны и закреплены в теле  $S_0$  своими осями симметрии. Оси вращения роторов заданы двумя единичными ортогональными векторами  $\alpha$  и  $\beta$ . Предполагается, что вектор гиростатического момента имеет вид  $\lambda = \lambda_1(t)\alpha + \lambda_2(t)\beta$ , где  $\lambda_1(t), \lambda_2(t)$  – дифференцируемые функции времени.

Уравнения движения такой модели описываются обобщенными дифференциальными уравнениями класса Кирхгофа-Пуассона [10]

$$\dot{x} = x \times \omega + \lambda \times \omega - \dot{\lambda} + \omega \times Bv + s \times v + v \times Cv, \quad \dot{v} = v \times \omega. \quad (1)$$

Здесь  $x$  – момент количества движения тела-носителя,  $\omega$  – вектор угловой скорости, связанный с вектором  $x$  соотношением  $\omega = a x$ , ( $a$  – гирационный тензор),  $\lambda$  – вектор гиростатического момента,  $v$  – единичный вектор оси симметрии силовых полей,  $s$  – постоянный вектор, сонаправленный с вектором обобщенного центра масс,  $B = (B_{ij})$ ,  $C = (C_{ij})$  – постоянные матрицы третьего порядка; точкой обозначена относительная производная по времени.

Уравнения (1) допускают два первых интеграла

$$v \cdot v = 1, \quad (x + \lambda) \cdot v - (Bv \cdot v)/2 = k \quad (2)$$

где  $k$  – произвольная постоянная.

Рассмотрим динамически симметричный гиростат  $a = \text{diag}(a_1, a_2, a_2)$  и предположим, что одна из компонент гиростатического момента направлена по оси динамической симметрии  $\alpha = (1, 0, 0)$ , а вторая компонента перпендикулярна этой оси  $\beta = (0, 1, 0)$ . Также предположим, что центр масс лежит на оси симметрии  $s = (s_1, 0, 0)$ , а матрицы  $B$  и  $C$  имеют вид  $B = \text{diag}(B_1, B_2, B_3)$ ,  $C = \text{diag}(C_1, C_2, C_3)$ . Случай, когда  $s = 0$ , то есть центр масс гиростата совпадает с неподвижной точкой, не рассматриваем.

Предположим, что система (1) допускает три инвариантных соотношения

$$x_1 = b_0 + b_1 v_1(t), \quad x_2 = d_0 + d_2 v_2(t), \quad x_3 = f_0 + f_3 v_3(t), \quad (3)$$

где  $b_0, b_1, d_0, d_2, f_0, f_3$  – постоянные параметры, подлежащие определению. Функции  $\lambda_1(t), \lambda_2(t)$  ищем в виде

$$\lambda_1(t) = \lambda_1 v_1(t), \quad \lambda_2(t) = \lambda_2 v_2(t). \quad (4)$$

Здесь  $\lambda_1, \lambda_2$  – постоянные параметры, подлежащие определению.

Поставим задачу определения условия существования программного движения гиростата, описываемых инвариантными соотношениями (3). При заданных ограничениях (4) на компоненты гиростатического момента, построить частное решение системы (1), (2), которое задает программное движение (3),

**Основная часть.** Запишем уравнения (1) и интегралы (2) в скалярной форме

$$(x_1 + \lambda_1(t))' = a_2 \lambda_2(t) x_3 + a_2 B_3 x_2 v_3 - a_2 B_2 x_3 v_2 + (C_3 - C_2) v_2 v_3,$$

$$(x_2 + \lambda_2(t))' = (a_1 - a_2) x_1 x_3 - a_2 \lambda_1(t) x_3 + a_2 B_1 x_3 v_1 - a_1 B_3 x_1 v_3 - s_1 v_3 + (C_1 - C_2) v_1 v_3, \quad (5)$$

$$\dot{x}_3 = (a_2 - a_1) x_1 x_2 - a_1 \lambda_2(t) x_1 + a_2 \lambda_1(t) x_2 + a_1 B_2 x_1 v_2 - a_2 B_1 x_2 v_1 + s_1 v_2 + (C_2 - C_1) v_1 v_2,$$

$$\dot{v}_1 = a_2 (x_3 v_2 - x_2 v_3), \quad \dot{v}_2 = a_1 x_1 v_3 - a_2 x_3 v_1, \quad \dot{v}_3 = a_2 x_2 v_1 - a_1 x_1 v_2, \quad v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 = 1, \quad (6)$$

$$(x_1 + \lambda_1(t)) v_1 + (x_2 + \lambda_2(t)) v_2 + x_3 v_3 - \frac{1}{2} (B_1 - B_3) v_1^2 - \frac{1}{2} (B_2 - B_3) v_2^2 = k_*, \quad (7)$$

где  $k_* = k + B_3 / 2$ .

Внесем равенства (3), (4) в систему (5). Тогда имеем систему уравнений вида

$$a_2 f_0 (b_1 + \lambda_1 - \lambda_2 + B_2) v_2 - a_2 d_0 (b_1 + \lambda_1 + B_3) v_3 + \\ + [a_2 f_3 (b_1 + \lambda_1 - \lambda_2 + B_2) - a_2 d_2 (b_1 + \lambda_1 + B_3) - C_3 + C_2] v_2 v_3 = 0,$$

$$\begin{aligned}
 & f_0(a_2d_2 + a_2\lambda_2 + a_1b_1 - a_2b_1 - \lambda_1a_2 + a_2B_1)v_1 + [b_0(a_1d_2 + a_1\lambda_2 - \\
 & - a_1f_3 + a_2f_3 + a_1B_3) + s_1]v_3 + [b_1(a_1d_2 + a_1\lambda_2 - a_1f_3 + a_2f_3 + \\
 & + a_1B_3) - a_2f_3(d_2 + \lambda_2 - \lambda_1 + B_1) - C_1 + C_3]v_1v_3 + b_0f_0(a_2 - a_1) = 0, \\
 & d_0(a_2f_3 - a_2b_1 - a_2\lambda_1 + a_1b_1 + a_2B_1)v_1 + [b_0(a_1f_3 + a_2d_2 - a_1d_2 - \\
 & - a_1\lambda_2 + a_1B_2) + s_1]v_2 + [a_2d_2(f_3 - b_1 - \lambda_1 + B_1) + a_1b_1(-f_3 + d_2 + \\
 & + \lambda_2 - B_2) - C_2 + C_1]v_1v_2 + b_0d_0(a_1 - a_2) = 0,
 \end{aligned}$$

Согласно методу инвариантных соотношений [9], потребуем, чтобы эти равенства выполнялись для любых значений  $v_1, v_2, v_3$ . В результате получим систему алгебраических уравнений на параметры задачи

$$a_2f_0(b_1 + \lambda_1 - \lambda_2 + B_2) = 0, \quad a_2d_0(b_1 + \lambda_1 + B_3) = 0, \quad (8)$$

$$a_2f_3(b_1 + \lambda_1 - \lambda_2 + B_2) - a_2d_2(b_1 + \lambda_1 + B_3) - C_3 + C_2 = 0;$$

$$f_0(a_2d_2 + a_2\lambda_2 + a_1b_1 - a_2b_1 - a_2\lambda_1 + a_2B_1) = 0,$$

$$b_0(a_1d_2 + a_1\lambda_2 - a_1f_3 + a_2f_3 + a_1B_3) + s_1 = 0, \quad (9)$$

$$b_1(a_1d_2 + a_1\lambda_2 - a_1f_3 + a_2f_3 + a_1B_3) - a_2f_3(d_2 + \lambda_2 - \lambda_1 + B_1) - C_1 + C_3 = 0, \quad b_0f_0(a_2 - a_1) = 0;$$

$$d_0(a_2f_3 - a_2b_1 - a_2\lambda_1 + a_1b_1 + a_2B_1) = 0,$$

$$b_0(a_1f_3 + a_2d_2 - a_1d_2 - a_1\lambda_2 + a_1B_2) + s_1 = 0, \quad (10)$$

$$a_2d_2(f_3 - b_1 - \lambda_1 + B_2) + a_1b_1(-f_3 + d_2 + \lambda_2 - B_2) - C_2 + C_1 = 0, \quad b_0d_0(a_1 - a_2) = 0;$$

Равенства (8)–(10) являются необходимыми условиями существования инвариантных соотношений (3) у уравнений (1), (2).

Система (8)–(10) совместна, приведем пример разрешимости этой системы. Положим  $d_2 = f_3$ . Так как по условию  $a_2 \neq a_1$ , то из четвертого равенства системы (9) следует, что либо  $b_0 = 0$ , либо  $f_0 = 0$ . Из второго равенства системы (9) при  $b_0 = 0$  следует  $s_1 = 0$ , а это противоречит условию  $s_1 \neq 0$ . Таким образом,  $f_0 = 0$  и  $b_0 \neq 0$ . Рассуждая аналогично из четвертого равенства системы (10) получаем  $d_0 = 0$ . Принимая во внимание полученные равенства, запишем систему (8)–(10) в виде

$$a_2f_3(B_2 - B_3 - \lambda_2) - C_3 + C_2 = 0,$$

$$b_0(a_1\lambda_2 + a_2f_3 + a_1B_3) + s_1 = 0,$$

$$b_1(a_1\lambda_2 + a_2f_3 + a_1B_3) - a_2f_3(f_3 + \lambda_2 - \lambda_1 + B_1) - C_1 + C_3 = 0, \quad (11)$$

$$b_0(a_2f_3 - a_1\lambda_2 + a_1B_2) + s_1 = 0,$$

$$a_2f_3(f_3 - b_1 - \lambda_1 + B_2) + a_1b_1(\lambda_2 - B_2) - C_2 + C_1 = 0;$$

Из (11) находим параметры  $b_0, b_1, d_0, d_2, f_0, f_3, \lambda_2$ , причем параметр  $\lambda_1$  можно брать произвольным

$$\lambda_2 = \frac{B_2 - B_3}{2}, \quad b_0 = -\frac{2s_1(B_2 - B_3)}{(B_2^2 - B_3^2)a_1 + 4(C_3 - C_2)}, \quad d_2 = f_3 = \frac{2(C_3 - C_2)}{a_2(B_2 - B_3)},$$

$$b_1 = \frac{2a_2(B_2 - B_3)^2(C_1 - C_2) + 4(C_3 - C_2) \left[ 2(C_3 - C_2) - a_2^2(B_2 - B_3)(\lambda_1 - B_1) \right]}{a_2(B_2 - B_3) \left[ a_1(B_2 - B_3)^2 + 4(C_3 - C_2) \right]} \quad (12)$$

Таким образом, система (8)–(10) разрешима и ее решение представимо равенствами  $d_0 = f_0 = 0$  и (12). При найденных параметрах динамические уравнения (5) обращаются в тождество, поэтому остается проинтегрировать уравнения Пуассона (6) при наличии двух первых интегралов (7)

Выпишем уравнения (6) с учетом  $d_0 = f_0 = 0$ ,  $d_2 = f_3$

$$\dot{v}_1 = 0, \quad \dot{v}_2 = [a_1 b_0 + (a_1 b_1 - a_2 f_3) v_1] v_3, \quad \dot{v}_3 = -[a_1 b_0 + (a_1 b_1 - a_2 f_3) v_1] v_2. \quad (13)$$

Из первого уравнения (13) следует, что  $v_1 = v_1^{(0)} = \text{const}$ . Обозначив через  $L = a_1 b_0 + (a_1 b_1 - a_2 f_3) v_1^{(0)}$ , найдем решение оставшихся уравнений системы (13)

$$\dot{v}_2 = L v_3, \quad \dot{v}_3 = -L v_2 \quad (14)$$

Эта система сводится к обыкновенному однородному дифференциальному уравнению второго порядка с постоянными коэффициентами  $\ddot{v}_2 + L^2 v_2 = 0$ . Корни характеристического уравнения чисто мнимые  $k_{1,2} = \pm i\sqrt{L^2}$ . Тогда общее решение системы (14) следующее

$$v_2 = C_1 \cos \sqrt{L^2} t + C_2 \sin \sqrt{L^2} t, \quad v_3 = -C_1 \sin \sqrt{L^2} t + C_2 \cos \sqrt{L^2} t, \quad (15)$$

Итак, найдено решение системы (13), что позволяет записать искомые функции  $x_1, x_2, x_3$  в виде

$$x_1 = b_0 + b_1 v_1^{(0)}, \quad x_2 = d_2 v_2(t), \quad x_3 = d_2 v_3(t), \quad (16)$$

где  $b_0, b_1, d_2$  записаны в виде (12),  $v_2(t), v_3(t)$  в виде (15), а вектор гиросtatического момента представим в виде

$$\boldsymbol{\lambda} = \lambda_1 v_1^{(0)} \boldsymbol{\alpha} + \frac{B_2 - B_3}{2} \left( C_1 \cos \sqrt{L^2} t + C_2 \sin \sqrt{L^2} t \right) \boldsymbol{\beta}.$$

**Выводы.** В статье установлены условия существования у уравнений движения гиростата под действием потенциальных и гироскопических сил с переменным гиросtatическим моментом  $\boldsymbol{\lambda} = \lambda_1(t) \boldsymbol{\alpha} + \lambda_2(t) \boldsymbol{\beta}$  трех инвариантных соотношений (3). Функции  $v_1(t), v_2(t), v_3(t)$  выражаются через элементарные функции времени. Это позволило построить новое частное решение уравнений движения гиростата  $x_i = x_i(t), v_i = v_i(t), i = 1, 2, 3$ . Полученные результаты являются обобщением исследований проведенных в работе [11].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горр Г.В. Движение гиростата / Г.В. Горр, А.М. Ковалев. – К.: Наук. думка, 2013. – 408 с.
2. Ковалева Л.М. Равномерные вращения вокруг наклонной оси твердого тела с одним маховиком / Л.М. Ковалева, А.Е. Позднякович // Механика твердого тела. – 2000. – № 30. – С. 100-105.
3. Волкова О.С. Маятниковые вращения тяжелого гиростата с переменным гиросtatическим моментом / О.С. Волкова, И.Н. Гашененко // Механика твердого тела. – 2009. – № 39. – С. 42-49.

4. Горр Г.В. О некоторых классах регулярной прецессии гиростата с переменным гиростатическим моментом относительно наклонной оси в обобщенной задаче динамики / Г.В. Горр, А.В. Мазнев // Тр. ИПММ НАНУ. – 2010. – № 21. – С. 64-75.
5. Котов Г.А. Прецессии общего вида в задаче о движении гиростата, несущего два маховика с переменным гиростатическим моментом / Г.А. Котов // Механика твердого тела. – 2013. – № 43. – С. 79-89.
6. Пуанкаре А. Избранные труды. В 3-х ч. Ч. 2. Новые методы небесной механики / Анри Пуанкаре. – М.: Наука, 1971. – 771 с.
7. Леви-Чивита Т. Курс теоретической механики. В 2-х ч. Ч. 2. Кинематика. Принципы механики / Т. Леви-Чивита, У. Амальди. – М.: Изд-во иностр. лит. – 1951. – 555 с.
8. Горр Г.В. Динамика гиростата, имеющего неподвижную точку / Г.В. Горр, А.В. Мазнев. – Донецк: ДонНУ, 2010. – 364 с.
9. Ковалев А.М. Инвариантные соотношения неавтономных систем дифференциальных уравнений с приложением к механике / А.М. Ковалев, Г.В. Горр, В.Н. Неспирный // Механика твердого тела. – 2013. – № 43. – С. 3-18.
10. Харламов П.В. Об уравнениях движения системы твердых тел / П.В. Харламов // Механика твердого тела. – 1974. – № 4. – С. 52-73.
11. Мазнев А.В. Один случай трех инвариантных соотношений в задаче о движении симметричного гиростата / А.В. Мазнев, Т.В. Белоконь // Механика твердого тела. – 2014. – № 44. – С. 27-33.

*Поступила в редакцию 22.04.2016 г.*

### THREE INVARIANT RELATIONS IN THE MOTION OF A GYROSTAT WITH TWO ROTATING ROTORS PROBLEM

*A.V. Maznyev, T.V. Belokon*

Conditions for the existence of three invariant relations are obtained in the problem of motion of a symmetric gyrost at carrying two rotating rotor. A new solution to the equations of motion of gyrost at with variable gyrost atic moment, which is expressed in terms of elementary functions that depend on the time is found.

**Keywords:** gyrost at; rotor; variable gyrost atic moment, invariant relations.

#### **Мазнев Александр Владимирович**

доктор физико-математических наук, доцент

ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк,

профессор кафедры высшей математики и методики преподавания математики

maznev\_av@rambler.ru

83001, г. Донецк, ул. Университетская, 24

+38-066-914-08-79

#### **Белоконь Татьяна Валериевна**

ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк,

аспирант кафедры высшей математики и методики преподавания математики

83001, г. Донецк, ул. Университетская, 24

B.Tatyana13@mail.ru

+38-099-4651190

#### **Maznyev Oleksandr Vladimirovich**

Doctor of Physico-Mathematical Sciences, Docent

Donetsk National University, Donetsk

Professor at the Department of higher mathematics and methods of teaching mathematics

#### **Belokon Tatyana Valerievna**

Donetsk National University, Donetsk

Postgraduate at the Department of higher mathematics and methods of teaching mathematics

УДК 539.3:534.1

**СПЕКТРЫ ПРОДОЛЬНЫХ ВОЛН В ФУНКЦИОНАЛЬНО-ГРАДИЕНТНЫХ  
ТРАНСВЕРСАЛЬНО ИЗОТРОПНЫХ ЦИЛИНДРАХ  
С ЖИДКОСТНЫМ ЗАПОЛНЕНИЕМ**© 2016. *И.А. Моисеенко, В.А. Моисеенко*

Волновое движение в составном волноводе описывается на основе полной системы уравнений динамической теории упругости и уравнений движения идеальной сжимаемой жидкости. Модули упругости и плотность материала цилиндра задаются экспоненциально-степенной функцией от радиальной координаты. Для компонент вектора перемещений и тензора напряжений в области цилиндра получены разложения в равномерно и абсолютно сходящиеся ряды по обобщенной кольцевой координате. Получены также дисперсионные соотношения, описывающие спектры гармоник осесимметричных нормальных продольных волн в заполненном жидкостью радиально неоднородном цилиндрическом волноводе со свободной или жестко закрепленной внешней граничной поверхностью. Изучены эффекты влияния параметров радиальной неоднородности на топологию дисперсионных спектров и распределение фазовых скоростей распространяющихся нормальных волн.

**Ключевые слова:** заполненный жидкостью; цилиндрический волновод; нормальные волны; функционально-градиентный; трансверсально-изотропный.

**Введение.** Изучение волновых процессов в составных волноводах типа «изотропное упругое тело – идеальная сжимаемая жидкость» началось с теоретической [1] и экспериментальной [2] работ, в которых соответственно была сформулирована и экспериментально обоснована осесимметричная модель дисперсии в бесконечном, заполненном жидкостью цилиндрическом волноводе. Дальнейшие исследования для составных волноводов указанного типа нашли отражение в [3–7]. Расширение области исследований на волноводы типа «анизотропное упругое тело – идеальная сжимаемая жидкость» связано с рассмотрением задачи распространения продольных волн для погруженного в жидкость анизотропного цилиндра [8], где с использованием численных методов решена задача определения фазовых скоростей, а также трансверсально-изотропного цилиндра [9]. В дальнейшем исследования были обобщены на случай распространения неосесимметричных волн для трансверсально-изотропных цилиндров одновременно заполненных жидкостью и погруженных в жидкость [10, 11], погруженных в жидкость [12], заполненных жидкостью [13].

Известные исследования волновых процессов в составных цилиндрических волноводах типа «упругое тело – идеальная сжимаемая жидкость», основывающиеся на пространственных уравнениях волновой динамики, до настоящего времени в основном опирались на представление решений через цилиндрические функции и, как следствие, ограничивались случаями изотропных и трансверсально-изотропных материалов упругой компоненты волновода. Переход к рассмотрению нового поколения композиционных функционально-градиентных материалов для упругой компоненты составных волноводов требует новых решений. Вопросы теоретического и численно-аналитического исследования эффектов влияния фактора радиальной функционально-градиентной неоднородности трансверсально-изотропных материалов цилиндрических волноводов на характеристики дисперсионных спектров и фазовых скоростей распространяющихся нормальных осесимметричных волн в сплошных цилиндрах рассматривались применительно к волнам крутильного и продольно-сдвигового типов соответственно в [14, 15], в полых цилиндрах кольцевого сечения применительно к волнам крутильного типа в [16].

В данной работе методика построения и анализа дисперсионных соотношений для цилиндрических волноводов из функционально-градиентных неоднородных трансверсально-изотропных материалов распространена на случай осесимметричных продольных волн вдоль протяженных цилиндров кольцевого сечения, заполненных идеально сжимаемой жидкостью.

**Постановка задачи.** Рассматривается протяженный, заполненный невязкой сжимаемой (идеальной) жидкостью трансверсально-изотропный цилиндр концентрического кольцевого сечения с внутренним радиусом  $R_1$  и внешним радиусом  $R_2$ . Область волновода занимает в отнесенных к нормирующему параметру  $R_* = (R_2 + R_1)/2$  безразмерных цилиндрических координатах область  $V = V_0 \cup V_1$ , где  $V_1 = \{r \in [1-h, 1+h]; 0 \leq \theta \leq 2\pi; z \in (-\infty, \infty)\}$  область цилиндра нормированной толщины  $2h = (R_2 - R_1)/R_*$ ,  $V_0 = \{r \in [0, 1-h]; 0 \leq \theta \leq 2\pi; z \in (-\infty, \infty)\}$  область заполнителя. Задача анализа спектров и свойств нормальных упругих волн вдоль рассматриваемого волновода формулируется в системе нормированных безразмерных цилиндрических координат с использованием соотношений пространственной линейной математической модели динамического напряженно-деформированного состояния упругих тел с усложненными физико-механическими свойствами в области цилиндра, а также уравнениями гидродинамики для идеальной сжимаемой жидкости в области заполнителя. Данные соотношения формулируются для проекций на оси цилиндрической системы координат безразмерного вектора динамических упругих волновых перемещений в области цилиндра  $(u_r, u_\theta, u_z)$ , отнесенных к нормирующему параметру  $R_*$ , и вектора скоростей в области заполнителя  $(v_r, v_\theta, v_z)$ , отнесенных к скорости объемных волн в нем  $C_0$ , а также для безразмерных характеристик напряженно-деформированного состояния на основных площадках цилиндрической координатной системы  $(\sigma_{rr}, \sigma_{\theta\theta}, \sigma_{zz}, \sigma_{\theta z}, \sigma_{rz}, \sigma_{r\theta})$  в области цилиндра и давления  $p$  в области заполнителя, отнесенных к нормирующему параметру  $c_*$ .

Основные соотношения модели в случае продольных волн в области цилиндра включают систему дифференциальных уравнений движения

$$\begin{aligned} \partial_r \sigma_{rr} + \partial_z \sigma_{rz} + r^{-1}(\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}) - (\rho_1 R_*^2 / c_*) \partial_t^2 u_r &= 0, \\ \partial_r \sigma_{rz} + r^{-1} \sigma_{rz} + \partial_z \sigma_{zz} - (\rho_1 R_*^2 / c_*) \partial_t^2 u_z &= 0; \end{aligned} \quad (1)$$

определяющие соотношения обобщенного линейного закона Гука для компонент тензора напряжений  $(\sigma_{rr}, \sigma_{\theta\theta}, \sigma_{zz}, \sigma_{\theta z} \equiv 0, \sigma_{rz}, \sigma_{r\theta} \equiv 0)$  в случае трансверсально-изотропного материала

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} &= c_{11} \varepsilon_{rr} + c_{12} \varepsilon_{\theta\theta} + c_{13} \varepsilon_{zz}, & \sigma_{\theta\theta} &= c_{12} \varepsilon_{rr} + c_{11} \varepsilon_{\theta\theta} + c_{13} \varepsilon_{zz}, \\ \sigma_{zz} &= c_{13} \varepsilon_{rr} + c_{13} \varepsilon_{\theta\theta} + c_{33} \varepsilon_{zz}, & \sigma_{rz} &= c_{44} \varepsilon_{rz}; \end{aligned} \quad (2)$$

уравнения связи между компонентами тензора малых деформаций  $(\varepsilon_{rr}, \varepsilon_{\theta\theta}, \varepsilon_{zz}, \varepsilon_{\theta z} \equiv 0, \varepsilon_{rz}, \varepsilon_{r\theta} \equiv 0)$  и компонентами безразмерного вектора динамических упругих волновых перемещений  $(u_r, u_\theta \equiv 0, u_z)$

$$\varepsilon_{rr} = \partial_r u_r, \quad \varepsilon_{\theta\theta} = r^{-1} u_r, \quad \varepsilon_{zz} = \partial_z u_z, \quad \varepsilon_{rz} = \partial_z u_r + \partial_r u_z. \quad (3)$$

В области заполнителя потенциальные, безвихревые движения описываются системой уравнений гидродинамики для невязкой сжимаемой жидкости, включающей волновое уравнение для потенциала скоростей

$$\left( \partial_r^2 + r^{-1} \partial_r + \partial_z^2 - R_*^2 C_0^{-2} \partial_t^2 \right) \varphi = 0,$$

а также представления для компонент безразмерного вектора скоростей  $(v_r, v_\theta \equiv 0, v_z)$  и безразмерной характеристики давления  $p$

$$v_r = -\partial_r \varphi, \quad v_z = -\partial_z \varphi, \quad p = (\rho_0 C_0 R_* / c_*) \partial_t \varphi.$$

Описанная модель включает условия сопряжения на внутренней поверхности бесконечного цилиндра и граничные условия на его внешней поверхности, которые в случае жестко закрепленной или свободной поверхности соответственно имеют вид

$$\sigma_{rz} \Big|_{r=1-h} = (\sigma_{rr} + p) \Big|_{r=1-h} = (R_* \partial_t u_r - C_0 v_r) \Big|_{r=1-h} = u_r \Big|_{r=1+h} = u_z \Big|_{r=1+h} = 0; \quad (4)$$

$$\sigma_{rz} \Big|_{r=1-h} = (\sigma_{rr} + p) \Big|_{r=1-h} = (R_* \partial_t u_r - C_0 v_r) \Big|_{r=1-h} = \sigma_{rr} \Big|_{r=1+h} = \sigma_{rz} \Big|_{r=1+h} = 0. \quad (5)$$

Во введенных представлениях  $(c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{33}, c_{44})$  – отнесенные к нормирующему параметру  $c_*$  модули упругости трансверсально-изотропного материала волновода;  $\rho_0$  и  $\rho_1$  – плотность соответственно заполнителя и материала цилиндра;  $t$  – время;  $\partial_j = \partial/\partial j$  ( $j = r, z, t$ ).

Полагается, что материал цилиндра является функционально-неоднородным в радиальных направлениях по всем своим физико-механическим свойствам, а его плотность и нормированные модули упругости соответственно описываются представлениями

$$\rho_1 = \tilde{\rho} \exp(f_{\lambda,q}(r)), \quad c_j = \tilde{c}_j \exp(f_{\lambda,q}(r)) \quad (j \in \{11, 12, 13, 33, 44\}),$$

$$f_{\lambda,q}(r) = \lambda((r-1)/h)^q, \quad (6)$$

в которых  $\lambda$  ( $\lambda \in \mathbb{R}$ ) и  $q$  ( $q \in \{0\} \cup \mathbb{N}$ ) – параметры функциональной неоднородности.

**Получение дисперсионных соотношений.** В исследуемых нормальных волнах с круговой частотой  $\omega$  и нормированным параметром  $R_*$  продольным волновым числом  $k$ , следуя методу разделения переменных, в соответствующих областях вводятся комплексные представления

$$u_r(r, z, t) = \tilde{u}_r(r) \exp(-f_{\lambda,q}(r)/2) \exp(-i\omega t + ikz),$$

$$u_z(r, z, t) = i\tilde{u}_z(r) \exp(-f_{\lambda,q}(r)/2) \exp(-i\omega t + ikz),$$

$$v_r(r, z, t) = i\tilde{v}_r(r) \exp(-i\omega t + ikz), \quad v_z(r, z, t) = \tilde{v}_z(r) \exp(-i\omega t + ikz). \quad (7)$$

Последовательная подстановка представлений (6), (7) в соотношения модели (1)–(3) приводит в области цилиндра к системе обыкновенных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами

$$\begin{aligned}
 & \left( \tilde{c}_{11} \left( r^2 d_r^2 + r d_r - 1 \right) + \left( \Omega^2 - k^2 \tilde{c}_{44} \right) r^2 + \right. \\
 & \left. + \lambda p h^{-q} r (r-1)^{q-2} \left( \left( 1 - q r - \lambda q h^{-q} r (r-1)^q / 2 \right) \tilde{c}_{11} / 2 + (r-1) \tilde{c}_{12} \right) \right) \tilde{u}_r - \\
 & - k r \left( \left( \tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44} \right) r d_r + \lambda p h^{-q} r (r-1)^{q-1} \left( \tilde{c}_{13} - \tilde{c}_{44} \right) / 2 \right) \tilde{u}_z = 0, \\
 & \left( \tilde{c}_{44} \left( r^2 d_r^2 + r d_r \right) + \left( \Omega^2 - k^2 \tilde{c}_{33} \right) r^2 + \right. \\
 & \left. + \lambda q h^{-q} r (r-1)^{q-2} \left( 1 - q r - \lambda q h^{-q} r (r-1)^q / 2 \right) \tilde{c}_{44} / 2 \right) \tilde{u}_z + \\
 & + k r \left( \left( \tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44} \right) \left( r d_r + 1 \right) - \lambda q h^{-q} r (r-1)^{q-1} \left( \tilde{c}_{13} - \tilde{c}_{44} \right) / 2 \right) \tilde{u}_r = 0. \quad (8)
 \end{aligned}$$

Здесь  $\Omega^2 = \tilde{\rho} R_*^2 \omega^2 / c_*$ ,  $d_r = d/dr$ . В качестве метода построения базисных решений уравнений (8) в данной работе используется подход, основанный на представлениях искомого решения в виде рядов по обобщенной кольцевой координате. Вводится замена переменных  $r = hx + 1$  ( $x \in [-1, 1]$ ). С учетом физической модели рассматриваемой задачи для искомого решения вводятся представления

$$\tilde{u}_r(x) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m x^{m+\delta}, \quad \tilde{u}_z(x) = \sum_{m=0}^{\infty} b_m x^{m+\delta} \quad (|a_0| + |b_0| \neq 0) \quad (9)$$

с допустимыми значениями параметра  $\delta$ :  $\delta \in \{0, 1\}$  либо  $\text{Re}(\delta) > 1$ . Подстановка разложений (9) в уравнения (8) порождает систему рекуррентных уравнений относительно коэффициентов разложений (9), решение которой записывается в виде

$$\mathbf{X}_m = \sum_{j=1}^4 \mathbf{A}_j^{(m)} \cdot \mathbf{X}_{m-j} + \sum_{j=0}^3 \mathbf{A}_{5+j}^{(m)} \cdot \mathbf{X}_{m-q-j} + \sum_{j=0}^2 \mathbf{A}_{9+j}^{(m)} \cdot \mathbf{X}_{m-2q-j} \quad (m = 2, 3, \dots). \quad (10)$$

В качестве условия разрешимости указанной системы получаются четыре начальных условия, определяющие совместно с (10) четыре независимые базисные решения

$$\begin{aligned}
 \Upsilon_1 &= \{ \delta = 0, a_0 = 1, b_0 = 0, a_1 = 0, b_1 = 0 \}, \\
 \Upsilon_2 &= \{ \delta = 0, a_0 = 0, b_0 = 1, a_1 = 0, b_1 = 0 \}, \\
 \Upsilon_3 &= \{ \delta = 1, a_0 = 1, b_0 = 0, a_1 = -h/2, b_1 = -kh(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44}) / (2\tilde{c}_{44}) \}, \\
 \Upsilon_4 &= \{ \delta = 1, a_0 = 0, b_0 = 1, a_1 = kh(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44}) / (2\tilde{c}_{11}), b_1 = -h/2 \}. \quad (11)
 \end{aligned}$$

В записи соотношений (10) использованы обозначения векторно-матричных объектов размерности 2:  $\mathbf{X}_m$  – вектор-столбцы с элементами  $[\mathbf{X}_m]_1 = a_m$ ,  $[\mathbf{X}_m]_2 = b_m$  ( $m = \overline{0, \infty}$ );  $\mathbf{X}_m = \mathbf{O}$  ( $m = \overline{-2q, -1}$ );  $\mathbf{O}$  – нулевой вектор-столбец;  $\mathbf{A}_n^{(m)}$  ( $n = \overline{1, 11}$ ;  $m = 2, 3, \dots$ ) – квадратные матрицы, ненулевые элементы которых имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 \left[ \mathbf{A}_1^{(m)} \right]_{1,1} &= \left[ \mathbf{A}_1^{(m)} \right]_{2,2} = -h(2m + 2\delta - 3)/(m + \delta), \\
 \left[ \mathbf{A}_1^{(m)} \right]_{1,2} &= kh(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44})/((m + \delta)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_1^{(m)} \right]_{2,1} &= -kh(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44})/((m + \delta)\tilde{c}_{44}), \\
 \left[ \mathbf{A}_2^{(m)} \right]_{1,1} &= -h^2((m + \delta - 3)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11} + \Omega^2 - k^2\tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_2^{(m)} \right]_{1,2} &= 2kh^2(m + \delta - 2)(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_2^{(m)} \right]_{2,1} &= -kh^2(2m + 2\delta - 3)(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{44}), \\
 \left[ \mathbf{A}_2^{(m)} \right]_{2,2} &= -h^2((m + \delta - 2)^2\tilde{c}_{44} + \Omega^2 - k^2\tilde{c}_{33})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{44}), \\
 \left[ \mathbf{A}_3^{(m)} \right]_{1,1} &= -2h^3(\Omega^2 - k^2\tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_3^{(m)} \right]_{1,2} &= kh^3(m + \delta - 3)(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_3^{(m)} \right]_{2,1} &= -kh^3(m + \delta - 2)(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{44}), \\
 \left[ \mathbf{A}_3^{(m)} \right]_{2,2} &= -2h^3(\Omega^2 - k^2\tilde{c}_{33})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{44}), \\
 \left[ \mathbf{A}_4^{(m)} \right]_{1,1} &= -h^4(\Omega^2 - k^2\tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_4^{(m)} \right]_{2,2} &= -h^4(\Omega^2 - k^2\tilde{c}_{33})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{44}), \\
 \left[ \mathbf{A}_5^{(m)} \right]_{1,1} &= \left[ \mathbf{A}_5^{(m)} \right]_{2,2} = -\lambda q(q - 1)/(2(m + \delta)(m + \delta - 1)), \\
 \left[ \mathbf{A}_6^{(m)} \right]_{1,1} &= \lambda qh((2q - 1)\tilde{c}_{11} - 2\tilde{c}_{12})/(2(m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_6^{(m)} \right]_{1,2} &= \lambda qkh(\tilde{c}_{13} - \tilde{c}_{44})/(2(m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_6^{(m)} \right]_{2,1} &= \lambda qkh(\tilde{c}_{13} - \tilde{c}_{44})/(2(m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{44}), \\
 \left[ \mathbf{A}_6^{(m)} \right]_{2,2} &= \lambda qh(2q - 1)/(2(m + \delta)(m + \delta - 1)), \\
 \left[ \mathbf{A}_7^{(m)} \right]_{1,1} &= \lambda qh^2(q\tilde{c}_{11} - 2\tilde{c}_{12})/(2(m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_7^{(m)} \right]_{1,2} &= \lambda qkh^2(\tilde{c}_{13} - \tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}), \\
 \left[ \mathbf{A}_7^{(m)} \right]_{2,1} &= \lambda qkh^2(\tilde{c}_{13} - \tilde{c}_{44})/((m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{44}), \\
 \left[ \mathbf{A}_7^{(m)} \right]_{2,2} &= \lambda q^2h^2/(2(m + \delta)(m + \delta - 1)), \\
 \left[ \mathbf{A}_8^{(m)} \right]_{1,2} &= \lambda qkh^3(\tilde{c}_{13} - \tilde{c}_{44})/(2(m + \delta)(m + \delta - 1)\tilde{c}_{11}),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}_8^{(m)}]_{2,1} &= \lambda q k h^3 (\tilde{c}_{13} - \tilde{c}_{44}) / (2(m+\delta)(m+\delta-1)\tilde{c}_{44}), \\ [\mathbf{A}_9^{(m)}]_{1,1} &= [\mathbf{A}_9^{(m)}]_{2,2} = \lambda^2 q^2 / (4(m+\delta)(m+\delta-1)), \\ [\mathbf{A}_{10}^{(m)}]_{1,1} &= [\mathbf{A}_{10}^{(m)}]_{2,2} = \lambda^2 q^2 h / (2(m+\delta)(m+\delta-1)), \\ [\mathbf{A}_{11}^{(m)}]_{1,1} &= [\mathbf{A}_{11}^{(m)}]_{2,2} = \lambda^2 q^2 h^2 / (4(m+\delta)(m+\delta-1)). \end{aligned}$$

Для введенных матричных обозначений на основании (9), (11) получаются представления для четырех базисных вектор-функций амплитудных составляющих перемещений

$$\mathbf{U}^{(j)}(x) = \begin{bmatrix} \tilde{u}_r^{(j)}(x) \\ \tilde{u}_z^{(j)}(x) \end{bmatrix} = \left( \sum_{m=0}^{\infty} x^{m+\delta} \mathbf{X}_m \right) \Big|_{\Gamma_j} \quad (j = \overline{1,4}). \quad (12)$$

По аналогии с (7) вводятся представления

$$\begin{aligned} \sigma_j(r, z, t) &= \tilde{\sigma}_j(r) \exp(f_{\lambda, q}(r)/2) \exp(-i\omega t + ikz) \quad (j = rr, \theta\theta, zz), \\ \sigma_{rz}(r, z, t) &= i\tilde{\sigma}_{rz}(r) \exp(f_{\lambda, q}(r)/2) \exp(-i\omega t + ikz), \\ p(r, z, t) &= \tilde{p}(r) \exp(-i\omega t + ikz) \end{aligned} \quad (13)$$

и на основании (2), (3), (7), (9), (11) определяются четыре базисные вектор-функции амплитудных составляющих напряжений

$$\mathbf{S}^{(j)}(x) = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_{rr}^{(j)}(x) \\ \tilde{\sigma}_{rz}^{(j)}(x) \end{bmatrix} = \left( \sum_{m=0}^{\infty} x^{m+\delta} \mathbf{Q}_m(x) \cdot \mathbf{X}_m \right) \Big|_{\Gamma_j} \quad (j = \overline{1,4}). \quad (14)$$

Здесь  $\mathbf{Q}_m(x)$  – квадратные матрицы размерности 2 с элементами

$$\begin{aligned} [\mathbf{Q}_m(x)]_{1,1} &= ((m+\delta)/x - \lambda q x^{q-1}/2) \tilde{c}_{11}/h + \tilde{c}_{12}/(hx+1), \\ [\mathbf{Q}_m(x)]_{1,2} &= -k\tilde{c}_{13}, \quad [\mathbf{Q}_m(x)]_{2,1} = k\tilde{c}_{44}, \\ [\mathbf{Q}_m(x)]_{2,2} &= ((m+\delta)/x - \lambda q x^{q-1}/2) \tilde{c}_{44}/h. \end{aligned}$$

Специальный вид комплексных представлений для функций нормированных упругих перемещений в форме (7) обуславливает при  $m \rightarrow \infty$  справедливость оценок

$$\|\mathbf{A}_j^{(m)}\| \leq \kappa_j \quad (j = \overline{1,2}), \quad \|\mathbf{A}_3^{(m)}\| \leq \kappa_3/m, \quad \|\mathbf{A}_j^{(m)}\| \leq \kappa_j/m^2 \quad (j = \overline{4,11}),$$

непосредственным следствием которых является заключение об абсолютной и равномерной сходимости разложений (12), (14) на отрезке  $x \in [-1, 1]$ .

В области заполнителя на основании представлений (7), (13) определяются базисные решения в виде вектор-функций амплитудных составляющих скоростей и давления

$$\mathbf{V}(r) = \begin{bmatrix} \tilde{v}_r(r) \\ \tilde{v}_z(r) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \gamma J_1(\gamma r) \\ \beta k J_0(\gamma r) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}(r) = \begin{bmatrix} \tilde{p}(r) \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega^2 \rho_0 \tilde{p}^{-1} J_0(\gamma r) \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Здесь  $\gamma = \sqrt{C_0^{-2} \tilde{\rho}^{-1} c_* \Omega^2 - k^2}$ ,  $\beta = \Omega C_0^{-1} \sqrt{c_* \tilde{\rho}^{-1}}$ ,  $J_n(z)$  – функция Бесселя.

Условия сопряжения и граничные условия (4) или (5) для независимых базисных решений (12), (14) и (15) с учетом (11) определяют однородные системы линейных алгебраических уравнений, порождающие искомые дисперсионные уравнения, соответственно для жестко закрепленной

$$F_U(\Omega, k) = \det \begin{bmatrix} \tilde{u}_r^{(1)}(-1) & \tilde{u}_r^{(2)}(-1) & \tilde{u}_r^{(3)}(-1) & \tilde{u}_r^{(4)}(-1) & \beta^{-1} \tilde{v}_r(1-h) \\ \mathbf{S}^{(1)}(-1) & \mathbf{S}^{(2)}(-1) & \mathbf{S}^{(3)}(-1) & \mathbf{S}^{(4)}(-1) & \mathbf{P}(1-h) \\ \mathbf{U}^{(1)}(1) & \mathbf{U}^{(2)}(1) & \mathbf{U}^{(3)}(1) & \mathbf{U}^{(4)}(1) & \mathbf{O} \end{bmatrix} = 0$$

и свободной

$$F_S(\Omega, k) = \det \begin{bmatrix} \tilde{u}_r^{(1)}(-1) & \tilde{u}_r^{(2)}(-1) & \tilde{u}_r^{(3)}(-1) & \tilde{u}_r^{(4)}(-1) & \beta^{-1} \tilde{v}_r(1-h) \\ \mathbf{S}^{(1)}(-1) & \mathbf{S}^{(2)}(-1) & \mathbf{S}^{(3)}(-1) & \mathbf{S}^{(4)}(-1) & \mathbf{P}(1-h) \\ \mathbf{S}^{(1)}(1) & \mathbf{S}^{(2)}(1) & \mathbf{S}^{(3)}(1) & \mathbf{S}^{(4)}(1) & \mathbf{O} \end{bmatrix} = 0$$

внешней граничной поверхности волновода.

**Анализ результатов численных исследований.** При численном эксперименте в качестве базового радиально однородного  $(\lambda, q) = (0, 0)$  трансверсально-изотропного материала цилиндра был выбран  $Zn$  ( $c_* = 10^{10} \text{ H/m}^2$ )

$$\left\{ \tilde{c}_{11} = 16,35; \tilde{c}_{12} = 2,64; \tilde{c}_{13} = 5,17; \tilde{c}_{33} = 5,31; \tilde{c}_{44} = 3,78; \tilde{\rho} = 7134 \text{ кг/м}^3 \right\},$$

а в качестве заполнителя – вода  $\left\{ \rho = 1000 \text{ кг/м}^3; C_0 = 1500 \text{ м/с} \right\}$ . Расчет фрагментов спектров бегущих нормальных волн в составном волноводе проводился в диапазонах изменения нормализованной частоты  $\omega a/c_t \in [0; 20]$  и нормализованного продольного волнового числа  $ka \in [0; 65]$  ( $a = R_*$ ) для случаев неоднородного  $(\lambda, q) \in \{(\ln(2), 6); (-\ln(2), 6); (\ln(2), 7)\}$  и однородного  $(\lambda, q) = (0, 0)$  цилиндров нормированной толщины  $2h = 0,4$  со свободной внешней поверхностью. На рис. 1 и рис. 2 представлены спектры распространяющихся нормальных волн в составных волноводах с параметрами неоднородности соответственно  $(\lambda, q) = (\ln(2), 6)$  и  $(\lambda, q) = (-\ln(2), 6)$ . Нормирующий параметр  $c_t$  с размерностью скорости для всех рисунков имеет фиксированное значение, определяемое из условия равенства единице нижней ненулевой нормализованной критической частоты (мода с порядковым номером в спектре 3) в случае заполненного водой однородного цилиндрического тела волновода  $(\Omega_{0,0}^{(3)}(0) \approx 4,00893)$ . На рисунках сплошными линиями визуализированы моды, которые сохраняются в спектре для пустого цилиндра со свободными внутренней и внешней граничными поверхностями (“моды цилиндра”), пунктирными линиями – моды, порождаемые в составном волноводе заполнителем (“моды заполнителя”). Сравнительный анализ спектров для рассмотренных параметров неоднородности материала цилиндра показывает относительную стабильность общей качественной топологической

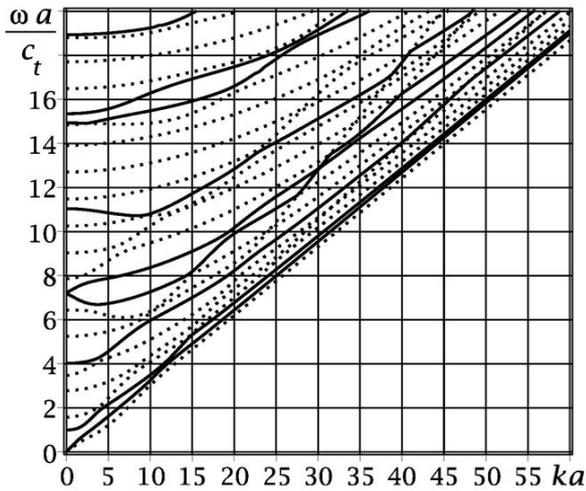


Рис. 1

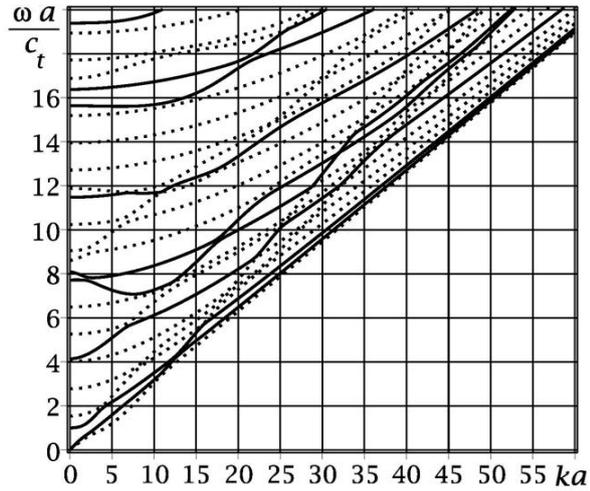
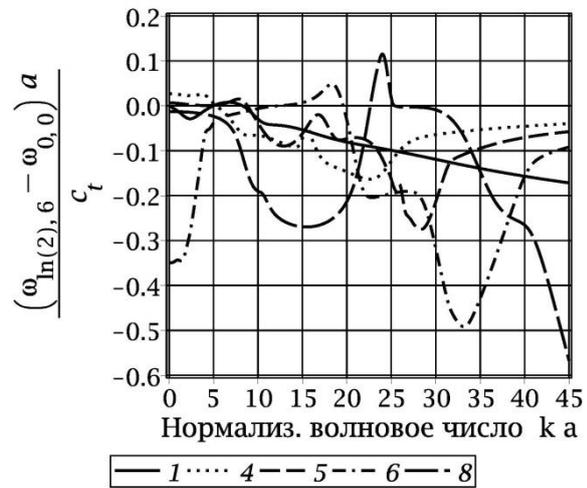


Рис. 2

картины мод распространяющихся волн. При этом отмечается локальное качественное влияние на характер поведения отдельных мод в конкретных частотных диапазонах, в частности, для “мод цилиндра” с порядковыми номерами 10, 11 и “мод заполнителя” с порядковыми номерами 8, 9 в длинноволновом диапазоне значений волнового параметра  $ka \in [0;10]$ . Для количественного анализа различий полученных спектров используется функция сравнения парных по номеру в соответствующих спектрах мод  $\Delta\Omega(k) = (\omega_{\lambda,q}(k) - \omega_{0,0}(k))a/c_t$ . С целью выявления парциального влияния фактора неоднородности на топологию спектра “мод цилиндра” и “мод заполнителя”, результаты анализа для каждой конкретной пары участвующих в сравнении составных волноводов однородный – неоднородный цилиндр поданы отдельно для первых пяти “мод цилиндра” (а) и “мод заполнителя” (б), а порядковый номер сопоставляемых мод в свою очередь визуализировался уникальным в рамках рисунка типом линии. Ниже представлены результаты численных расчетов для параметров неоднородности материала  $(\lambda, q) = (\ln(2), 6)$  (рис. 3),  $(\lambda, q) = (-\ln(2), 6)$  (рис. 4),  $(\lambda, q) = (\ln(2), 7)$  (рис. 5).



а



б

Рис. 3

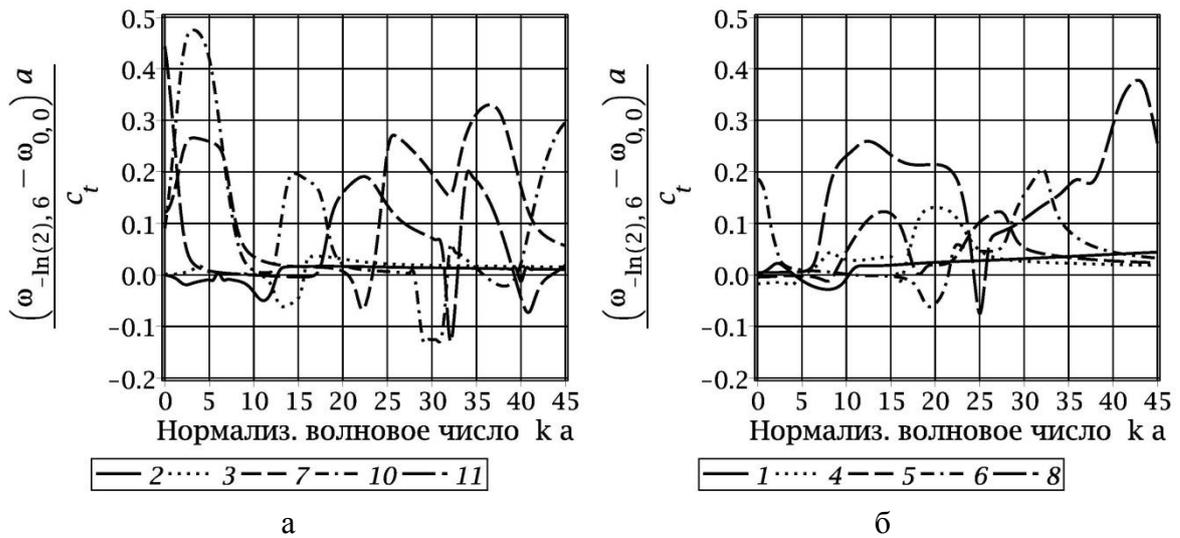


Рис. 4

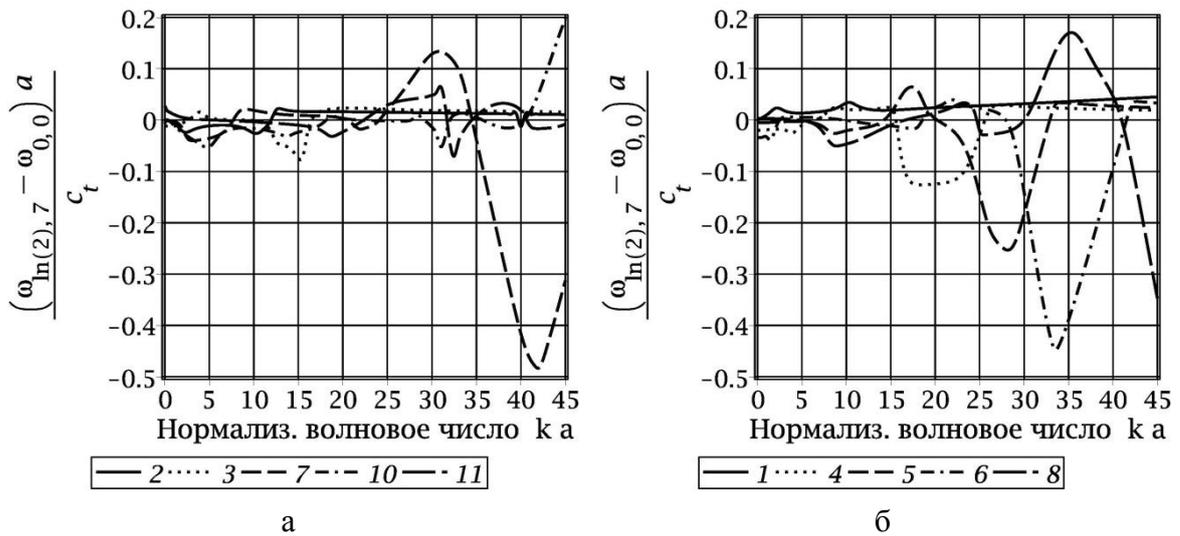


Рис. 5

В качестве основных результатов отмечается устойчивое на исследованном диапазоне изменения нормализованного продольного волнового числа  $ka \in [0; 65]$  практически для всех мод спектра: смещение в сторону понижения нормализованной частоты при локализованном увеличении физико-механических параметров материала цилиндра к его граничным поверхностям (рис. 3) и смещение в сторону повышения нормализованной частоты при аналогичном уменьшении указанных физико-механических параметров (рис. 4). Отмечается также относительное купирование влияние фактора неоднородности в длинноволновом диапазоне  $ka \in [0; 20]$  при асимметричной относительно серединной поверхности цилиндра радиальной неоднородности (рис. 5). На рис. 6 представлены графики нормализованных фазовых скоростей бегущих нормальных волн в составных волноводах, материал цилиндра которых имеет параметры  $(\lambda, q) = (\ln(2), 6)$  (а) и  $(\lambda, q) = (-\ln(2), 6)$  (б).

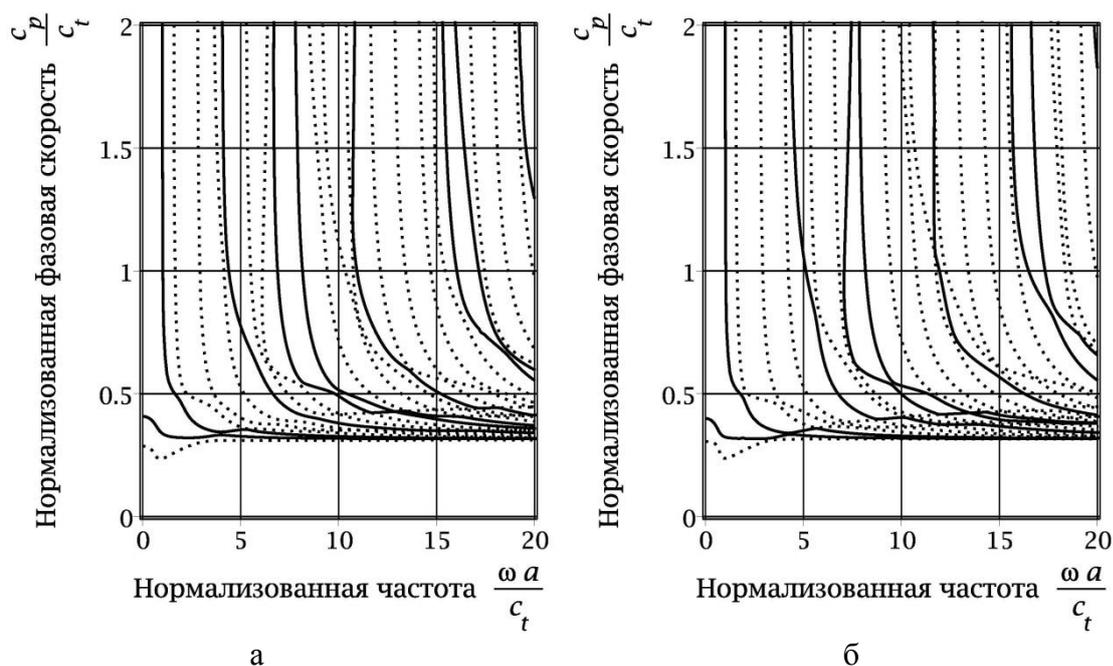


Рис. 6

**Выводы.** В результате проведенных исследований в форме абсолютно и равномерно сходящихся степенных рядов с определяемыми из явных рекуррентных соотношений коэффициентами получен набор независимых базисных решений системы дифференциальных уравнений, описывающих осесимметричные продольные нормальные упругие волны в протяженных полых цилиндрах концентрического кольцевого сечения с экспоненциально-степенной радиальной неоднородностью трансверсально-изотропного материала волновода. Полученные базисные решения совместно с классическими решениями для идеального сжимаемого заполнителя использованы для построения дисперсионных уравнений, определяющих спектры указанных волн для составных волноводов с жесткозакрепленными и свободными внешними граничными поверхностями. Изучены эффекты влияния параметров радиальной неоднородности на топологию дисперсионных спектров и распределение фазовых скоростей распространяющихся нормальных волн. Области использования результатов представленного исследования являются прочностные расчеты деталей машин, технологии ультразвуковой диагностики, акустоэлектроника.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Del Grosso V.A. Analysis of multimode acoustic propagation in liquid cylinders with realistic boundary conditions - application to sound speed and absorption measurements / V.A. Del Grosso // *Acustica*, – 1971. – Vol. 24, № 6. – P. 299-311.
2. Lafleur L.D. Low-frequency propagation modes in a liquid-filled elastic tube waveguide / L.D. Lafleur, F.D. Shields. // *J. Acoust. Soc. Am.* – 1985. – Vol. 97, № 3. – P. 1435-1445.
3. Гринченко В.Т. Распространение волн в полном упругом цилиндре с жидкостью / В.Т. Гринченко, Г.Л. Комисарова // *Прикладная механика*. – 1984. – Т. 20, № 1. – С. 21-26.
4. Гринченко В.Т. Свойства нормальных неосесимметричных волн в толстостенном цилиндре, заполненном жидкостью / В.Т. Гринченко, Г.Л. Комисарова. // *Прикладная механика*. – 1988. – Т. 24, № 10. – С. 15-20.
5. Комиссарова Г.Л. К решению задачи о распространении упругих волн в цилиндре с жидкостью / Г.Л. Комисарова. // *Прикладная механика*. – 1990. – Т. 26, № 8. – С. 25-29.

6. Гринченко В.Т. Свойства локализованных вблизи границ волновых движений в заполненном жидкостью цилиндре / В.Т. Гринченко, Г.Л. Комисарова // Акустичний вісник. – 2006. Т. 9, N 2. – С. 37–55.
7. Baik K. Theoretical Investigation of Phase Velocity, Group Velocity and Attenuation of Acoustic Waves in a Liquid-Filled Cylinder / K. Baik, J. Jiang, T.G. Leighton. – University of Southampton: ISVR Technical Report № 329. 2009. – 40 p.
8. Dayal V. Longitudinal waves in homogenous anisotropic cylindrical bars immersed in fluid / V. Dayal. // J. Acoust. Soc. Am. – 1993.– Vol. 93, N 3.– P. 1249–1255.
9. Nagy P.B. Longitudinal guided wave propagation in a transversely isotropic rod immersed in fluid / P.B. Nagy // J. Acoust. Soc. Am. –1995. – Vol. 98. – P. 454–457.
10. Berliner M.J. Wave propagation in fluid-loaded, transversely isotropic cylinders. Part I. Analytical formulation / M.J. Berliner, R. Solecki. // J. Acoust. Soc. Am. – 1996.– Vol. 99, N 4, Pt. 1.– P. 1841–1847.
11. Berliner M.J. Wave propagation in fluid-loaded, transversely isotropic cylinders. Part II. Numerical results / M.J. Berliner, R. Solecki // J. Acoust. Soc. Am. – 1996.– Vol. 99, N 4, Pt. 1.– P. 1848–1853.
12. Ahmad F. Guided waves in a transversely isotropic cylinder immersed in a fluid / F.Ahmad // J. Acoust. Soc. Am. – 2001.– Vol. 109, N 3.– P. 886–890.
13. Моисеенко В.А. Исследование структуры спектров продольных и низших изгибных нормальных волн в трансверсально-изотропном волноводе с жидким наполнителем / В.А. Моисеенко, И.А. Моисеенко // Теоретическая и прикладная механика. – 2003. – Вып. 37. – С. 190–194.
14. Моисеенко И.А. Спектры нормальных упругих волн кручения в экспоненциально-неоднородных трансверсально-изотропных цилиндрах / И.А. Моисеенко // Теоретическая и прикладная механика. – 2014. – № 9 (55). – С. 139-145.
15. Моисеенко И.А. Продольные волны в экспоненциально-неоднородных трансверсально-изотропных цилиндрах / И.А. Моисеенко // Вісник Запорізького національного університету. Серія: Фізико-математичні науки. – 2015. – № 3. – С. 179-189.
16. Моисеенко И.А. Волны кручения вдоль полого экспоненциально-неоднородного трансверсально-изотропного цилиндра с закрепленными границами / И.А. Моисеенко // Механика твердого тела. – 2014. – Вып. 44. – С. 132-139.

*Поступила в редакцию 25.04.2016 г.*

## THE SPECTRA OF LONGITUDINAL WAVES IN FUNCTIONALLY GRADED TRANSVERSELY ISOTROPIC LIQUID-FILLED CYLINDERS

*I.A. Moiseyenko, V.A. Moiseyenko*

Wave motion in a composite waveguide is described on the basis of the complete systems of equations of dynamic elasticity theory and equations of motion of ideal compressed liquid. The elastic modulus and density of the cylinder material are taken as an exponentially-power function of the radial coordinate. Expansions in uniformly and absolutely convergent series on generalized ring coordinate for the components of the vector displacements and the components of the tensor stresses in cylinder are obtained. Dispersion relations describing the spectra of harmonic axisymmetric normal longitudinal waves in the radially non-homogeneous liquid-filled cylindrical waveguide with free or rigidly fixed outer boundary surface are obtained. The effect of radial non-homogeneity ratios on the topology of the dispersion spectrums and distribution of the phase velocities of normal propagating waves studied.

**Keywords:** liquid-filled; cylindrical waveguide; normal waves; functionally graded; transversely isotropic.

### **Моисеенко Игорь Алексеевич**

кандидат физико-математических наук, доцент  
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк  
доцент кафедры теории упругости и вычислительной математики  
ул. Университетская 24, 83001, г. Донецк  
mian@i.ua  
+38-050-0845402

**Моисеенко Виктор Алексеевич**

кандидат физико-математических наук, доцент  
Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, г. Макеевка  
доцент кафедры высшей и прикладной математики и информатики  
ул. Державина 2, г. Макеевка  
vamvamv@ukr.net  
+38-095-20423452

**Moiseyenko Igor Alekseyevich**

Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Docent  
Donetsk National University, Donetsk  
Associate Professor at the Department the Theory of Elasticity and Numerical Mathematics  
Universitetska street, build 24, Donetsk, 83001

**Moiseyenko Victor Alekseyevich**

Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Docent  
Donbas National Academy of Civil Engineering and Architecture, Makeevka  
Associate Professor Department of Higher and Applied Mathematics and Informatics  
Dergavina street, build 2, Makeyevka

УДК 532.5:518.5

## МЕХАНИКА ПОРОХОВОЙ ГИДРОПУШКИ ДЛЯ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ

© 2016. А.Н. Семко

В работе излагается общая теория пороховой гидропушки (ГП) для идеальной несжимаемой жидкости, которая математически сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Приводятся результаты расчетов для пороховой ГП конкретной конструкции. Оценивается влияние сжимаемости жидкости на параметры установки. Сравниваются параметры пороховой ГП, рассчитанные для сжимаемой и несжимаемой жидкости. Для оценки влияния сжимаемости жидкости используется метод слабо сжимаемой жидкости.

**Ключевые слова:** гидропушка, пороховая гидропушка, несжимаемая жидкость, сжимаемая жидкость, численное моделирование, сравнение моделей жидкости

**Введение.** Для получения импульсных струй жидкости высокой скорости используются импульсный водомет (ИВ) и гидропушка (ГП), первые конструкции которых были разработаны в институте гидродинамики СО РАН [1]. Теория этих установок строилась в рамках модели идеальной несжимаемой жидкости. Была получена экспоненциальная форма сопла ГП при которой давление на поршень постоянное, что позволяет наиболее эффективно передавать энергию поршня жидкости. В работе [3] аналитически исследовано втекание свободного водяного заряда несжимаемой жидкости в сужающееся сопло ГП. Получены распределения параметров по длине установки и от времени.

Экспериментальные и теоретические исследования ИВ и ГП [3] показали, что пренебрежение сжимаемостью жидкости может привести к существенным как качественным, так и количественным ошибкам. Течение идеальной сжимаемой жидкости в ГП описывается уравнениями нестационарной газовой динамики, которые могут быть решены только численно конечно-разностным методом. Течение идеальной несжимаемой жидкости в ГП в общем случае описывается обыкновенными дифференциальными уравнениями, которые при определенных условиях могут быть решены аналитически. Этот факт дает определенные преимущества теории, основанной на модели несжимаемой жидкости, даже если влияние сжимаемости жидкости может быть существенным. Эти преимущества заключаются в том, что аналитическое решение позволяет глубже понять протекающие процессы и эффективнее управлять ими. Реальным становится решение вариационных задач оптимального управления, т.к. математически они будут сводиться к системам обыкновенных дифференциальных уравнений, а не уравнений в частных производных, как для сжимаемой жидкости. Поэтому вопрос об учете сжимаемости жидкости в ГП является актуальным и должен решаться индивидуально для конкретной установки.

**Математическая модель пороховой ГП.** При описании внутренней баллистики пороховой ГП жидкость считаем идеальной и несжимаемой, профиль сопла плавным, радиальным течением, теплообменом и давлением наружного воздуха и воздуха в сопле пренебрегаем [4, 5]. Горение пороха рассматривается в квазистационарной постановке при допущениях, характерных для задач внутренней баллистики ствольных систем [6]: горение пороха происходит параллельными слоями по геометрическому закону, скорость горения зависит только от давления пороховых газов, параметры поро-

ховых газов связаны упрощенным уравнением Ван-дер-Ваальса. За начало процесса принят момент воспламенения пороха. Начало координат расположено у входа в сопло.

В принятой постановке движение жидкости в ГП описывается уравнениями

$$\frac{\partial u F}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{u^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) = 0 \quad (1)$$

с начальными и граничными условиями

$$\begin{aligned} u(0, x) = 0, \quad p(0, x) = 0, \quad x_{g0} \leq x \leq x_{f0}; \\ p(t, x_f) = 0, \quad p(t, x_g) = p_g, \quad u(t, x_g) = u_g; \\ p(t, x_k) = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $t$  – время;  $x$  – координата;  $u$  – скорость;  $F$  – площадь поперечного сечения ствола и сопла;  $p$  и  $\rho$  – давление и плотность;  $x_k = L_s + L_k$  – координата конца коллиматора;  $L_s$  и  $L_k$  – длина сопла и коллиматора;  $x_g$  и  $x_f$  – координаты заднего и переднего фронта водяного заряда;  $x_{g0}$  и  $x_{f0}$  – начальные координаты заднего и переднего фронта водяного заряда;  $p_g$  и  $u_g$  – давление и скорость пороховых газов на контактной поверхности. Граничное условие (3) на конце коллиматора ставится при истечении струи.

Горение пороха описывается обыкновенными дифференциальными уравнениями с соответствующими начальными условиями [4, 5, 7, 8]:

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dt} = \frac{u_1}{h_1} p_g; \quad Q_g = m_{p0} \sigma(z) \frac{dz}{dt}; \\ \frac{dV_g}{dt} = u_g F + \left( \frac{1}{\rho_p} - \alpha \right) Q_g; \quad \frac{dx_g}{dt} = u_g; \\ \frac{dp_g}{dt} = \frac{1}{V_g} \left[ (k-1)q Q_g - p_g \left( k u_g F + \left( \frac{1}{\rho_p} - \alpha \right) Q_g \right) \right]; \\ z = 0, \quad V_g = V_{g0}, \quad p_g = p_{g0}, \quad x_g = x_{g0}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $p_g$  и  $V_g$  – давление и объем пороховых газов;  $u_1$  – постоянная скорости горения;  $h_1$  и  $c$  – половина толщины и длины порохового зерна трубчатой формы;  $z$  – толщина сгоревшего слоя, отнесенная к  $h_1$ ;  $\sigma(z)$  – относительная площадь горения пороха, зависящая от формы зерна;  $k$  – показатель адиабаты продуктов сгорания;  $Q_g$  – скорость прихода пороховых газов;  $\alpha$  – поправка, учитывающая собственный объем молекул;  $m_{p0}$  – начальная масса пороха;  $q$  и  $\rho_p$  – удельная теплота сгорания и плотность пороха;  $V_{g0}$  и  $p_{g0}$  – параметры газа после срабатывания воспламенителя.

Для несжимаемой жидкости уравнения движения (1) в частных производных преобразуются к обыкновенным дифференциальным уравнениям. Из уравнения неразрывности системы (1) следует, что скорость любой точки жидкости связана со скоростью заднего фронта (контактной поверхностью газ–жидкость) выражением

$$u(t, x) = u_g(t) \frac{F_g(t)}{F(x)}, \quad (5)$$

где индексом “g” отмечены параметры на контактной поверхности. В уравнении (5) скорость  $u_g$  явно зависит от  $t$ , а площадь  $F_g$  – неявно, через координату  $x_g$ . Подставляя (5) в уравнение импульсов системы (1) получим уравнение

$$\dot{u}_g \frac{F_g}{F} + \frac{u_g^2}{F} F'(x_g) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{u_g^2 F_g^2}{2F^2} + \frac{p}{\rho} \right) = 0, \quad (6)$$

где  $\dot{u}_g = du_g/dt$ ,  $F'(x_g) = dF/dx$  при  $x = x_g$ . Слагаемое  $\frac{u_g^2}{F} F'(x_g)$  появляется только при движении заднего фронта в сопле ( $x_g > 0$ ), когда изменяется площадь сопла  $F_g = F(x_g)$ .

В зависимости от объема воды возможны два варианта: 1) длинный заряд, 2) короткий заряд. Для длинного заряда объем воды больше объема сопла и на начало истечения задний фронт находится в стволе. По мере вытеснения воды задний фронт перемещается в сопло. Для короткого заряда объем воды меньше объема сопла. На определенной стадии втекания весь заряд целиком будет двигаться в сопле. На начало истечения задний фронт короткого заряда всегда находится в сопле. Независимо от варианта можно выделить три стадии движения воды: а) разгон водяного заряда в цилиндрическом стволе, б) втекание в сужающееся сопло и в) истечение. Каждому варианту и стадии соответствует определенное положение заднего и переднего фронта водяного заряда:

вариант 1) разгон:  $x_g, x_f \leq 0$ ; втекание:  $x_g \leq 0$ ,  $0 \leq x_f < x_k$ ; истечение:  $x_f = x_k$ ,

$$x_g \leq 0 \text{ или } x_g > 0.$$

вариант 2) разгон:  $x_g, x_f \leq 0$ ; втекание:  $0 \leq x_f < x_k$ ,  $x_g \leq 0$  или  $x_g > 0$ ; истечение:

$$x_f = x_k, x_g > 0.$$

Выделять варианты и стадии движения необходимо потому, что изменяется вид уравнений для каждого случая. Ниже приведем вывод этих уравнений для длинного водяного заряда (вариант 1).

Рассмотрим отдельно каждую стадию движения. Для стадии разгона из уравнения (6) после интегрирования по  $x$  с учетом постоянства площади ( $F = \text{const}$ ) получим распределение давления и уравнение движения водяного заряда

$$p = \dot{u}_g \rho (x_f - x), \quad (7)$$

$$\dot{u}_g = \frac{p_g}{\rho(x_f - x_g)} = \frac{p_g F_c}{m_b}, \quad (8)$$

где  $m_b = \rho F_c (x_f - x_g) = \rho F_c L$  – масса жидкости,  $F_c$  – площадь ствола ГП,  $L$  – длина водяного заряда. Водяной заряд на этой стадии движется как твердое тело с одинаковой по длине скоростью, давление в воде изменяется линейно.

Рассмотрим стадию втекания б), когда задний фронт движется в стволе. Для этого случая  $F_g = \text{const}$  и из уравнения (6) имеем

$$\dot{u}_g \frac{F_g}{F} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{u_g^2 F_g^2}{2F^2} + \frac{p}{\rho} \right) = 0. \quad (9)$$

Проинтегрировав уравнение (9) по  $x$  от текущей координаты  $x$  до координаты переднего фронта  $x_f$  и учитывая граничное условие  $p(x_f) = 0$ , получим уравнение

$$\dot{u}_g F_c \int_x^{x_f} \frac{d\xi}{F(\xi)} + \frac{u_g^2 F_c^2}{2} \left( \frac{1}{F_f^2} - \frac{1}{F^2(x)} \right) - \frac{p(x)}{\rho} = 0. \quad (10)$$

Отсюда найдем распределение давления в жидкости на текущий момент времени

$$p(x) = \rho \left[ \dot{u}_g F_g \int_x^{x_f} \frac{d\xi}{F(\xi)} + \frac{u_g^2 F_g^2}{2} \left( \frac{1}{F_f^2} - \frac{1}{F^2(x)} \right) \right]. \quad (11)$$

Уравнение движения заднего фронта жидкости получим из (10), подставив значения давления на заднем фронте  $p_g = p(x_g)$ :

$$\dot{u}_g = \left[ \frac{p_g}{\rho} - \frac{u_g^2}{2} \left( \frac{F_g^2}{F_f^2} - 1 \right) \right] \left( F_g \int_{x_g}^{x_f} \frac{d\xi}{F(\xi)} \right)^{-1}. \quad (12)$$

Отметим, что уравнения (11) и (12) справедливы так же для втекания в сопло свободного водяного заряда, т.е. когда обе его поверхности являются свободными. В этом случае давление на задней поверхности, как и на передней равно нулю:  $p_g = 0$ .

В уравнение движения жидкости (12) входят неизвестные величины, зависящие от времени: давление пороховых газов  $p_g$ , координата  $x_g$  и скорость  $u_g$  контактной поверхности, координата  $x_f$  свободной поверхности и площадь  $F_f = F(x_f)$ . Координаты  $x_f$  и  $x_g$  связаны между собой уравнением, выражающим закон сохранения массы, которое для стадии втекания имеет вид

$$\int_{x_g}^{x_f} F(x) dx = F_c L. \quad (13)$$

Если профиль сопла задан, то из (13) после интегрирования получается алгебраическое уравнение, связывающее  $x_f$  и  $x_g$ . Однако при численном решении уравнений движения удобнее использовать не алгебраическую, а дифференциальную связь между координатами в виде

$$\dot{x}_f = u_g \frac{F_g}{F_f}. \quad (14)$$

Для стадии втекания жидкости в сопло получим распределение давления: в стволе ( $x_g \leq x \leq 0$ )

$$p = \rho \left[ \dot{u}_g F_c \int_0^{x_f} \frac{d\xi}{F(\xi)} + \frac{u_g^2 F_c^2}{2 F_f^2} + \frac{u_g^2}{2} - \dot{u}_g x \right], \quad (15)$$

в сопле ( $0 \leq x \leq x_f$ )

$$p = \rho \left[ \dot{u}_g F_c \int_x^{x_f} \frac{d\xi}{F(\xi)} + \frac{u_g^2 F_c^2}{2} \left( \frac{1}{F_f^2} - \frac{1}{F^2(x)} \right) \right], \quad (16)$$

и уравнение движения заднего фронта жидкости

$$\dot{u}_g = \left[ \frac{p_g}{\rho} - \frac{u_g^2}{2} \left( \frac{F_c^2}{F_f^2} - 1 \right) \right] \cdot \left( F_c \int_0^{x_f} \frac{d\xi}{F(\xi)} - x_g \right)^{-1}. \quad (17)$$

Рассмотрим стадию истечения жидкости. При истечении передняя поверхность водяного заряда фиксирована и на ней выполняются условия:  $x_f = x_k$ ,  $F_f = F_s$ ,  $p(t, x_k) = 0$ . На этой стадии координаты  $x_f$  и  $x_g$  между собой не связаны и уравнение (13) не выполняется. Задняя поверхность водяного заряда может находиться или в стволе ( $x_g \leq 0$ ), или в сопле ( $x_g > 0$ ). В первом случае площадь поперечного сечения заднего фронта постоянная. Распределение давления и уравнение движения заднего фронта жидкости будут описываться теми же уравнениями (15) - (17).

На определенном этапе истечения задний фронт жидкости перемещается в сопло ( $x_g > 0$ ) и начинается стадия истечения, в которой площадь заднего фронта становится переменной:  $F_g = F(x_g)$ . Проинтегрировав уравнение движения жидкости (6) от  $x$  до  $x_k$  с учетом граничного условия (3) на срезе сопла, получим

$$\left[ \dot{u}_g F_g + u_g^2 F'(x_g) \right] \int_x^{x_k} \frac{d\xi}{F(\xi)} + \frac{u_g^2 F_g^2}{2} \left( \frac{1}{F_k^2} - \frac{1}{F^2(x)} \right) - \frac{p(x)}{\rho} = 0.$$

Отсюда найдем распределение давления и уравнение движения жидкости

$$p(x) = \rho \left[ \left[ \dot{u}_g F_g + u_g^2 F'(x_g) \right] \int_x^{x_k} \frac{d\xi}{F(\xi)} + \frac{u_g^2 F_g^2}{2} \left( \frac{1}{F_k^2} - \frac{1}{F^2(x)} \right) \right], \quad (18)$$

$$\dot{u}_g = \frac{1}{F_g} \left\{ \left[ \frac{p_g}{\rho} - \frac{u_g^2}{2} \left( \frac{F_g^2}{F_k^2} - 1 \right) \right] \left( \int_{x_g}^{x_k} \frac{d\xi}{F(\xi)} \right)^{-1} - u_g^2 F'(x_g) \right\}. \quad (19)$$

Из сказанного выше следует, что  $\dot{u}_g$  в общем случае является функцией параметров на заднем и переднем фронте водяного заряда

$$\dot{u}_g = f(x_g, x_f, u_g, p_g), \quad (20)$$

вид которой зависит от стадии движения. Зная эту зависимость и величины на заднем фронте, можно рассчитать все параметры ГП.

Таким образом, внутренняя баллистика пороховой ГП для идеальной несжимаемой жидкости описывается следующей системой обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями

$$\frac{du_g}{dt} = f(x_g, x_f, u_g, p_g), \quad \frac{dx_g}{dt} = u_g, \quad \frac{dx_f}{dt} = u_g \frac{F_g}{F_f}$$

$$\frac{dz}{dt} = \frac{u_1}{h_1} p_g, \quad \frac{dV_g}{dt} = u_g F + \alpha_1 Q_g, \quad (21)$$

$$\frac{dp_g}{dt} = \frac{1}{V_g} [(k-1)q Q_g - p_g (ku_g F + \alpha_1 Q_g)];$$

$$z = 0, \quad V_g = V_{g0}, \quad p_g = p_{g0}, \quad x_g = x_{g0}, \quad u_g = 0, \quad x_f = x_g + L.$$

Здесь  $Q_g = m_{p0} \sigma(z) dz/dt$ ,  $\alpha_1 = 1/\rho_p - \alpha$ .

Рассмотрим для примера ГП с коническим соплом, радиус которого изменяется по закону [5]:  $R = kx + b$ , где  $k = (R_s - R_c)/L_s$  и  $b = R_c$ , где  $R_c$ ,  $R_s$  и  $L_s$  – радиусы входа, выхода и длина сопла,  $x_s$  – координата конца сопла. Площадь поперечного сечения канала ГП изменяется по закону

$$F = \begin{cases} F_c, & x \leq 0, \\ \pi (kx + b)^2, & 0 \leq x \leq x_s, \\ F_s, & x_s \leq x \leq x_k. \end{cases} \quad (22)$$

После интегрирования (13) получим, например, для  $0 \leq x_f \leq x_s$

$$\int_{x_g}^{x_f} F(x) dx = -F_c x_g + \frac{\pi}{3k} [(kx_f + b)^3 - b^3] = F_c L.$$

Отсюда найдем связь между координатами  $x_f$  и  $x_g$  на всех стадиях течения

$$x_f = \begin{cases} x_g + L, & x_g \leq x_{gs}, \\ \frac{1}{k} \left[ \left( \frac{3kF_c}{\pi} (L + x_g) + b^3 \right)^{\frac{1}{3}} - b \right], & x_{gs} \leq x_g \leq x_{gk}, \\ x_s + \frac{1}{F_s} \left[ F_c (L + x_g) - \left( \frac{\pi}{3k} (kL_s + b)^3 - b^3 \right) \right], & x_{gk} \leq x_g \leq 0. \end{cases} \quad (23)$$

Здесь  $x_{gs} = V_s/F_c - L$  – координата заднего фронта на момент полного заполнения водой сопла,  $V_s$  – объем сопла,  $x_{gk} = x_{gs} + V_k$  – координата заднего фронта на момент полного заполнения водой коллиматора,  $V_k$  – объем коллиматора. При истечении  $x_f = x_k = \text{const}$  и координата  $x_f$  не зависит от  $x_g$ .

Таким образом, динамика пороховой ГП для несжимаемой жидкости описывается системой обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений (4), (8), (17), (18) и (19) с соответствующими начальными условиями. Задача может быть решена численно, например, методом Рунге-Кутты или более простым методом Эйлера.

**Результаты расчетов.** Ниже представлены результаты расчетов для пороховой ГП со следующими данными [8, 9]: диаметр ствола 32 мм, диаметр сопла 15 мм, длина

сопла 70 мм, длина коллиматора 50 мм, масса водяного заряда 230 г, длина разгона водяного заряда 120 мм, объем камеры сгорания 47 см<sup>3</sup>. Использовался охотничий порох марки «Крук» с массой заряда 30 г. На рис. 1 приведены распределения давления (кривые 1, 3 и 5) и скорости (кривые 2, 4 и 6) по длине ГП на момент времени, когда закончилось втекание воды в сопло ( $x_f = x_s$ ). Кривые 1 и 2 – расчет по формулам (5 и 11) для несжимаемой жидкости, кривые 3 и 4 – численное решение методом Годунова для сжимаемой жидкости, кружочками отмечено численное решение методом Годунова для слабо сжимаемой жидкости (скорость звука  $a = 20a_0$ ).

Из графиков видно, что результаты расчетов для несжимаемой и сжимаемой жидкости качественно совпадают, а количественно заметно различаются. Для скорости совпадение результатов лучше, чем для давления. Результаты расчетов для слабо сжимаемой и несжимаемой жидкости полностью совпадают. Эти факты указывают на то, что для рассматриваемой пороховой ГП необходимо учитывать сжимаемость жидкости. Для сжимаемой жидкости максимальное давление равно 240 МПа, скорость 1080 м/с. Изменение плотности воды при таком небольшом давлении меньше 10 % и не должно сказываться на параметрах ГП. Число Маха  $M = 0,72$  так же не велико. Согласно данным [10] при таких числах Маха максимальные значения скоростей для несжимаемой и сжимаемой жидкости различаются на 10 %.

Влияние сжимаемости здесь проявляется через волновые процессы, которые сопровождаются отражением волн от свободной и контактной поверхностей водяного заряда. Длина водяного заряда  $L$  около 300 мм и характерное время распространения волн  $t_x = L/a_0$  составляет около 0,2 мс. Вода начинает втекать в сопло длиной  $L_s = 70$  мм со скоростью  $u_0 = 400$  м/с. Время процесса  $t_p = L_s/u_0 \approx 0,175$  мс соизмеримо с характерным временем  $t_x$ . Поэтому здесь будут проявляться волновые процессы, обусловленные сжимаемостью жидкости. Для слабо сжимаемой жидкости при скорости звука  $a = 20a_0$  характерное время  $t_x \approx 0,01$  мс  $\ll t_p$  и совпадение результатов здесь хорошее.

На рис. 2 приведено распределение давления (кривые 1, 3 и 5) и скорости (кривые 2, 4 и 6) по длине ГП на начало истечения струи для несжимаемой (кривые 1 и 2), сжимаемой (кривые 3 и 4) и слабо сжимаемой (кривые 5 и 6) жидкости. Совпадение результатов в этот момент лучше, чем в предыдущий. В коллиматоре возникает кавитация. На графике давления для несжимаемой

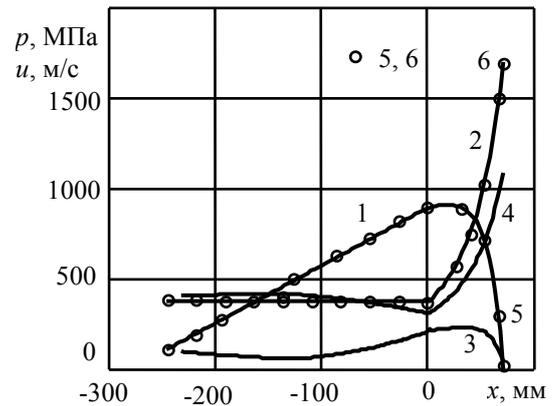


Рис. 1. Распределение давления и скорости в ГП на конец втекания

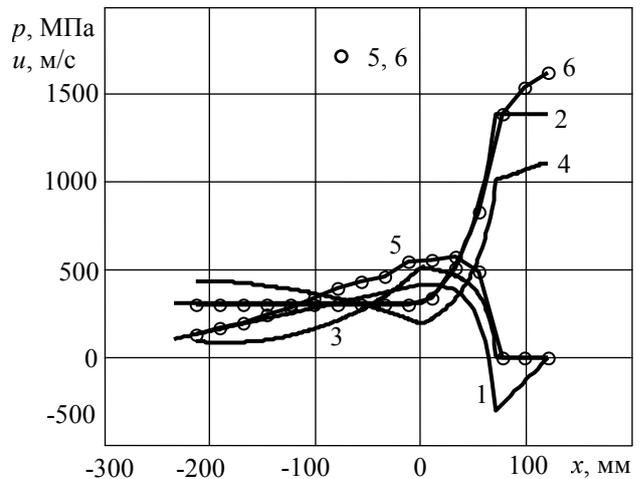


Рис. 2. Распределение давления и скорости в ГП на начало истечения струи.

жидкости (кривая 1) зоне кавитации соответствует отрицательное давление около – 300 МПа. Возникновение кавитации в модели несжимаемой жидкости не учитывалось, поэтому здесь возможны большие отрицательные давления. При расчете методом Годунова для сжимаемой жидкости кавитация учитывается [4]. Поэтому отрицательных давлений нет. Совпадение результатов расчетов для разных моделей жидкости удовлетворительное.

Результаты расчетов для несжимаемой и слабо сжимаемой жидкости хорошо совпадают только для скорости вне зоны кавитации (кривые 2 и 6). В зоне кавитации характер изменения скорости различается. Значения давления совпадает хуже, чем скорости во всей области (кривые 1 и 5). Это различие объясняется тем, что при расчете для слабо сжимаемой жидкости кавитация учитывалась, а для несжимаемой – не учитывалась.

**Выводы.** Из проведенных исследований можно сделать выводы о том, что для пороховой ГП сжимаемость жидкости надо учитывать. Расчеты для несжимаемой жидкости дают завышенные значения давления и скорости, которые на отдельных стадиях процесса могут значительно отличаться от таких же параметров для сжимаемой жидкости. Однако, даже при большом количественном различии характер изменения параметров для разных моделей жидкости одинаковый. Сжимаемость жидкости в пороховой ГП проявляется преимущественно через волновые процессы, длительность которых сравнима со временем втекания жидкости в сопло. Поэтому, оценочные расчеты параметров ГП и оптимизацию этих параметров можно проводить в рамках модели несжимаемой жидкости, оперируя более простыми обыкновенными дифференциальными уравнениями.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Войцеховский Б. В. Кавитационный эффект в экспоненциальном струйном насадке: [Текст] / Б. В. Войцеховский, Ю. А. Дудин, Ю. А. Николаев и др. // Динамика сплошной среды. – Новосибирск: ИГД СО АН СССР. – 1971. – Вып. 9. – С. 7–11.
2. Ryhming J. L. Analysis of unsteady incompressible jet nozzle flow: [Текст] / J. L. Ryhming // J. of Appl. Mathematics and Physics (ZAMP). – 1973. – Vol. 24. – P. 149–164.
3. Атанов Г. А. Гидроимпульсные установки для разрушения горных пород: [Текст] / Г. А. Атанов - К.: Наукова думка, 1987. – 155 с.
4. Семко А.Н. Импульсные струи жидкости высокого давления: [Текст] / А.Н. Семко. – Донецк: Вебер (Донецкое отделение), 2007. – 149 с.
5. Атанов Г. А. Внутренняя баллистика пороховой гидропушки: [Текст] / Г. А. Атанов, В. И. Губский, А. Н. Семко // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. – 1997. – № 6. – С. 175–179.
6. Проектирование ракетных и ствольных систем: [Текст] / Под ред. Б. В. Орлова. – М., Машиностроение, 1974. – 828 с.
7. Atanov G. The Pressure Rise Factor For Powder Hydro-cannon: [Текст] / G. Atanov, V. Gubsky, A. Semko // Proceeding of the 13 th International Conference on Jetting Technology. – Sardinia, Italy: October 29-31. 1996. – P. 91-103.
8. Atanov G.A. The powder hydro-cannon: [Текст] / G.A. Atanov, A.N. Semko // Proceedings of International Summer Scientific School “High Speed Hydrodynamics” (HSH 2002). – Cheboksary, Russian/ Washington, USA: Cheboksary, Russian, June 16 – 23, 2002. P. 419 – 424.
9. Petrenko O. Numerical Modeling of High-Speed Water Slugs: [Текст] / O. Petrenko, E.S. Geskin, G.A. Atanov et al. // Transaction of the ASME. Journal of Fluids Engineering. – Vol. 126, No 2. – Marth 2004. – P. 206 – 209.
10. Семко А. Н. О влиянии сжимаемости жидкости на параметры гидропушки: [Текст] / А. Н. Семко // Инженерно-физический журнал. – 2001. – Т. 74, № 1. – С. 1 – 5.

*Поступила в редакцию 14.04.2016 г.*

**MECHANICS OF POWDER HYDROCANNON FOR AN INCOMPRESSIBLE FLUID**

*A.N. Semko*

The general theory of powder hydro cannon (HC) for an ideal incompressible fluid, which is mathematically reduced to a system of ordinary differential equations, is presented in this paper. The results of calculations for powder HC of particular design are given. Influence of compressibility on the installation parameters is estimated. Parameters of powder HC, which is calculated for compressible and incompressible fluid, are compared. The method of weakly compressible fluid is used to evaluate the effect of fluid compressibility.

**Keywords:** hydro cannon, powder hydro cannon, incompressible fluid, compressible fluid, numerical simulation, fluid models comparison.

**Семко Александр Николаевич**

доктор технических наук, профессор

ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», Донецк

alexandr.semko@mail.ru

83001, г. Донецк, пр. Театральный, 13 (IV корпус)

+38-095-347-40-70

**Semko Alexander Nikolayevich**

Doctor of Technical Sciences, Full Professor

Donetsk National University, Donetsk

83001, Donetsk, Teatralnii Ave., 13

УДК 539.3:534.1

## НЕЧЕТКИЕ ОЦЕНКИ ДЛЯ ХАРАКТЕРИСТИК НЕЛИНЕЙНЫХ ВТОРЫХ ГАРМОНИК ОБЪЕМНЫХ ВОЛН СДВИГА В ТРАНСВЕРСАЛЬНО-ИЗОТРОПНОЙ УПРУГОЙ СРЕДЕ

© 2016. С.В. Сторожев, С.Б. Номбре

---

На базе использования получаемого аналитического представления для амплитудных характеристик нелинейных вторых гармоник объемных горизонтально-поляризованных сдвиговых волн в трансверсально-изотропной упругой среде и применения эвристического принципа обобщения из аппарата теории нечетких множеств построены нечеткие оценки амплитудных уровней нелинейных ангармонических возмущений в рамках допущения о том, что приближенные экспериментальные данные для модулей упругости второго и третьего порядка в рассматриваемой среде описываются нормальными трапециoidalными нечеткими интервалами.

**Ключевые слова:** объемные волны деформаций, кубически-нелинейная трансверсально-изотропная среда, нелинейные ангармонические возмущения, факторы неопределенности физико-механических параметров модели, аппарат теории нечетких множеств.

---

**Введение и формулировка целей исследования.** Учет различных факторов неопределенности в значениях параметров теоретических моделей механики деформируемого твердого тела является одним из актуальных направлений исследований для данной научной отрасли, особенно в связи с практическими приложениями результатов механико-математического моделирования. Данная проблема имеет широкий круг аспектов, к которым можно отнести задачи учета неопределенностей в значениях характеристик деформируемых материалов на эндогенные характеристики процессов волнового деформирования, поскольку для многих типов материалов, в первую очередь для геоматериалов и композитов, характерен существенный разброс в экспериментально определяемых значениях физико-механических постоянных [1]. Так, однотипно классифицируемые горные материалы весьма существенно различаются по структуре химического состава, по специфике формирования и морфологии, а угольные пласты и основные типы вмещающих пород имеют весьма существенно различающиеся механические свойства даже в пределах одного поля разработки [2]. Для композитов определенный разброс в значениях механических характеристик связан с технологическими особенностями их изготовления. К задачам нечеткого математического моделирования в волновой механике деформируемых сред в первую очередь относятся вопросы оценки разброса для характеристик, используемых в технологиях волнового зондирования, геоакустике и ультраакустической дефектоскопии.

Учет факторов неопределенности в математических моделях естественных наук реализуется с использованием теории вероятностей и математической статистики [3], а также методов нечеткой математики [4–9], которые распространены в меньшей мере, но имеют определенные априорные особенности в виде возможностей оперирования непосредственно с нечеткими величинами, а не с их усредненными интегральными характеристиками. В этой связи, представляемое в работе исследование относится к проблеме нечеткого оценивания амплитудных уровней нелинейных ангармонических возмущений, генерируемых при распространении стационарных объемных упругих волн в трансверсально-изотропных (тонкослоистых) упругих массивах в рамках

гипотезы об интерпретации нечетких значений модулей упругости рассматриваемых сред нормальными трапецеидальными нечеткими интервалами [9, 10].

**Получение аналитических представлений для нелинейных вторых гармоник объемных волн сдвига в трансверсально-изотропной среде.** На исходном этапе представляемого исследования рассматривается модель генерирования нелинейных вторых гармоник при распространении стационарных объемных волн деформаций в занимающей координатное пространство  $Ox_1x_2x_3$  трансверсально-изотропной упругой среде с учетом эффектов геометрической и физической нелинейности [11, 12]. Соотношения рассматриваемой модели формулируются применительно к случаю распространения волн вдоль направления  $Ox_1$  в плоскости изотропии  $Ox_1x_2$  трансверсально-изотропного массива. Безразмерные координатные переменные  $x_j$  ( $j = \overline{1,3}$ ) полагаются отнесенными к нормирующему параметру  $R_*$  линейной размерности, а для компонент безразмерного вектора динамических упругих перемещений  $u_j(x_1, t)$  ( $j = \overline{1,3}$ ) в исследуемых волнах нормирующим параметром является величина

$$u_* = \max_{\{x_1, x_2, x_3, t\}} |u_j(x_1, x_2, x_3, t)|.$$

Модель базируется на тензорном представлении упругого потенциала  $U$  трансверсально-изотропной среды с квадратичными и кубическими членами по конечным деформациям  $\varepsilon_{jq}$ , тензорные коэффициенты  $c_{jqlm}$ ,  $c_{jqlmnp}$  которого выражаются через пять независимых матричных упругих постоянных второго порядка и десять независимых матричных упругих постоянных третьего порядка, а также на концепции представления характеристик динамического напряженно-деформированного состояния двумя низшими членами разложений по малому параметру  $\delta = u_* / R_*$  ( $\delta \ll 1$ ). В рамках представленных гипотез соотношения модели, включая частную форму определяющих соотношений и уравнений движения, записываются в виде

$$\begin{aligned} U &= \left( \frac{1}{2} c_{11} u_{1,1}^2 + \frac{1}{4} (c_{11} - c_{12}) u_{2,1}^2 + \frac{1}{2} c_{44} u_{3,1}^2 \right) \delta^2 + \\ &+ \left( \left( \frac{1}{2} c_{11} + \frac{1}{6} c_{111} \right) u_{1,1}^3 + \left( \frac{1}{2} c_{11} + \frac{1}{8} (c_{111} - c_{112}) \right) u_{1,1} u_{2,1}^2 + \frac{1}{2} (c_{11} + c_{115}) u_{1,1} u_{3,1}^2 \right) \delta^3, \\ \sigma_{11} &= (c_{11} u_{1,1}) \delta + \left( \frac{3}{2} c_{11} + \frac{1}{2} c_{111} \right) u_{1,1}^2 + \left( \frac{1}{2} c_{11} + \frac{1}{8} (c_{111} - c_{112}) u_{2,1}^2 + \frac{1}{2} (c_{11} + c_{155}) u_{3,1}^2 \right) \delta^2, \\ \sigma_{21} &= \left( \frac{1}{2} (c_{11} - c_{12}) u_{2,1} \right) \delta + \left( c_{11} + \frac{1}{4} (c_{111} - c_{112}) \right) u_{1,1} u_{2,1} \delta^2, \\ \sigma_{31} &= (c_{44} u_{3,1}) \delta + (c_{11} + c_{115}) u_{1,1} u_{3,1} \delta^2 \end{aligned}$$

Приведенные характеристики с размерностями механических напряжений полагаются отнесенными к нормирующему параметру  $c_*$ . С использованием приема приравнивания в уравнениях движения слагаемых одного порядка малости по малому параметру  $\delta$  задача описания ангармонических возмущений сведения к рекуррентной последовательности дифференциальных уравнений для определения первого

(линейного) и второго приближения. Для случая распространения в указанном направлении горизонтально-поляризованных линейных волн сдвига  $u_2^{(0)} = u_2(x_1, t) = u_{20} \exp(-i(\omega t - kx_1))$ ,  $u_1^{(0)} \equiv u_3^{(0)} \equiv 0$  и использования представлений

$$u_j(x_1, t) = u_j^{(0)}(x_1, t) + \delta u_j^{(1)}(x_1, t)$$

уравнения первого и второго приближения принимают вид

$$\frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})u_{2,11}^{(0)} - \rho \ddot{u}_2^{(0)} = 0,$$

$$c_{11}u_{1,11}^{(1)} - \rho \dot{u}_1^{(1)} = -\left(c_{11} + \frac{1}{4}(c_{111} - c_{112})\right)u_{2,1}^{(0)}u_{2,11}^{(0)},$$

а первые и вторые гармоники (нелинейные ангармонические возмущения) соответственно имеют представления

$$u_2^{(0)} = u_{20} \exp(-i(\omega t - (2\Omega^2 / (c_{11} - c_{12}))^{1/2} x_1)),$$

$$u_2^{(1)} = u_{20}^2 \vartheta \exp(-i2(\omega t - (2\Omega^2 / (c_{11} - c_{12}))^{1/2} x_1)),$$

$$\Omega^2 = \rho \omega^2 R_*^2 / c_*,$$

$$\vartheta = 2^{3/2} \Omega^{-1} \left( \frac{1}{8} - \frac{1}{c_{11} - c_{12}} \right) (c_{11} - c_{12})^{3/2} \left/ \left( c_{11} + \frac{1}{4}(c_{111} - c_{112}) \right) \right.$$

Данные представления описывают нелинейные вторые гармоники для объемных горизонтально поляризованных волн сдвига как волновые движения продольного типа вдоль выбранного направления распространения, имеющие удвоенные частоту и волновое число первой гармоники и смещенные относительно нее по фазе. Амплитудные уровни второй гармоники пропорциональны квадрату амплитуды линейной сдвиговой волн, умноженному на подлежащий нечеткому оцениванию параметрический коэффициент  $\vartheta = \vartheta(\rho, c_{11}, c_{12}, c_{111}, c_{112})$ .

Полученные аналитические представления рамках концепции применения методов теории нечетких множеств используются для получения нечетких оценок амплитудных уровней вторых гармоник на основе эвристического принципа обобщения и предположения о том, что физико-механические характеристики трансверсально-изотропной среды, включая упругие постоянные второго и третьего порядков, являются нечеткими величинами ввиду разброса их экспериментальных значений и описываются нечеткими трапецеидальными интервалами с кортежами реперных точек  $(c_{jq}^{(1)}, c_{jq}^{(2)}, c_{jq}^{(3)}, c_{jq}^{(4)})$ ,  $(c_{jql}^{(1)}, c_{jql}^{(2)}, c_{jql}^{(3)}, c_{jql}^{(4)})$ . Эффективная прикладная схема использования принципа обобщения, позволяющего расширить область определения классического функционального отображения на нечеткие подмножества универсального множества применительно к общему случаю классической функции многих переменных,  $y(x_1, \dots, x_n)$  базируется на представлении нечетко-множественных величин декомпозицией по множествам  $\alpha$ -уровня  $\alpha A_\alpha$  [7], а также на допущениях относительно свойств  $y(x_1, \dots, x_n)$ , включающих непрерывность области изменения аргументов, дифференцируемость в области определения, а также преставление области определения в виде

$$\begin{aligned} X &= X_1 \cup X_2 \cup X_3, \quad X_1 \cap X_2 = X_2 \cap X_3 = X_1 \cap X_3 = \emptyset, \\ X_1 &= \{x_r : \partial y / \partial x_r \geq 0\}, \quad X_2 = \{x_s : \partial y / \partial x_s \leq 0\}, \\ X_3 &= \{x_l : \text{sign}(\partial y / \partial x_l) = \text{sign}(g_l(x_r, x_s))\}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $g_l(x_r, x_s) = \partial y / \partial x_l$  – не зависящая от  $x_l$  вспомогательная функция. В предположении о том, что нечетко-множественные аргументы  $\tilde{x}_i$  функции  $y(x_1, \dots, x_n)$  представимы разложениями

$$\tilde{x}_i = \bigcup_{\alpha \in [0, 1]} (x_{i\alpha}, \bar{x}_{i\alpha}), \quad (2)$$

в которых  $\underline{x}_{i\alpha}, \bar{x}_{i\alpha}$  – верхние и нижние грани множеств  $\alpha$ -уровней, для отображения  $y(x_1, \dots, x_n)$  с нечетко-множественными аргументами справедливо представление

$$y = \bigcup_{\alpha \in [0, 1]} \{y(\underline{x}_{r\alpha}, \bar{x}_{s\alpha}, x_{l\alpha}^I), y(\bar{x}_{r\alpha}, \underline{x}_{s\alpha}, x_{l\alpha}^{II})\}, \quad (3)$$

где

$$x_{l\alpha}^I = \begin{cases} \underline{x}_{l\alpha}, & \text{при } g_l(\underline{x}_r, \bar{x}_s) \geq 0, \\ \bar{x}_{l\alpha}, & \text{при } g_l(\underline{x}_r, \bar{x}_s) < 0; \end{cases} \quad x_{l\alpha}^{II} = \begin{cases} \bar{x}_{l\alpha}, & \text{при } g_l(\bar{x}_r, \underline{x}_s) \geq 0, \\ \underline{x}_{l\alpha}, & \text{при } g_l(\bar{x}_r, \underline{x}_s) < 0. \end{cases}$$

Анализ функциональной зависимости  $\vartheta = \vartheta(\rho, c_{11}, c_{12}, c_{111}, c_{112})$  с использованием схемы (1), а также с учетом характерных областей изменения и соотношений между значениями упругих постоянных второго и третьего порядка для рассматриваемых сред, позволяет отнести аргумент  $c_{112}$  к множеству типа  $X_1$ , а аргументы  $c_{11}, c_{12}, c_{111}$  – к множеству типа  $X_2$ . Соответственно, исходя из имеющих структуру (2) представлений

$$\begin{aligned} c_{11} &= \bigcup_{\alpha \in [0, 1]} (\underline{c}_{11\alpha}, \bar{c}_{11\alpha}), \quad \underline{c}_{11\alpha} = (1-\alpha)c_{11}^{(1)} + \alpha c_{11}^{(2)}, \quad \bar{c}_{11\alpha} = (1-\alpha)c_{11}^{(4)} + \alpha c_{11}^{(3)}; \\ c_{12} &= \bigcup_{\alpha \in [0, 1]} (\underline{c}_{12\alpha}, \bar{c}_{12\alpha}), \quad \underline{c}_{12\alpha} = (1-\alpha)c_{12}^{(1)} + \alpha c_{12}^{(2)}, \quad \bar{c}_{12\alpha} = (1-\alpha)c_{12}^{(4)} + \alpha c_{12}^{(3)}; \\ c_{111} &= \bigcup_{\alpha \in [0, 1]} (\underline{c}_{111\alpha}, \bar{c}_{111\alpha}), \quad \underline{c}_{111\alpha} = (1-\alpha)c_{111}^{(1)} + \alpha c_{111}^{(2)}, \quad \bar{c}_{111\alpha} = (1-\alpha)c_{111}^{(4)} + \alpha c_{111}^{(3)}; \\ c_{112} &= \bigcup_{\alpha \in [0, 1]} (\underline{c}_{112\alpha}, \bar{c}_{112\alpha}), \quad \underline{c}_{112\alpha} = (1-\alpha)c_{112}^{(1)} + \alpha c_{112}^{(2)}, \quad \bar{c}_{112\alpha} = (1-\alpha)c_{112}^{(4)} + \alpha c_{112}^{(3)}; \end{aligned}$$

искомая нечеткая оценка для  $\vartheta = \vartheta(\rho, c_{11}, c_{12}, c_{111}, c_{112})$  может быть описана нечетким множеством, представляемым, согласно (3), в виде разложения

$$\begin{aligned} \vartheta &= \bigcup_{\alpha \in [0, 1]} (\vartheta_\alpha, \bar{\vartheta}_\alpha), \\ \vartheta_\alpha &= 2^{3/2} \Omega^{-1} (1/8 - 1/(\bar{c}_{11\alpha} - \bar{c}_{12\alpha})) (\bar{c}_{11\alpha} - \bar{c}_{12\alpha})^{3/2} / (\bar{c}_{11\alpha} + (1/4)(\bar{c}_{111\alpha} - \bar{c}_{112\alpha})), \\ \bar{\vartheta}_\alpha &= 2^{3/2} \Omega^{-1} (1/8 - 1/(\underline{c}_{11\alpha} - \underline{c}_{12\alpha})) (\underline{c}_{11\alpha} - \underline{c}_{12\alpha})^{3/2} / (\underline{c}_{11\alpha} + (1/4)(\underline{c}_{111\alpha} - \underline{c}_{112\alpha})). \end{aligned}$$

Полученные соотношения являются базой формирования вычислительного алгоритма для получения количественных нечетких оценок уровней нелинейных ангармонических возмущений в полях объемных упругих волн в трансверсально-изотропных средах, в условиях нечеткости описания экспериментальных значений соответствующих физико-механических постоянных.

**Выводы.** Таким образом, в представленной работе на основе применения аппарата теории нечетких множеств для учета факторов неопределенности в математических моделях нелинейных волновых процессов в деформируемых упругих телах с применением эвристического принципа обобщения получены нечеткие оценки для амплитудных уровней нелинейных ангармонических возмущений, генерируемых при распространении объемных горизонтально-поляризованных сдвиговых волн в трансверсально-изотропных упругих массивах. Полученные результаты могут быть использованы как элементы теоретической базы усовершенствованных технологий в геоакустике, ультраакустической диагностике, ультразвуковом неразрушающем контроле.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ставрогин А.Н. Прочность горных пород и устойчивость выработок на больших глубинах / А.Н. Ставрогин, А.Г. Протосеня. – М.: Недра, 1986. – 312 с.
2. Молодецкий А.В. Влияние глубины залегания угольных пластов на механические свойства угля / А.В. Молодецкий, В.Н. Ревва // Физико-технические проблемы горного производства: Сб. науч. тр. – 2009. – Вып. 12. – С. 55-58.
3. Ломакин В.А. Статистические задачи механики твердых деформируемых тел. – М.: Наука, 1970. – 139 с.
4. Вopenка П. Математика в альтернативной теории множеств / П. Вopenка. – М.: Мир, 1983. – 152 с.
5. Ибрагимов В.А. Элементы нечеткой математики / В.А. Ибрагимов – Баку: Азербайджанская государственная нефтяная академия, 2009. – 267 с.
6. Корман А. Введение в теорию нечётких множеств / А. Корман. – М: Радио и связь, 1982. – 432 с.
7. Ротштейн А.П. Моделирование и оптимизация надежности многомерных алгоритмических процессов / А.П. Ротштейн, С.Д. Штовба, А.Н. Козачко. – Винница: УНІВЕРСУМ, 2007. – 215 с.
8. Ухоботов В. И. Избранные главы теории нечетких множеств / В. И. Ухоботов. – Челябинск: Изд-во Челяб. гос. ун-та, 2011. – 245 с.
9. Хапатхаева Н.Б. Введение в теорию нечётких множеств. Часть 1 / Н.Б. Хапатхаева, С.В. Дамбаева, Н.Н. Аюшеева. – Улан-Удэ: Изд-во ВСГТУ, 2004. – 68 с.
10. Дилигенский Н.В. Нечеткое моделирование и многокритериальная оптимизация производственных систем в условиях неопределенности: технология, экономика, экология / Н.В. Дилигенский, Л.Г. Дымова, П.В. Севастьянов. – М.: Машиностроение-1, 2004. – 397 с.
11. Дьелесан Э. Упругие волны в твердых телах. Применение для обработки сигналов / Э. Дьелесан, Д. Руайе. – М.: Наука, 1982. – 424с.
12. Космодамианский А.С. Динамические задачи теории упругости для анизотропных сред / А.С. Космодамианский, В.И. Сторожев. – К.: Наукова думка, 1985. – 176 с.

*Поступила в редакцию 20.04.2016 г.*

#### FUZZY EVALUATION FOR CHARACTERISTICS OF NONLINEAR SECOND HARMONICS OF SHEAR BULK WAVES IN TRANSVERSELY ISOTROPIC ELASTIC MEDIUM

*S.V. Storozhev, S.B. Nombre*

On the basis of the use of the analytical representation for the amplitude characteristics of the nonlinear second harmonic horizontally polarized shear bulk waves in transversely isotropic elastic medium and with applying a heuristic principle of generalization of fuzzy sets theory are constructed fuzzy evaluation for the amplitude levels of nonlinear anharmonic perturbations on the base of assumption that the approximate

experimental data for the elastic moduls of the second and third order in the medium are describes the normal trapezoidal fuzzy intervals.

*Keywords:* bulk deformations waves, cubic-nonlinear transversely isotropic medium, nonlinear anharmonic perturbations, uncertainties of physical and mechanical parameters, theory of fuzzy sets.

**Сторожев Сергей Валериевич**

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, г. Макеевка  
кафедра высшей и прикладной математики и информатики  
SergeyS@i.ua  
+38 (066) 6152262

**Номбре Светлана Борисовна,**

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, г. Макеевка  
кафедра высшей и прикладной математики и информатики  
lanan73@mail.ru,  
+38 (095) 4191279

**Storozhev Sergej Valerievich**

Donbas National Academy of Civil Engineering and Architecture, Makeevka

**Nombre Svetlana Borisovna**

Donbas National Academy of Civil Engineering and Architecture, Makeevka

УДК 539.213; 530.1

**ВИХРИ ВО ФРАКТАЛЬНОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ НАНОСИСТЕМЕ**

© 2016. В.С. Абрамов

Теоретически и методом численного моделирования исследовано стохастическое поведение поля деформации связанной системы: фрактальный слой – фрактальная квантовая точка. Показано, что уменьшение полуосей квантовой точки приводит к уменьшению амплитуды и появлению «наплыва» у основного пика, сужению области стохастического поведения. При увеличении полуосей образуется уширенный пик на фоне стохастического основания (форма сигнала типа гало). Поведение многослойной наносистемы с вихрями характеризуется: изменением положений локальных максимумов и минимумов, ям и барьеров, поляризации, гистерезисом, появлением двойных гистерезисных петель на зависимостях эффективных смещений от ряда параметров (что связано с присутствием ряда метастабильных и связанных состояний).

**Ключевые слова:** фрактальный слой; фрактальная квантовая точка; связанная система; вихри; численное моделирование; многослойная наносистема.

**Введение.** Современные технологии в атомтронике позволяют создавать многослойные, фрактальные фотонные и фононные квантовые наносистемы, искусственные среды (метаматериалы) [1], конденсат Бозе-Эйнштейна в ловушках [2, 3]. В работе [3] такой конденсат получен испарением газа атомов  $^{23}\text{Na}$  при лазерном охлаждении, сначала в магнитной, затем в кольцеобразной оптической дипольной ловушках. Элементарными возбуждениями в такой сверхжидкости могут быть вихри, антивихри, пары вихрь-антивихрь [3]. При исследовании динамики и различных гистерезисных явлений в таких системах диссипация энергии выполняет важную роль. Изучение влияния различных стохастических полей на физические свойства отдельных объектов в ловушке представляет собой одну из фундаментальных проблем. В работе [4] исследованы особенности поведения полей деформации и напряжения во фрактальной многослойной наносистеме с активным наноэлементом (ультрахолодные атомы  $^{23}\text{Na}$  в оптической ловушке). Показано, что некоторые физические свойства (скорость, квантование потока; наличие гистерезиса) элементарных возбуждений типа пары вихрь-антивихрь связаны с влиянием на них Бозе-Эйнштейновского конденсата сверхтекучей жидкости (где элементарным возбуждением является бозон Хиггса). Эксперименты на Большом Адронном Коллайдере (ЛHC) и Нобелевская премия по физике за 2013 год Ф. Энглеру и П. Хиггсу подтвердили механизм происхождения массы субатомных частиц, который связан со спонтанным нарушением электрослабой калибровочной симметрии, с массой бозона Хиггса [5–7]. Связанные системы на основе фрактальных квазидвумерных структур рассматривались в [8, 9]. В работах [10, 11] предложена модель нелинейного фрактального осциллятора для описания полей деформации и напряжения фрактальных структур в многослойной наносистеме.

Целью данной работы является исследование особенностей поведения поля деформации в связанной системе (отдельный фрактальный слой – фрактальная квантовая точка) и во фрактальной многослойной наносистеме с вихрями.

**Связанная система: фрактальный слой – фрактальная квантовая точка.** Рассмотрим модельную многослойную наносистему в виде объемной дискретной решетки  $N_1 \times N_2 \times N_3$ , узлы которой задаются целыми числами  $n, m, j$  ( $n = \overline{1, N_1}$ ;

$m = \overline{1, N_2}$ ;  $j = \overline{1, N_3}$ ). Внутри этой наносистемы исследуем поведение поля деформации связанной системы: отдельный фрактальный слой – фрактальная квантовая точка.

Нелинейное уравнение для функции смещения  $u_1$  узла решетки фрактального слоя  $j$  задается в виде [8, 9, 12]

$$u_1 = (1 - \alpha_1)(1 - 2 \operatorname{sn}^2(u_1 - u_{01}, k_1)) / Q_1; \quad Q_1 = p_{01}. \quad (1)$$

Здесь  $\alpha_1$  – фрактальная размерность поля деформации  $u_1$  вдоль оси  $Oz$  ( $\alpha_1 \in [0, 1]$ );  $u_{01}$  – постоянное (критическое) смещение; параметры  $k_1$  – модуль функции эллиптического синуса и постоянная  $p_{01}$  характеризуют различные состояния слоя  $j$ . В общем случае параметры  $k_1(j)$  и  $p_{01}(j)$  зависят от индекса слоя  $j$ .

Функция смещения  $u_2$  узла решетки фрактальной квантовой точки определяется при решении нелинейного уравнения [8, 9]

$$u_2 = (1 - \alpha_2)(1 - 2 \operatorname{sn}^2(u_2 - u_{02}, k_2)) / Q_2; \quad Q_2(n, m) = p_{02} - (n - n_{02})^2 / n_{c2}^2 - (m - m_{02})^2 / m_{c2}^2, \quad (2)$$

где  $\alpha_2$  – фрактальная размерность поля деформации  $u_2$  вдоль оси  $Oz$  ( $\alpha_2 \in [0, 1]$ );  $u_{02}$  – постоянное (критическое) смещение; параметры  $k_2$  – модуль функции эллиптического синуса и постоянная  $p_{02}$  характеризуют различные состояния слоя  $j$ ;  $n_{02}$ ,  $m_{02}$  – координаты центра и  $n_{c2}$ ,  $m_{c2}$  – полуоси квантовой точки. В данной работе параметры  $n_{c2}(j)$  и  $m_{c2}(j)$  зависят от индекса слоя  $j$ .

Отдельный слой и квантовая точка, находящиеся в одном слое или в разных слоях, влияют друг на друга и на состояние всей многослойной наносистемы. Поэтому функция смещения  $u$  такой фрактальной связанной системы в отличие от (1) и (2) определяется при решении нелинейного уравнения [8, 9]

$$u = (1 - \alpha_1)(1 - 2 \operatorname{sn}^2(u - u_{01}, k_1)) / Q_1 + (1 - \alpha_2)(1 - 2 \operatorname{sn}^2(u - u_{02}, k_2)) / Q_2. \quad (3)$$

Решение нелинейных уравнений (1)–(3) выполнялось методом итераций по переменной  $m$  ( $m = \overline{1, N_2}$ ) при фиксированных значениях  $N_1 = 120$ ;  $N_2 = 162$ ;  $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$ ;  $u_{01} = u_{02} = 29.537$ ;  $k_2 = 0.5$ ;  $p_{02} = -3.457 \cdot 10^{-5}$ ;  $n_{02} = 59.1471$ ;  $m_{02} = 80.3267$ . На основе уравнения (1) получено решение для отдельного слоя с  $p_{01} = 0.1523$ . Поведение поля деформации для различных модулей  $k_1$  дано на рис. 1.

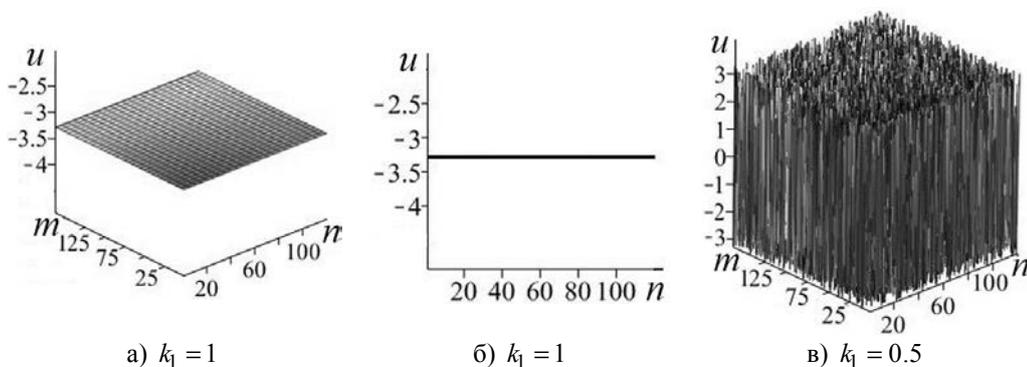


Рис. 1. Поведение  $u = u_1$  отдельного слоя (с  $p_{01} = 0.1523$ ) от  $n, m$  для различных модулей  $k_1$  (а, в); проекция на плоскость  $nOu$  (б).

При  $k_1 = 1$  нелинейное уравнение (1) имеет вид  $u_1 = (1 - \alpha_1)(1 - 2 \operatorname{th}^2(u_1 - u_{01})) / p_{01}$ . Решением этого уравнения является отдельная плоскость с отрицательным значением  $u_1 = -u_{11} = -3.2829$  (рис. 1, а, б). Изменения модуля  $k_1$  приводят к образованию стохастического слоя (рис. 1 в) вместо отдельной плоскости (рис. 1, а, б). Для значений модуля  $k_1 \in [k_{1C}, 1)$  ( $k_{1C}$  – критическое значение модуля близкое к единице) выполняется условие  $\operatorname{sn}^2(u_1 - u_{01}, k_{1C}) < 0.5$ . Поэтому весь стохастический слой находится вблизи нижней граничной плоскости  $u_1 = -u_{11}$ . Для значений модуля  $k_1 \in [0, k_{1C}]$  смещения узлов решетки изменяются в интервале  $(-u_{11}, u_{11})$ . С другой стороны, изменение знака у параметра  $p_{01} = -0.1523$  приводит к появлению при  $k_1 = 1$  отдельной плоскости с положительным значением  $u_{11} = 3.2829$ . Теперь для  $k_1 \in [k_{1C}, 1)$  весь стохастический слой находится вблизи верхней граничной плоскости  $u_1 = u_{11}$ .

На основе уравнения (2) получено решение для квантовой точки с полуосями  $n_{c2} = 119.5172$ ,  $m_{c2} = 161.718$ . Поведение поля деформации этой квантовой точки дано на рис. 2. Для квантовой точки характерно наличие острых пиков с большими амплитудами (аналог Бозе-Эйнштейновского конденсата) в области их локализации (рис. 2, а) и стохастического поведения с малыми амплитудами вблизи ядра локализации пиков (рис. 2, б). На рис. 2 в наблюдается эллиптическое кольцо с малыми амплитудами смещений (в  $2 \cdot 10^3$  раз меньшими) по сравнению с пиками рис. 2, а. В течении (рис. 2, б, в) внутри кольца формируется дыра с фрактальной структурой. Полуоси кольца  $n_{ck} \approx 55$ ,  $m_{ck} \approx 75$ , центр кольца имеет такие же значения  $n_{02}$ ,  $m_{02}$ , что и у квантовой точки.

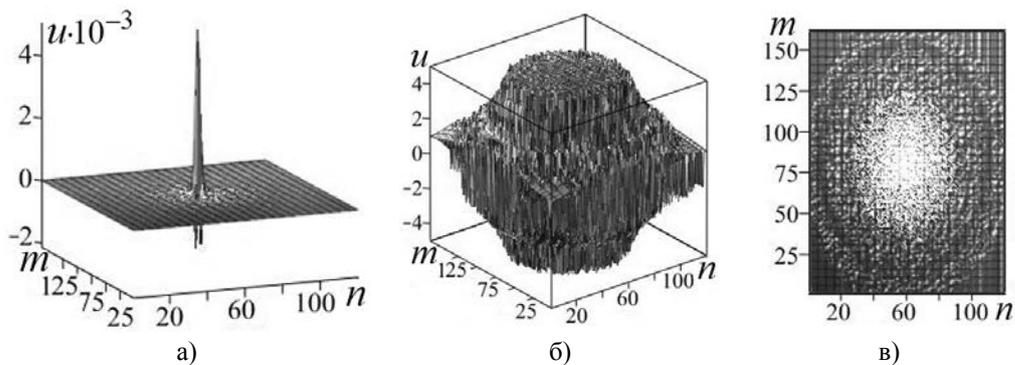


Рис. 2. Поведение функции смещения  $u = u_2$  от  $n, m$  (а); сечение  $u_2 \in [-5; 5]$  (б); вид сечения сверху (в).

Далее приведем результаты влияния отдельного слоя и квантовой точки друг на друга на основе решения уравнения (3) (рис. 3–5). Поведение поля деформации связанной системы I (отдельной плоскости с параметрами из рис. 1 а, б и квантовой точки с параметрами из рис. 2) дано на рис. 3. Отметим, что стохастическое поведение поля деформации этой связанной системы определяется в основном стохастическим поведением квантовой точки. При этом наблюдаются сдвиги (вниз) регулярного поведения поля деформации за счет влияния отдельной плоскости. Поведение поля деформации связанной системы II (отдельная плоскость с параметрами из рис. 1, а, б и квантовая точка с уменьшенными в 4 раза полуосями  $n_{c2} = 29.8793$ ,  $m_{c2} = 40.4295$  по сравнению с рис. 2) дано на рис. 4, а, б, в. При этом наблюдаются уменьшение амплитуд основного пика (рис. 4, а) по сравнению с

рис. 3, а; сужение области стохастического поведения (рис. 4, б, в) по сравнению с рис. 3, б, в; появление «наплыва» (практически регулярной выпуклой области) вблизи основного пика (рис. 4, б).

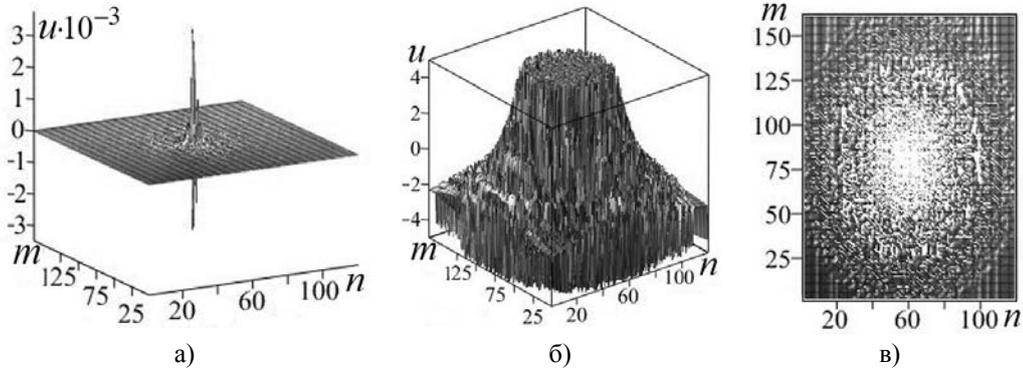


Рис. 3. Поведение функции смещения  $u$  связанной системы I от  $n, m$  при  $k_1 = 1, k_2 = 0.5$  (а); сечение  $u \in [-5; 5]$  (б); вид сечения сверху (в).

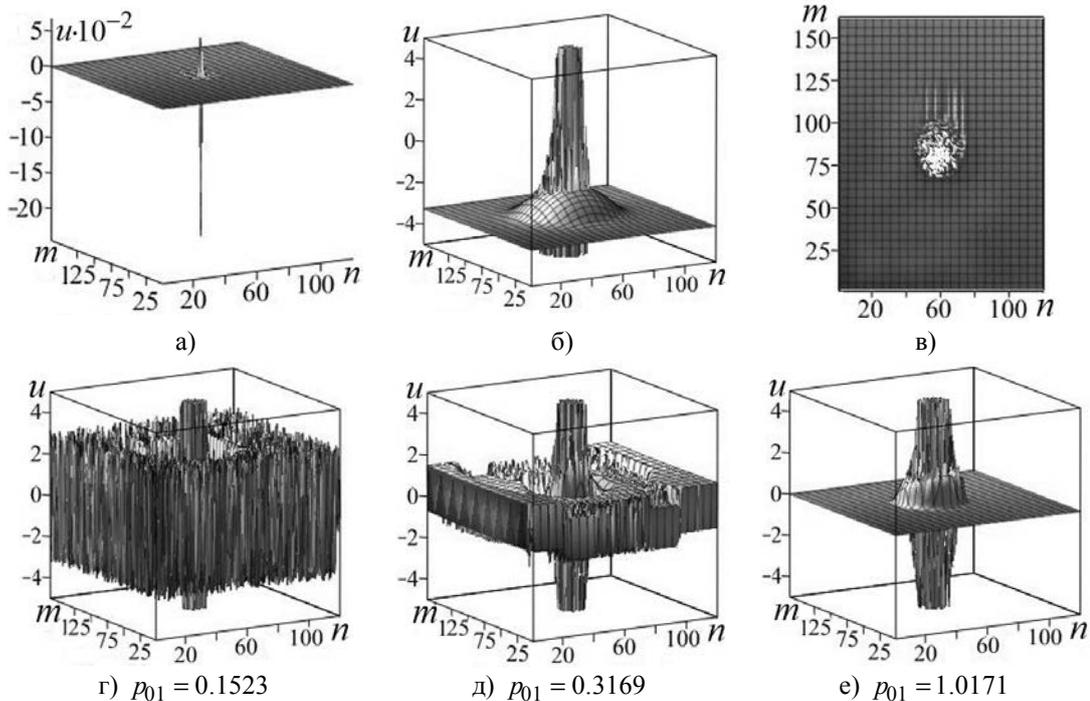


Рис. 4. Поведение функции смещения  $u$  связанных систем от  $n, m$ : II –  $k_1 = 1, p_{01} = 0.1523$  (а, б, в), сечение  $u \in [-5; 5]$  (б), вид сечения сверху (в); III –  $k_1 = 0.5$ , сечения  $u \in [-5; 5]$  для различных  $p_{01}$  (г, д, е).

Поведение поля деформации связанной системы III (стохастический слой с  $k_1 = 0.5$ , различными  $p_{01}$  и квантовая точка с полуосями  $n_{c2} = 29.8793, m_{c2} = 40.4295$ ) дано на рис. 4, г, д, е. Увеличение параметра  $p_{01}$  у стохастического слоя приводит к уменьшению амплитуд поля деформации вне области локализации квантовой точки в связанной системе III. Поведение поля деформации связанной системы IV (стохастический слой с  $k_1 = 0.5, p_{01} = 0.1523$  и квантовая точка с увеличенными полуосями по сравнению с рис. 2) дано на рис. 5. Увеличение полуосей у квантовой точки приводит к

расширению зоны влияния стохастического поведения квантовой точки на весь стохастический слой (рис. 5, а, б, в).

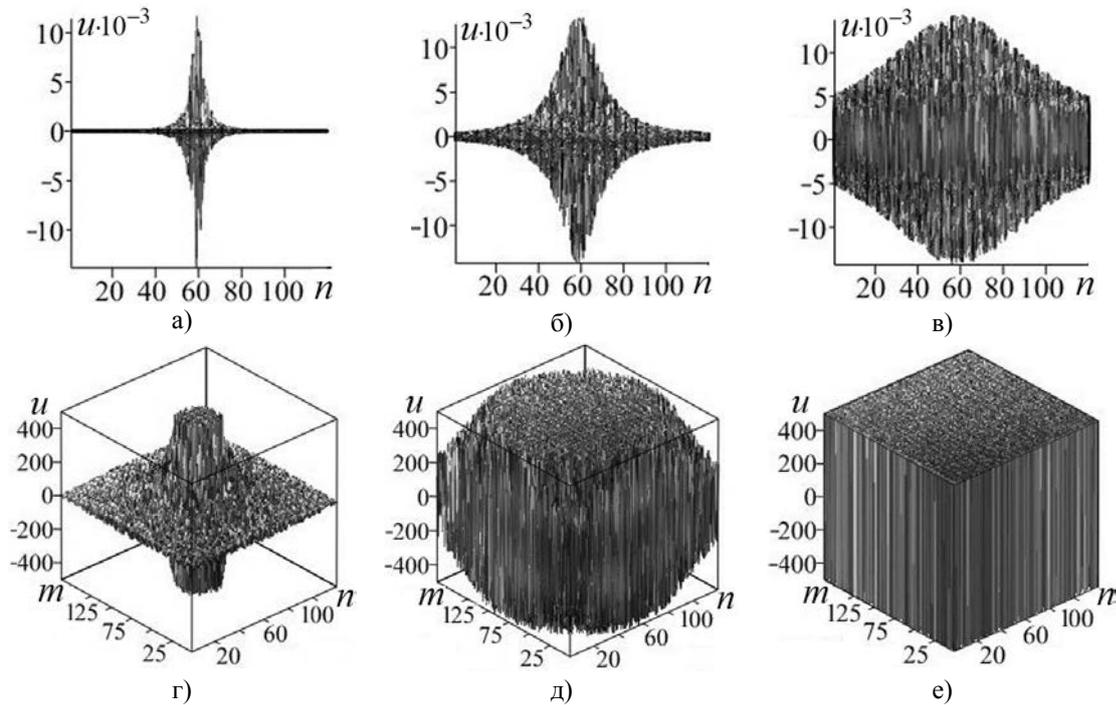


Рис. 5. Поведение  $u$  (а, б, в) и сечений  $u \in [-500; 500]$  (г, д, е) системы IV от  $n, m$  для различных полюсов:  $n_{c2}, m_{c2}$  увеличены в 4 (а, г), 16 (б, д), 64 (в, е) раза по сравнению с рис. 2.

Для функции смещения связанной системы IV (рис. 5 в) характерно наличие уширенного пика на фоне ярко выраженного стохастического основания с большими амплитудами (форма сигнала типа гало).

**Многослойная наносистема с парами вихрь-антивихрь.** Описание поля деформации в многослойной наносистеме при наличии вихрей, антивихрей, пар вихрь-антивихрь будем проводить с учетом переменного модуля  $k_u$  функции эллиптического синуса, который зависит от параметров в слое  $j$ . Для двух ветвей ( $r=1,2$ ) безразмерного смещения  $u_r$  узла решетки в слое  $j$  с парами вихрь-антивихрь получены модельные нелинейные уравнения [4, 12]

$$u = u_1 = k_u^2(1 - 2 \operatorname{sn}^2(u_1 - u_0, k_u)); \quad u = u_2 = k_u^2(1 - 2 \operatorname{sn}^2(u_2 - u_0, k_u)); \quad k_u^2 = (1 - \alpha)Q^{-1};$$

$$Q = p'_0 + p'_3 j - b_3(j - j_0)^2 j_c^{-2}; \quad k_u^2 + (k'_u)^2 = 1; \quad u_0 = F(\varphi_0; k_u); \quad \varphi_0 = \pi n_{\varphi 0}(1 - 2f_s)/4, \quad (4)$$

где  $|\alpha|$  – фрактальная размерность поля деформации  $u$  вдоль оси  $Oz$  ( $\alpha \in [-1; 1]$ );  $u_0$  – критическое смещение, зависящее от угла  $\varphi_0, k_u$ ;  $F$  – неполный эллиптический интеграл первого рода;  $p'_0, p'_3, b_3, j_0, j_c$  – некоторые управляющие параметры;  $f_s = s/d, f'_s + f_s = 1, s$  – расстояние между вихрем и антивихрем в паре, которая находится в кольце радиуса  $R$  с областью сужения шириной  $d$ ; целые числа  $n_{\varphi 0} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  определяют набор различных состояний поля деформации с левой ( $n_{\varphi 0} > 0$ ) и правой ( $n_{\varphi 0} < 0$ ) поляризациями.

Перестройка состояний поля деформации выполняется изменениями  $\varphi_0$ ,  $u_0$ , параметра  $f_s$ . Анализ поведения поля деформации проводим в терминах усредненных (по  $n, m$ ) комплексных функций  $M = M_r$ ,

$$M_r(j) = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{u}_r) = M_r' + iM_r''; \quad \hat{\rho} = \hat{\xi}_{N2}^T \hat{\xi}_{N1} / N_2 N_1; \quad M_r' = \text{Re } M_r; \quad M_r'' = \text{Im } M_r, \quad (5)$$

где  $\text{Sp}$  – след квадратной матрицы;  $i$  – мнимая единица; « $T$ » – операция транспонирования;  $\hat{\xi}_{N1}$ ,  $\hat{\xi}_{N2}$  – вектор-строки с элементами равными единице.

Выполним численное моделирование для инверсных состояний с  $\alpha = -0.5$  и исходными параметрами  $N_1 = 30$ ,  $N_2 = 40$ ,  $N_3 = 67$ ,  $j_0 = 30.5279$ ,  $j_c = 11.8247$  на основе зависимостей  $M_r$  из (5) от  $j$ ,  $f_s$  и значений управляющих параметров  $p_0'$ ,  $p_3'$ ,  $b_3$  для  $u_r$  из (4). Решение уравнений (4) находим методом итераций по переменной  $m$  с начальными условиями  $u_1 = u_2 = 0$ . Пример поведения функции  $M_1$  от  $f_s$  для различных вариантов выбора пары параметров  $p_3', b_3$  для слоя с  $j = 30$  дан на рис. 6. Для варианта  $p_3' = 0$ ,  $b_3 = 1$  (рис. 6 б, д) характерным является отсутствие эффективного затухания ( $M_1'' = 0$ , рис. 6 д). Для  $M_1'$  (рис. 6 б) наблюдаются два минимума при  $f_{s1} = 0.19$  и  $f_{s5} = 0.86$ .

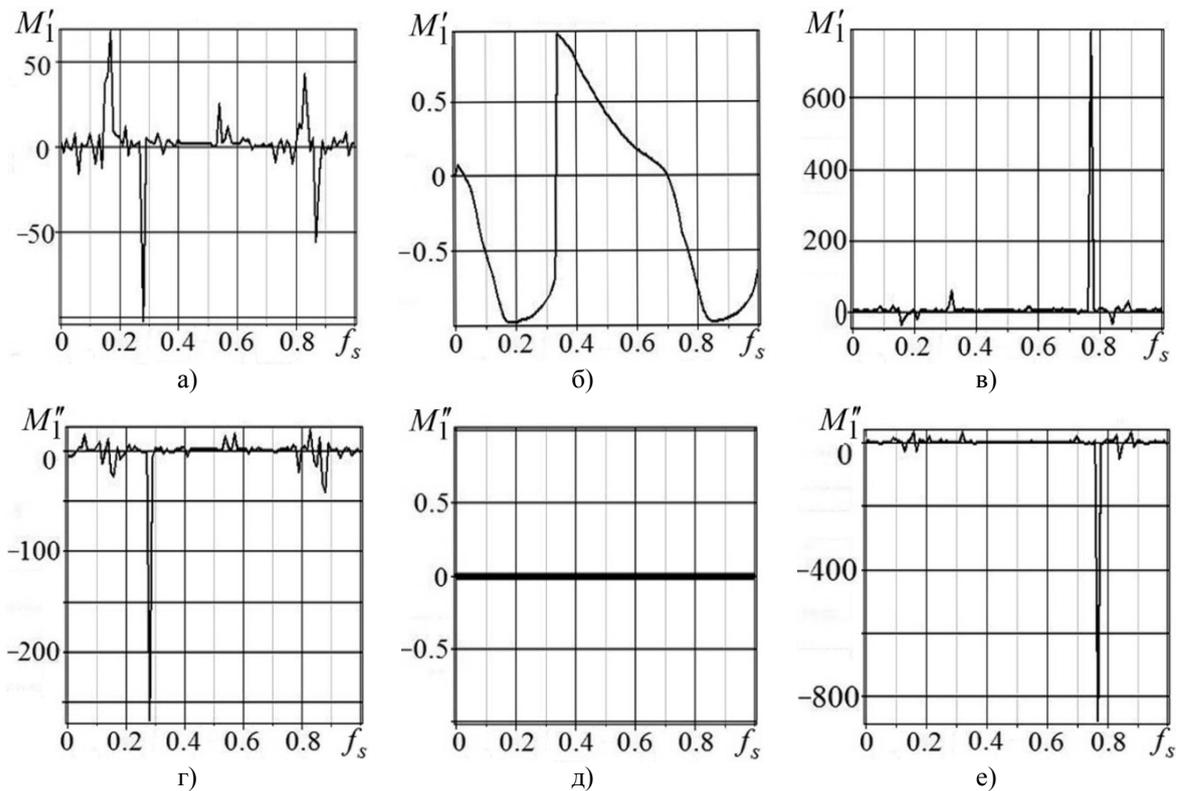


Рис. 6. Поведение  $M_1$  от  $f_s$  при  $\alpha = -0.5$ ,  $n_{\varphi 0} = 3$ ,  $j = 30$ ,  $p_0' = 1.5123$ : (а, г)  $p_3' = -0.03375$ ,  $b_3 = 0$ ; (б, д)  $p_3' = 0$ ,  $b_3 = 1$ ; (в, е)  $p_3' = -0.03375$ ,  $b_3 = 1$ .

Между ними формируется сигнал сложной формы с ярко выраженным максимумом при  $f_{s2} = 0.34$ , слабо выраженным максимумом вблизи  $f_{s4} = 0.67$  и точкой перегиба между ними вблизи  $f_{s3} = 0.63$ .

Для других вариантов выбора пары  $p'_3, b_3$  функция  $M_1$  становится комплексной (появляется мнимая часть, которая связана с эффективным затуханием) с ярко выраженным стохастическим поведением и образованием отдельных пиков (рис. 6, а, г; 6 в, е). Поведения реальных и мнимых частей этих усредненных функций существенно различаются. Так при  $f_s = 0.28$  (рис. 6, а, г) наблюдаются пики вниз для  $M'_1$  и  $M''_1$ , а при  $f_s = 0.76$  (рис. 6, в, е) наблюдаются пик вверх для  $M'_1$  и пик вниз для  $M''_1$ . Эти данные позволяют говорить о возникновении вихрей, антивихрей в многослойной наносистеме.

Поведение  $M_2 = M'_2$  от  $f_s$  в отсутствие эффективного затухания ( $M''_2 = 0$  для слоя  $j = 30$ ) при различных  $n_{\varphi 0}$  демонстрирует эффекты изменения поляризации, перестройки структурных состояний поля деформации и возможности гистерезисных явлений (рис. 7). Наблюдаются состояния с правой (рис. 7, а, б) и левой (рис. 7, г, д, е) поляризациями. Поведение  $M_2$  (рис. 7, е) является более сложным по сравнению с  $M_1$  (рис. 6, б).

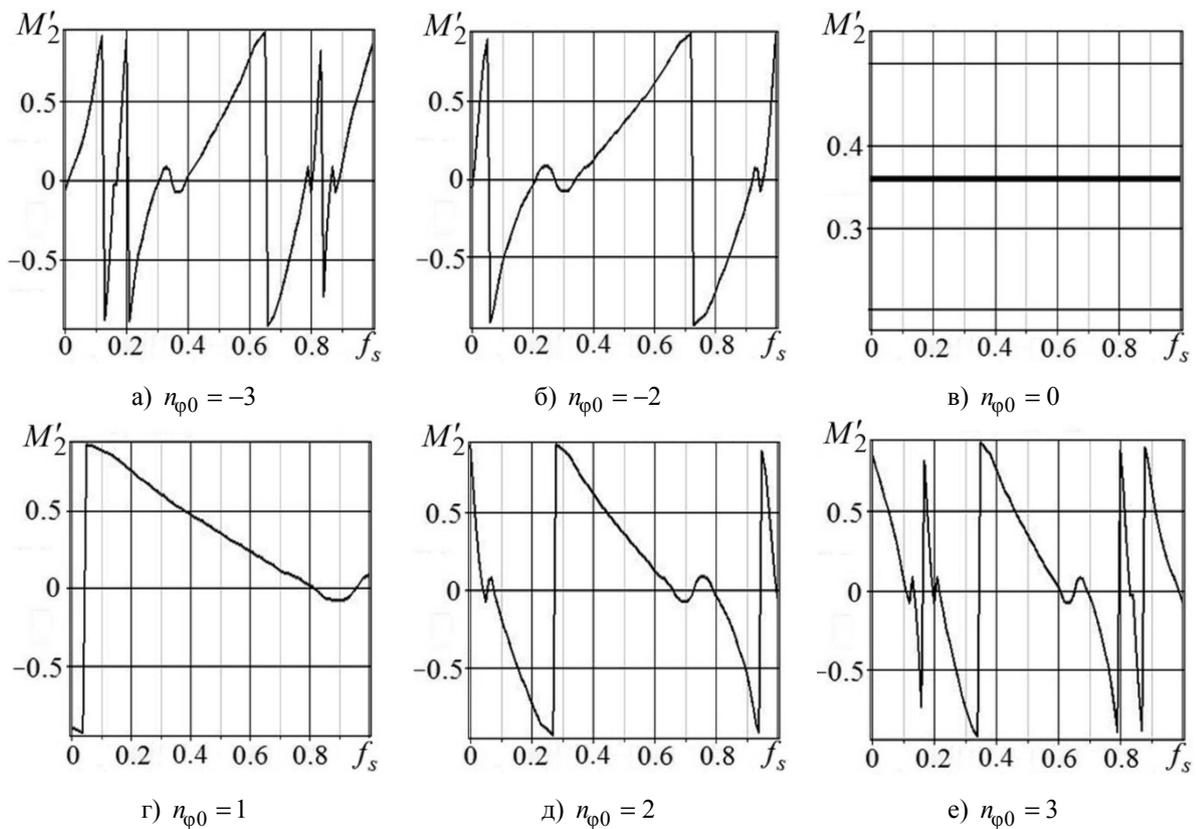


Рис. 7. Поведение  $M'_2$  от  $f_s$  при  $\alpha = -0.5$ ,  $j = 30$ ,  $p'_0 = 1.5123$ ,  $p'_3 = 0$ ,  $b_3 = 1$  для различных  $n_{\varphi 0}$ .

При этом на  $M'_2$  наблюдаются: основные минимумы при  $f_{s1} = 0.16$ ,  $f_{s3} = 0.34$ ,  $f_{s7} = 0.79$ ,  $f_{s9} = 0.88$  и дополнительный минимум при  $f_{s5} = 0.63$ ; основные максимумы при  $f_{s2} = 0.17$ ,  $f_{s4} = 0.35$ ,  $f_{s8} = 0.8$ ,  $f_{s10} = 0.89$  и дополнительный максимум при  $f_{s6} = 0.67$ . Отметим, что особенность типа точки перегиба при  $f_{s3} = 0.63$  на зависимости  $M'_1$  (рис. 6, б) при переходе к  $M'_2$  (рис. 7, е) заменяется на особенность типа локального минимума при  $f_{s5} = 0.63$ . Такое поведение характерно для систем,

описываемых двумя потенциальными ямами и барьером между ними [3]. На  $M'_2$  наблюдается число ям больше чем два. Глубина ям и высота барьеров определяются критическими значениями  $M'_2$  в этих точках, их положение связано с критическими значениями  $f_s, \varphi_0$ . Так для рис. 7, е имеем: при  $f_{s5} = 0.63$ ,  $\varphi_{05} = -35.1^\circ$ ,  $M'_2 = M'_{25} = -0.0804$ ; при  $f_{s6} = 0.67$ ,  $\varphi_{06} = -45.9^\circ$ ,  $M'_2 = M'_{26} = 0.0809$ .

Описание перестройки структурных состояний и гистерезиса удобно проводить в терминах функций  $M_{\beta 2} = M'_{\beta 2} + iM''_{\beta 2}$ ,  $m_{\beta 2} = m'_{\beta 2} + im'_{\beta 2}$  (нормированные полусуммы, полуразности усредненных функций, рис. 8, 9)

$$M_{\beta 2} = -\beta_{20}[M_2(f_s; n_\varphi) + M_2(f_s; -n_\varphi)]/2; \quad \beta_{20} = \left( (M'_{20})^2 + (M''_{20})^2 \right)^{-1/2};$$

$$m_{\beta 2} = -\beta_{20}[M_2(f_s; n_\varphi) - M_2(f_s; -n_\varphi)]/2; \quad M'_2(f_s; 0) = M'_{20}; \quad M''_2(f_s; 0) = M''_{20}. \quad (6)$$

По вычисленным значениям  $M'_{20} = -0.5404$ ,  $M''_{20} = 1.1062 \cdot 10^{-16}$  найден параметр нормировки  $\beta_{20} = 1.8505$ .

Примеры поведения гистерезисных кривых для целых  $n_{\varphi 0}$  и полуцелых значений  $n_\varphi$  для двух значений полуосей  $j_c = j_{c1} = 11.8247$  и  $j_c = j_{c2} = 2.9562$  даны на рис. 8, 9.

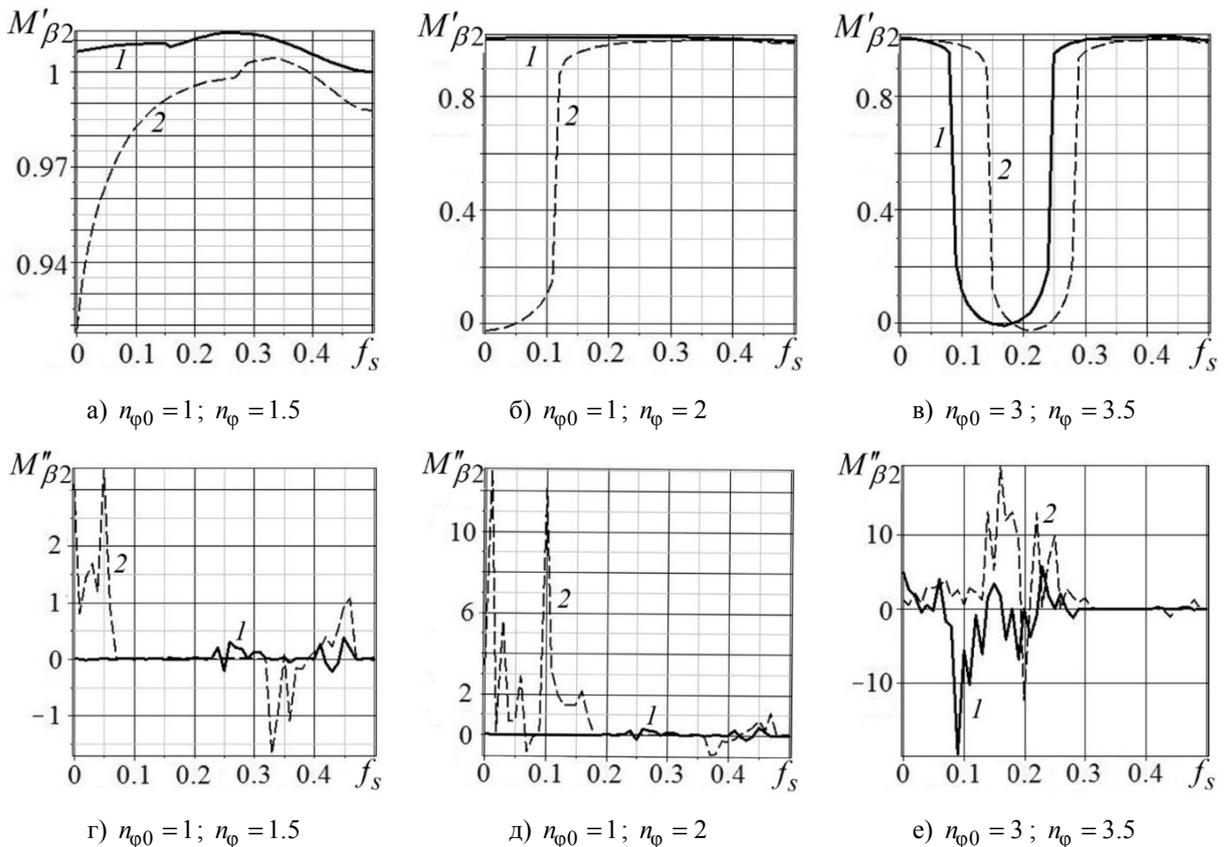


Рис. 8. Поведение  $M'_{\beta 2}$ ,  $M''_{\beta 2} \cdot 10^{14}$  от  $f_s$  при  $\alpha = -0.5$ ,  $j = 30$ ,  $p'_0 = -1.5123$ ,  $p'_3 = 0$ ,  $b_3 = 1$ :

1 – сплошная линия для  $j_c = 11.8247$  (а, б, г, д)  $n_{\varphi 0} = 1$ ; (в, е)  $n_{\varphi 0} = 3$ ;

2 – пунктирная линия для  $j_c = 2.9562$  (а, г)  $n_\varphi = 1.5$ ; (б, д)  $n_\varphi = 2$ ; (в, е)  $n_\varphi = 3.5$ .

Перестройка структурных состояний за счет изменения  $f_s$ ;  $n_{\varphi 0}$ ,  $\varphi_0$ ;  $n_{\varphi}$ ,  $\varphi$  сопровождается изменением положений локальных максимумов и минимумов, ям и барьеров, поляризации на зависимостях  $M_2$  из (5). Анализ поведения реальных  $M'_{\beta 2}$ ,  $m'_{\beta 2}$  (рис. 8, а, б; 9, а) и мнимых  $M''_{\beta 2}$ ,  $m''_{\beta 2}$  (рис. 8, г, д; 9, г) частей функций  $M_{\beta 2}$ ,  $m_{\beta 2}$  из (6) вновь подтверждает наличие вихрей, антивихрей в многослойной наносистеме. Выбор двух различных полюсей  $j_{c1}$ ,  $j_{c2}$  согласно (4) приводит к двум различным  $Q = Q_{c1}$ ,  $Q = Q_{c2}$  и, соответственно, к двум различным модулям  $k_u = k_{c1}$ ,  $k_u = k_{c2}$ . Поэтому перестройка структурных состояний за счет изменения  $j_c$  сопровождается появлением гистерезисных явлений (рис. 8 б, в; 9 а, б, в). Двойные гистерезисные петли (рис. 8, в; 9, б, в) свидетельствуют о наличии связанных состояний (пар вихрь-антивихрь).

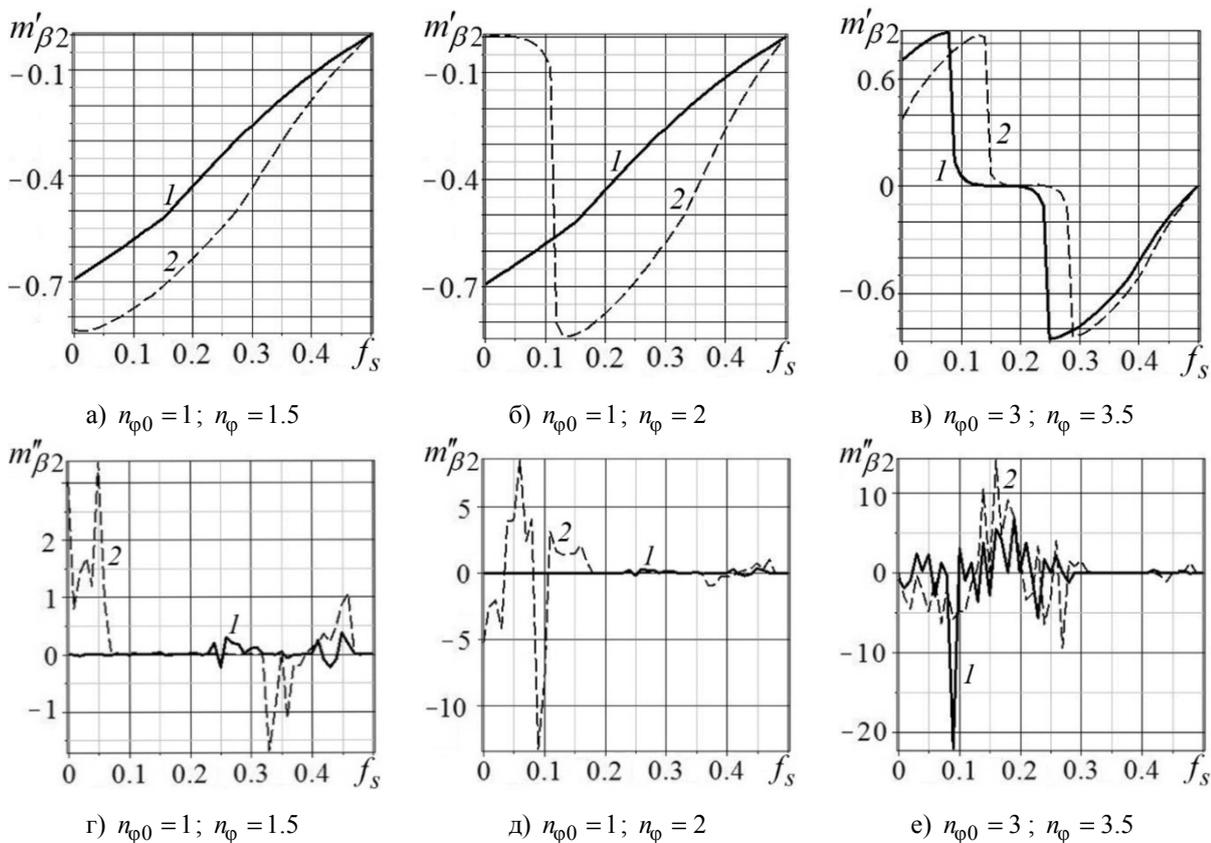


Рис. 9. Поведение  $m'_{\beta 2}$ ,  $m''_{\beta 2} \cdot 10^{14}$  от  $f_s$  при  $\alpha = -0.5$ ,  $j = 30$ ,  $p'_0 = -1.5123$ ,  $p'_3 = 0$ ,  $b_3 = 1$ :

1 – сплошная линия для  $j_c = 11.8247$  (а,б,г,д)  $n_{\varphi 0} = 1$ ; (в,е)  $n_{\varphi 0} = 3$ ;

2 – пунктирная линия для  $j_c = 2.9562$  (а,г)  $n_{\varphi} = 1.5$ ; (б,д)  $n_{\varphi} = 2$ ; (в,е)  $n_{\varphi} = 3.5$ .

**Выводы.** В многослойной наносистеме смещения узлов решетки слоя при модуле  $k_1 = 1$  представляют собой отдельную плоскость, а при  $k_1 \neq 1$  образуют стохастический слой. Ширину и область локализации стохастического слоя можно контролировать изменениями модуля  $k_1$ , параметра  $p_{01}$ . Для квантовой точки при модуле  $k_2 \neq 1$  характерно наличие острых пиков с большой амплитудой (аналог Бозе-Эйнштейновского конденсата) и стохастического поведения вблизи ядра локализации основных пиков.

Дополнительно для квантовой точки наблюдается эллиптическое кольцо с малыми амплитудами смещений (в  $2 \cdot 10^3$  раз меньшими) по сравнению с пиками. В сечении внутри кольца формируется дыра с фрактальной структурой.

В связанной системе отдельный слой и квантовая точка влияют друг на друга. Уменьшение полуосей квантовой точки приводит к эффектам: уменьшению амплитуд основного пика; сужению области стохастического поведения; появлению «наплыва» вблизи основного пика. Увеличение полуосей у квантовой точки приводит к эффектам: расширению зоны влияния стохастического поведения квантовой точки на весь стохастический слой; появлению уширенного пика на фоне ярко выраженного стохастического основания с большими амплитудами (форма сигнала типа гало). Для связанной системы увеличение параметра  $p_{01}$  у стохастического слоя приводит к уменьшению амплитуд поля деформации вне области локализации квантовой точки.

Учет влияния отдельных слоев друг на друга в многослойной наносистеме через переменный модуль эллиптических функций приводит к образованию вихрей, антивихрей, пар вихрь-антивихрь. Это подтверждается зависимостями эффективных смещений от  $f_s$  и параметров  $j_c$  (рис. 8, а, б, в; 9, а, б, в),  $n_{c2}$ ,  $m_{c2}$  (рис. 5),  $p_{01}$  (рис. 4), где наблюдаются изменение потенциального рельефа, появление ям и барьеров, гистерезисные явления. Гистерезис и появление двойных гистерезисных петель на зависимостях эффективных смещений  $M_{\beta 2}$ ,  $m_{\beta 2}$  от  $f_s$  связаны с наличием набора метастабильных и связанных состояний при  $n_{\varphi 0} \neq 0$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Нелинейности в периодических структурах и метаматериалах / под ред. Ю. С. Кившаря и Н. Н. Розанова. – М.: Физматлит. 2014. – 384 с.
2. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor / M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews et al. // Science. 1995. – Vol. 269, No. 5221. – P. 198-201.
3. Hysteresis in a quantized superfluid ‘atomtronic’ circuit / S. Eckel, J. G. Lee, F. Jendrzejewski et al. // Nature. 2014. – Vol. 506, No. 7487. – P. 200-203.
4. Абрамов В. С. Бозон Хиггса во фрактальных квантовых системах с активными наноэлементами / В. С. Абрамов // 12 Международные чтения по квантовой оптике (IWQO-2015). Сборник статей (Москва, Троицк. 11-16 августа 2015 г.). – М.: МПГУ. 2015. – С. 136-139.
5. Higgs P. W. Broken symmetries and the masses of gauge bosons / P. W. Higgs // Physical Review Letters. – 1964. – Vol. 13. – P. 508-509.
6. Кейн Г. Суперсимметрия. От бозона Хиггса к новой физике / Г. Кейн. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. – 232 с.
7. Кэрролл Ш. Частица на краю вселенной. Как охота на бозон Хиггса ведет нас к границам нового мира / Ш. Кэрролл. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. – 352 с.
8. Abramova O. P. Fractal nanotraps based on quasi-two-dimensional fractal structures / O. P. Abramova, S. V. Abramov // In book Dynamical Systems Theory. – Poland, Lodz. 2013. – P. 71-80.
9. Abramova O. P.. Coupled Fractal Nanosystem: Trap – Quasi-two-dimensional Structure / O. P. Abramova, S. V. Abramov // Nonlinear Dynamics and Systems Theory. – 2015. – Vol. 15, N 1. – P. 4-13.
10. Abramov V. S. Model of Nonlinear Fractal Oscillator in Nanosystem / S.V. Abramov // In book Applied Non-Linear Dynamical Systems. Springer Proceedings in Mathematics & Statistics. – 2014. – Vol. 93. – P. 337-350.
11. Abramov V.S. Transient Processes in a Model Multilayer Nanosystem with Nonlinear Fractal Oscillator / S.V. Abramov // CMSIM Journal. – 2015. – N 1. – P. 3-15.
12. Абрамов В. С. Перестройка стохастического состояния поля деформации в модельной многослойной наносистеме / В. С. Абрамов // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. 2014. Вып. 2. – С. 81-89.

Поступила в редакцию 12.04.2016 г.

VORTICES IN A FRACTAL MULTILAYER NANOSYSTEM

*V.S. Abramov*

Theoretically and by method of numerical simulation the stochastic behavior of the deformation field of coupled system: fractal layer – fractal quantum dot is investigated. It is shown that a decrease of semi-axes of the quantum dot leads to a decrease of the amplitude and the appearance of "influx" from the main peak and a narrowing of the range of stochastic behavior. With increasing the semi-axes a broadened peak is formed on the background of the stochastic base (signal in the form of halo type). The behavior of multilayer nanosystem with vortices is characterised by: changes in the position of the local maxima and minima, wells and barriers, polarisation, hysteresis, the appearance of the double hysteresis loops on the dependencies of the effective displacements on the same parameters (that is associated with the presence of a set of metastable and coupled states).

**Keywords:** fractal layer; fractal quantum dot; coupled system; vortices; numerical simulation; multilayer nanosystem.

**Абрамов Валерий Сергеевич**

кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник  
Донецкий физико-технический институт имени А. А. Галкина,  
ул. Р. Люксембург 72, Донецк, 83114  
vsabramov@mail.ru

**Abramov Valeriy Sergeevich**

Candidate in Physics and Mathematical Sciences, Senior Research Officer  
Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin,  
72 R. Luxemburg st., Donetsk, 83114

УДК 539:519.517.3

## ФРАКТАЛЬНЫЕ ОБЪЕМНЫЕ СТРУКТУРЫ И АТТРАКТОРЫ В МНОГОСЛОЙНОЙ НАНОСИСТЕМЕ

© 2016. *О.П. Абрамова*

---

Исследовано поведение поля деформации связанных многослойных наносистем: фрактальная ловушка – фрактальная объемная структура. Показано, что при пересечении поверхности связанной структуры критической плоскостью образуется линия особых точек (аттракторов) поля деформации. Анализ изолиний ядра особых точек показывает, что поведение связанных систем с одинаковыми или различными центрами тяжести существенно различается. Показано, что поле деформации связанных структур определяется взаимодействием стохастических процессов друг на друга. При изменении параметров возможны эффекты смещения фрактальных структур, перестройки тонкой квазипериодической структуры внутри ловушки, появление дополнительной тонкой структуры вне ловушки.

**Ключевые слова:** фрактальная объемная структура; фрактальные наноловушки; связанные системы; аттракторы; поле деформации; многослойная наносистема.

---

**Введение.** Нобелевская премия 2014 года по физиологии и медицине была присуждена Дж. О'Кифи, М.-Б. Мозер и Э. Мозеру за открытие системы клеток в мозге, которые определяют положение в пространстве [1–3]. Дж. О'Киф открыл активные нейроны или «клетки места». М.-Б. Мозер и Э. Мозер открыли координатные нейроны или «клетки решетки» (grid-cell). Мозг живых организмов представляет собой определенную нейронную сеть. При этом активные клетки реагируют на пересечение узлов воображаемой гексагональной пространственной решетки, то есть на прохождение определенных расстояний в определенном направлении. При описании нейронных сетей [4] могут найти свое применение модельные многослойные наносистемы и появляющиеся там объемные фрактальные структуры.

При описании фрактальных объемных структур [5–9] в многослойной наносистеме в качестве активных элементов могут выступать узлы объемной решетки, которые являются аттракторами [10]. Эти аттракторы образуют поверхность активных элементов поля деформации (поля смещений). Чтобы определить положение особых точек (аттракторов) поля смещений в отдельном активном слое необходимо пересечь эту поверхность плоскостью. В результате можно найти изолинии особых точек в отдельном слое.

В работах [8, 9] показана возможность создания фрактальных наноловушек на основе объемных структур в многослойной наносистеме. Фрактальные объемные структуры можно использовать в качестве ловушек для пленения или захвата других фрактальных структур (частиц или групп частиц) с целью исследования их физических свойств. Экспериментально такие ловушки могут создаваться, например, с помощью двух лазеров [11] или возникать при самоорганизации в нейронных сетях [1–4]. При этом многие физические свойства возникающих связанных фрактальных систем (ловушка – объемная структура) отличаются от свойств отдельных фрактальных ловушки, объемной структуры.

Целью данной работы является описание аттракторов и особенностей поведения поля деформации связанных систем: фрактальная наноловушка – фрактальная объемная структура.

**Аттракторы во фрактальных объемных структурах.** Рассматривается связанная система: наноловушка – фрактальная объемная структура (НЛ-ФОС), находящаяся в объемной дискретной решетке  $N_1 \times N_2 \times N_3$ , узлы которой задаются целыми числами  $n, m, j$ . Эволюция состояний такой системы существенно зависит от выбора итерационного процесса при решении основных нелинейных уравнений [7–9]. Нелинейное уравнение для безразмерной функции смещения  $u$  узла решетки такой связанной системы задается в виде

$$u = R_1(1 - \alpha)(1 - 2 \operatorname{sn}^2(u - u_0, k)) / Q_1 + R_2(1 - \alpha)(1 - 2 \operatorname{sn}^2(u - u_0, k)) / Q_2; \quad (1)$$

$$Q_i = p_{0i} - b_{1i}(n - n_{0i})^2 / n_{ci}^2 - b_{2i}(m - m_{0i})^2 / m_{ci}^2 - b_{3i}(j - j_{0i})^2 / j_{ci}^2; \quad (2)$$

$$p_{0i} = p'_{0i} + p'_{1i}n + p'_{2i}m + p'_{3i}j. \quad (3)$$

В выражении (1) для смещения  $u$  первое слагаемое характеризует наноловушку (НЛ,  $i=1$ ), а второе – фрактальную объемную структуру (ФОС,  $i=2$ ). Здесь  $\alpha$  – фрактальная размерность поля деформации  $u$  вдоль оси  $Oz$  ( $\alpha \in [0, 1]$ );  $u_0$  – постоянное (критическое) смещение;  $k$  – модуль функции эллиптического синуса; параметры  $R_1, p'_{0i}, p'_{1i}, p'_{2i}, p'_{3i}, b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}, n_{0i}, n_{ci}, m_{0i}, m_{ci}, j_{0i}, j_{ci}$  характеризуют НЛ и различные ФОС.

В общем случае эти параметры могут зависеть от индекса слоя  $j$  и безразмерного времени  $t$ . Функции  $Q_1, Q_2$  учитывают взаимодействие узлов, как в плоскости основной прямоугольной дискретной решетки, так и межплоскостные взаимодействия.

Особые точки (аттракторы) поля деформации многослойной наносистемы располагаются на поверхности, ядро которой определяется из условия

$$Q_1 \cdot Q_2 = 0. \quad (4)$$

Если поверхность (4) пересечь плоскостью  $j = j_k$ , то получим уравнение изолиний.

Рассмотрим следующие фрактальные объемные структуры (ФОС): фрактальную квантовую точку (ФКТ), фрактальный эллипсоид (ФЭ), фрактальный эллиптический параболоид (ФЭП) и фрактальный эллиптический цилиндр (ФЭЦ).

Объемная дискретная решетка задается параметрами:  $N_1 = 30, N_2 = 40, N_3 = 200$  ( $n = \overline{1, N_1}; m = \overline{1, N_2}; j = \overline{-N_3, N_3}$ ). На основе этих структур образуем связанные системы НЛ-ФОС, у которых центры тяжести НЛ и ФОС совпадают (рис. 1, 2), где параметры  $n_{0i} = 14.3267; n_{ci} = 9.479; m_{0i} = 19.1471; m_{ci} = 14.7295; j_{0i} = 31.5279; j_{ci} = 11.8247$  ( $i=1, 2$ ).

На рис. 1, а приведена поверхность ядра НЛ-ФОС с НЛ в виде ФКТ (типа мнимого ФЭ) с  $p'_{01} = -1.0123$  и ФОС в виде ФЭ с  $p'_{02} = 1.0123$ , где параметры  $b_{1i} = b_{2i} = b_{3i} = 1, p'_{1i} = p'_{2i} = p'_{3i} = 0$ . Изолинии ядра особых точек (4) даны на рис. 1, б-г. Для нижнего ( $j_k = 20$ ) и верхнего ( $j_k = 43$ ) критических слоев изолинии близки к структуре гексагонального типа, а для среднего ( $j_k = 31$ ) слоя – к структуре эллипса.

На рис. 1, д приведена поверхность ядра НЛ-ФОС с НЛ в виде ФКТ с  $p'_{31} = -0.03375$  и ФОС в виде ФЭ с  $p'_{32} = 0.03375$ , при этом, остальные параметры прежние, как и для рис. 1, а. В этом случае ядро связанной системы НЛ-ФОС сдвинуто

в области  $N_1 \times N_2$ , форма поверхности ядра изменяется по сравнению с рис. 1, а, появляются дыры. Это связано с тем, что параметры  $p'_{3i} \neq 0$ . Изолинии ядра особых точек даны на рис. 1, е-з. Наличие разрывов на изолиниях с  $j_k = 31$ ,  $j_k = 43$  подтверждает наличие дыр на поверхности ядра.

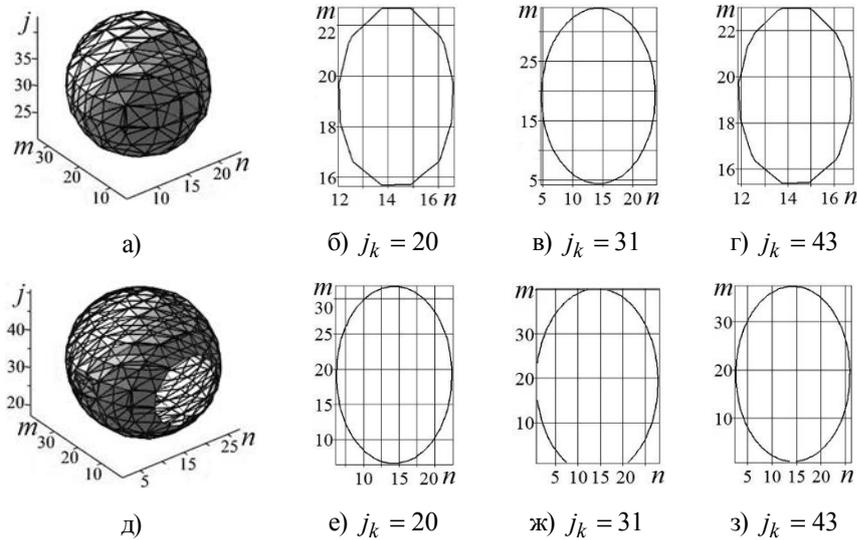


Рис. 1. Поверхности (а, д) и изолинии (б - г, е - з) ядер особых точек для связанных систем НЛ-ФОС с совпадающими центрами тяжести.

На рис. 2, а приведена поверхность ядра НЛ-ФОС с НЛ в виде ФКТ (типа мнимого ФЭП) с  $p'_{01} = -1.0123$ ,  $p'_{31} = -0.03375$  и ФОС в виде ФЭП с  $p'_{02} = 1.0123$ ,  $p'_{32} = 0.03375$ , при этом  $b_{1i} = b_{1i} = 1$ ,  $b_{3i} = 0$ ,  $p'_{1i} = p'_{2i} = 0$  ( $i=1,2$ ). Изолинии ядра особых точек даны на рис. 2, б-з. При изменении  $j \in (-60; -20)$  на поверхности ядра наблюдается эффект сужения с образованием области типа «шейки». В этой области имеется отдельный слой с  $j_k = -30$ , вблизи которого образуется цилиндрическая поверхность с образующими параллельными оси  $Oj$ .

Наличие угловых точек на ломаных изолиниях отражает фрактальную структуру ядра. Переход от слоя к слою в многослойной наносистеме сопровождается изменением структуры поверхности ядра особых точек, что отражается на поведении изолиний при изменении  $j_k$  (рис. 2, б-з).

Далее мы рассмотрим связанные системы НЛ-ФОС, у которых центры тяжести (параметры  $n_{0i}, m_{0i}, j_{0i}$ ) для НЛ и ФОС различны. Для этих структур (рис. 3) параметры  $n_{ci} = 7.4793$ ,  $m_{ci} = 11.7295$ ,  $j_{0i} = 31.5279$ ,  $j_{ci} = 11.8247$  ( $i=1,2$ ) выбраны одинаковыми.

На рис. 3 а приведена поверхность ядра НЛ-ФОС с НЛ в виде ФЭЦ с  $p'_{01} = 1.0123$ ,  $n_{01} = 14.3267$ ,  $m_{01} = 19.1471$  и ФОС в виде ФЭЦ с  $p'_{02} = 1.0123$ ,  $n_{02} = 19.1471$ ,  $m_{02} = 14.3267$ , где параметры  $b_{1i} = b_{1i} = 1$ ,  $b_{3i} = 0$ ,  $p'_{1i} = p'_{2i} = p'_{3i} = 0$  ( $i=1,2$ ).

Изолинии ядра особых точек (для поверхности из рис. 3, а) для всех значений имеют один и тот же вид (рис. 4, г). В области пересечения цилиндрических поверхностей образуются две «щели», положение которых позволяет определять расстояние между ними и направление в пространстве.

При изменении параметров  $p'_{31}$ ,  $p'_{32}$  цилиндрические поверхности из рис. 3 а переходят в параболические (рис. 3, б, в). Изолинии ядер особых точек для параболических поверхностей (рис. 3, б, в) приведены на рис. 4, 5.

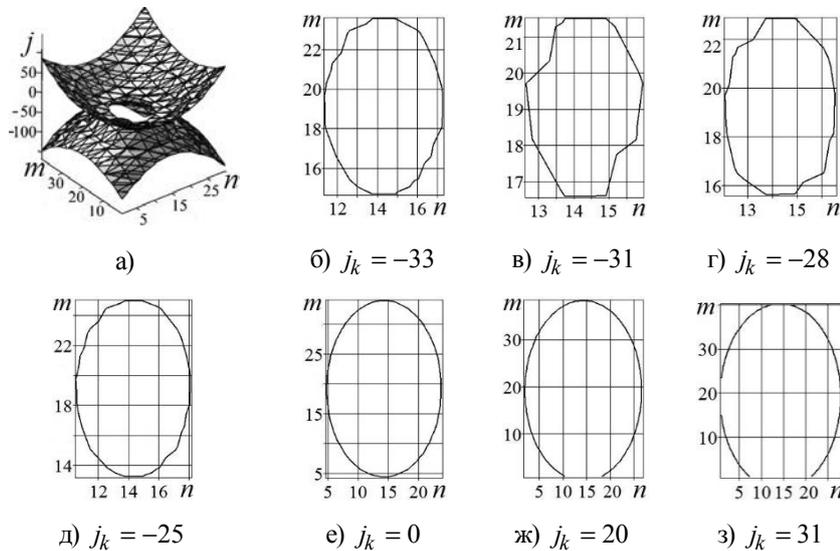


Рис. 2. Поверхность (а) и изолинии (б - з) ядра особых точек для связанной системы ФКТ-ФЭП с совпадающими центрами тяжести.

На рис. 3, б приведена поверхность ядра НЛ-ФОС с параметрами  $p'_{3i} \neq 0$  по сравнению с рис. 3, а для НЛ в виде ФЭП с  $p'_{31} = 0.03375$  и ФОС в виде ФЭП с  $p'_{32} = 0.03375$ . Все остальные параметры такие, как и для рис. 3, а.

Изолинии ядра особых точек (для поверхности из рис. 3, б) даны на рис. 4. При  $j_k = -25$  (рис. 4, а) наблюдается объединение отдельных ядер от ФЭП с различными центрами тяжести в единую двуждерную систему.

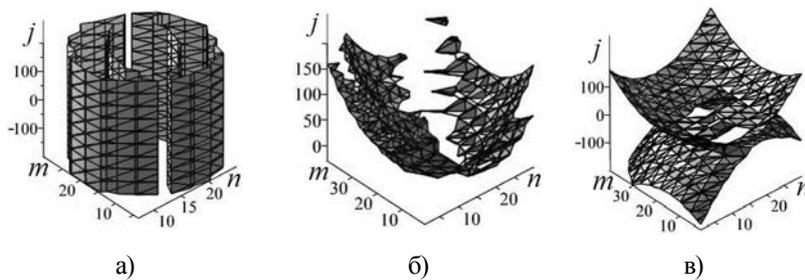


Рис. 3. Поверхности ядер особых точек для связанных систем с различными центрами тяжести.

Дальнейшее изменение  $j$  приводит к сложной трансформации изолиний: эффектам пересечения (рис. 4, б, е), появлению внутренних новых включений (рис. 4, в), образованию «щелей» (рис. 4, г, д, ж, з). На рис. 3, в приведена поверхность ядра НЛ-ФОС с НЛ в виде ФЭП с  $p'_{01} = 1.0123$ ,  $p'_{31} = 0.03375$ ,  $n_{01} = 14.3267$ ,  $m_{01} = 19.1471$  и ФОС в виде ФЭП с  $p'_{02} = 1.0123$ ,  $p'_{32} = -0.03375$ ,  $n_{02} = 19.1471$ ,  $m_{02} = 14.3267$ , где параметры  $b_{1i} = b_{1i} = 1$ ,  $b_{3i} = 0$ ,  $p'_{1i} = p'_{2i} = 0$  ( $i=1,2$ ).

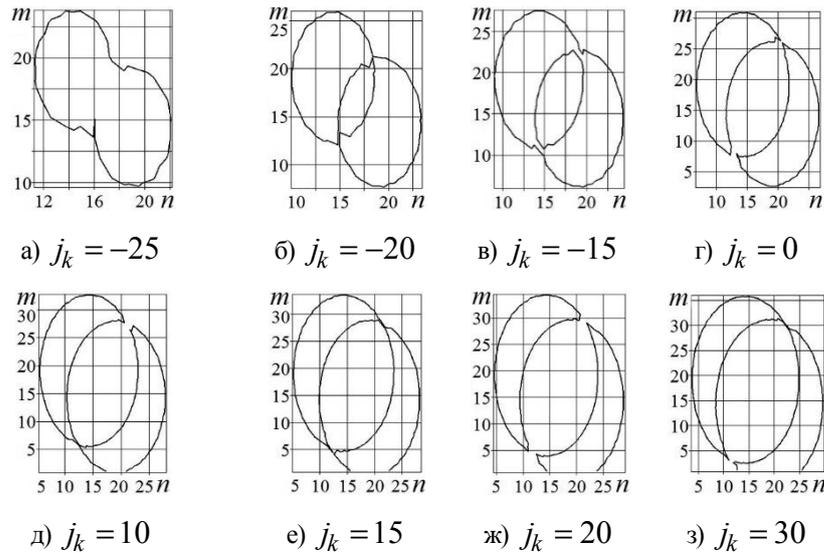


Рис. 4. Изолинии ядра особых точек для связанной системы из рис. 3 б.

Изолинии ядра особых точек (для поверхности из рис. 3, в) даны на рис. 5. Изменение знака параметра  $p'_{32} \neq 0$  ФОС из рис. 3, б приводит к существенной перестройке структуры поверхности ядра с образованием внутреннего «мостика» (рис. 3, в) между границами поверхности в области дыры из рис. 2, а.

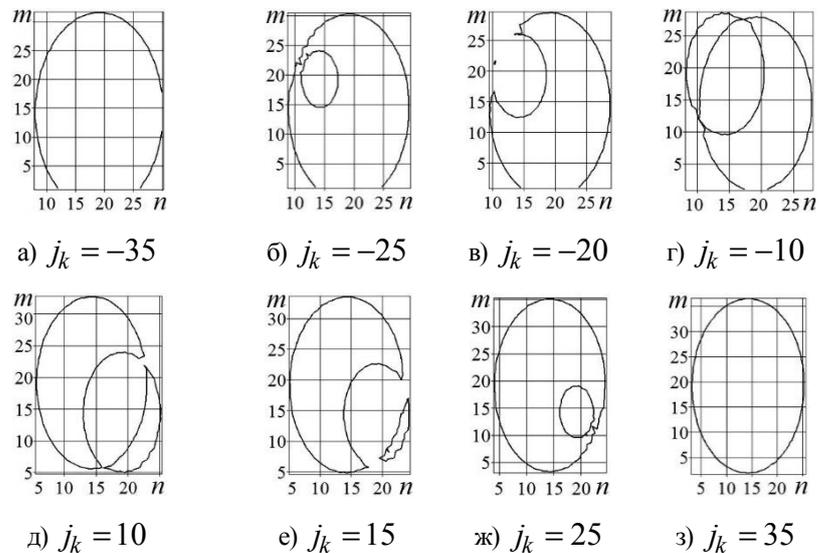


Рис. 5. Изолинии ядра особых точек для связанной системы из рис. 3 в.

Поведение изолиний при изменении  $j$  подтверждает появление внутренних включений, их перемещение от одной границы (рис. 5, б) к другой (рис. 5, ж), что связано с наличием «мостика» (рис. 3, в). Эффект перемещения внутренних включений можно использовать для определения расстояний между границами и направления движения в отдельных плоскостях  $nOm$  многослойной наносистемы.

**Поведение поля деформации фрактальных структур во фрактальной ловушке.** В качестве наноловушки (НЛ) выбрана расщепленная дислокация (РД) – фрактальная структура с параметрами  $p'_{01}=1.0123$ ;  $b_{11}=0$ ;  $b_{21}=1$ ;  $b_{31}=0$ ;

$p'_{11} = p'_{21} = p'_{31} = 0$ ,  $n_{01} = 89.1471$ ;  $n_{c1} = 19.4793$ ;  $m_{01} = 44.3267$ ;  $m_{c1} = 14.7295$  (рис. 6). Решение нелинейного уравнения (1) при  $R_1 = 1$ ,  $R_2 = 0$  выполнено методом итераций по переменной  $n$  при следующих фиксированных значениях:  $N_1 = 120$ ;  $N_2 = 90$ ;  $\alpha = 0.5$ ;  $u_0 = 29.537$ ;  $k = 0.5$ . Для каждой из двух ветвей расщепленной дислокации характерно стохастическое поведение смещения  $u$  вдоль осей дислокации (рис. 6, а). Координаты ядер дислокации на оси  $Om$  определяются по формулам

$$m = m_1 = m_{01} - m_0; \quad m = m_2 = m_{01} + m_0; \quad m_0 = (m_{c1}^2 \cdot p'_{01})^{1/2}. \quad (5)$$

Расчетные значения  $m_1 = 29.507$ ,  $m_2 = 59.147$  по формулам (5) согласуются с положениями пиков из рис. 6, б. Внутри области расщепленной дислокации для  $m \in (m_1, m_2)$  наблюдаются зоны с тонкой квазипериодической (вдоль оси  $On$ ) структурой и зона с практически постоянным отрицательным смещением  $u \approx -0.001$  (рис. 6, в). Практически регулярное изменение положительного смещения наблюдается вне указанной области дислокации  $m \in (m_1, m_2)$  со значением  $u \approx 0.003$  при граничных значениях  $m = 1$  и  $m = 90$ .

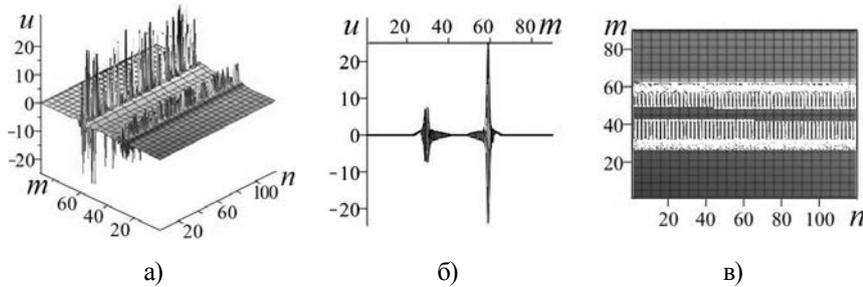


Рис. 6. Наноловушка: (а) – зависимость  $u$  от решеточных индексов  $n, m$ ; (б) – проекция  $u$  на плоскость  $mOu$ ; (в) – сечение  $u \in [-0.001; 1]$  (вид сверху).

Далее рассмотрим связанные системы НЛ-ФОС, для которых  $R_1 = 1$  и  $R_2 = 1$ , наноловушка выбрана в виде РД с параметрами (рис. 6).

**Система I:** ФОС выбрана в виде фрактального эллиптического цилиндра (ФЭЦ). Структура ФЭЦ описывается параметрами  $p'_{02} = 1.0123$ ;  $b_{12} = 1$ ;  $b_{22} = 1$ ;  $b_{32} = 0$ ;  $p'_{12} = p'_{22} = p'_{32} = 0$ ;  $n_{02} = 39.1471$ ;  $n_{c2} = 19.4793$ ;  $m_{02} = 44.3267$ ;  $m_{c2} = 14.7295$ .

**Система II:** ФОС выбрана в виде фрактальной квантовой точки (ФКТ). Структура ФКТ описывается теми же параметрами, что и ФЭЦ, но при  $p'_{02} = -3.457 \cdot 10^{-11}$ .

Фрактальные структуры ФЭЦ и ФКТ находятся внутри ловушки РД. Детальное поведение функции смещения  $u$  для связанных систем I, II приведено на рис. 7.

При изменении параметра  $n_{02}$  наблюдаются перемещения фрактальных структур ФЭЦ (рис. 7, а, б, в) и ФКТ (рис. 7, г, д, е) внутри ловушки вдоль оси  $n$ . Для многослойной наносистемы эти перемещения можно учесть изменением параметра  $n_{02}(j)$  от слоя к слою по формуле

$$n_{02}(j) = n'_{02} + a_{02}(j - j_{02}) / j_{c2}, \quad (6)$$

где параметры  $j_{02} = 31.5279$ ;  $j_{c2} = 11.8247$ ;  $n'_{02} = 165.5064$ ;  $a_{02} = 591.0165$ . Согласно (6) значение  $n_{02} = 39.1471$  соответствует слою с  $j = 29$ ,  $n_{02} = 89.1471$  – слою с  $j = 30$ , а

$n_{02} = 119.1471$  – положению фрактальной структуры между слоями с  $j = 30$  и  $j = 31$ . При этом наблюдаются существенные изменения структуры как внутри ловушки, так и самой ловушки.

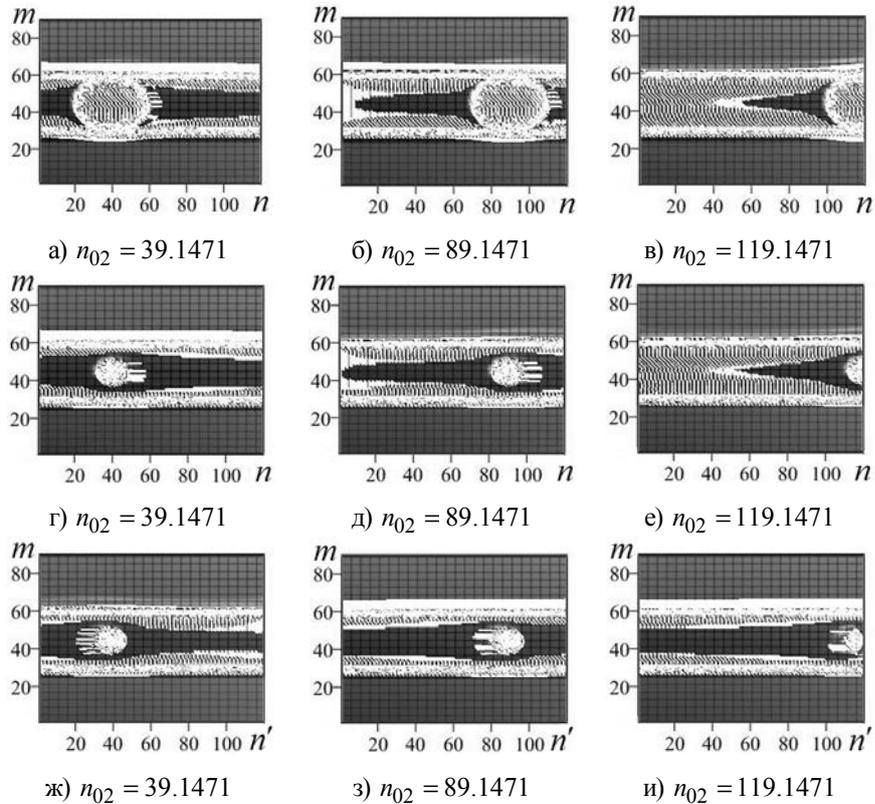


Рис. 7. Сечение функции  $u \in [-0.001; 1]$  (вид сверху). Прямой (а - е) и обратный (ж - и) итерационный процессы для связанных систем: (а - в) – РД-ФЭЦ; (г - и) – РД-ФКТ.

Если функции  $Q_1 = Q_1(n', m)$ ,  $Q_2 = Q_2(n', m)$  из (2) зависят от  $n'$ , где  $n' = N_1 - n + 1$ , то процесс итераций по переменной  $n'$  выполняется в обратном порядке. При этом поведение поля деформации ФКТ в ловушке (рис. 7, ж) существенно изменяется по сравнению с (рис. 7, г). «Хвосты» у квантовой точки переходят из положения справа относительно центра квантовой точки (рис. 7, г) в положение слева (рис. 7, ж). Также происходит изменение структуры РД. Изменение параметра  $n_{02}$  приводит к эффекту смещения ФКТ в ловушке (рис. 7, ж, з, и). Такое изменение параметра в отличие от (б) может быть связано с временной зависимостью типа  $n_{02}(t) = n'_{02} + g_{02}(t - t_{02})/t_{c2}$  в отдельном слое.

**Поле деформации двух квантовых точек во фрактальной ловушке.** Рассматривается связанная система III (НЛ-ФОС): наноловушка (РД) и ФОС в виде двух фрактальных квантовых точек ФКТ1 и ФКТ2.

Нелинейное уравнение для безразмерной функции смещения  $u$  узла решетки такой связанной системы на основании (1) задается в виде

$$u = R_1(1 - \alpha)(1 - 2sn^2(u - u_0, k)) / Q_1 + R_2(1 - \alpha)(1 - 2sn^2(u - u_0, k)) / Q_2 + R_3(1 - \alpha)(1 - 2sn^2(u - u_0, k)) / Q_3; \quad (7)$$

$$Q_3 = p_{03} - b_{13}(n' - n_{03})^2 / n_{c3}^2 - b_{23}(m - m_{03})^2 / m_{c3}^2 - b_{33}(j - j_{03})^2 / j_{c3}^2; \quad (8)$$

$$p_{03} = p'_{03} + p'_{13}n' + p'_{23}m + p'_{33}j, \quad n' = N_1 - n + 1. \quad (9)$$

В выражении (7) для смещения  $u$  первое слагаемое характеризует наноловушку в виде РД с параметрами как и для (рис. 6), а второе и третье – ФОС в виде двух фрактальных квантовых точек ФКТ1 и ФКТ2. При этом параметры  $R_1 = R_2 = R_3 = 1$ .

Фрактальные квантовые точки ФКТ1 ( $i=2$ ) и ФКТ2 ( $i=3$ ) описываются одинаковыми параметрами:  $p'_{0i} = -3.457 \cdot 10^{-11}$ ;  $b_{1i} = b_{2i} = 1$ ;  $b_{3i} = 0$ ;  $p'_{1i} = p'_{2i} = p'_{3i} = 0$ ;  $n_{ci} = 19.4793$ ;  $m_{0i} = 44.3267$ ;  $m_{ci} = 14.7295$ . Однако, параметр  $n_{02}$  является переменным для ФКТ1, а для ФКТ2 параметр  $n_{03} = 60.6529$  является постоянным. Фрактальная квантовая точка ФКТ2 является неподвижной, а ФКТ1 перемещается внутри наноловушки за счет изменения параметра  $n_{02}$  (рис. 8).

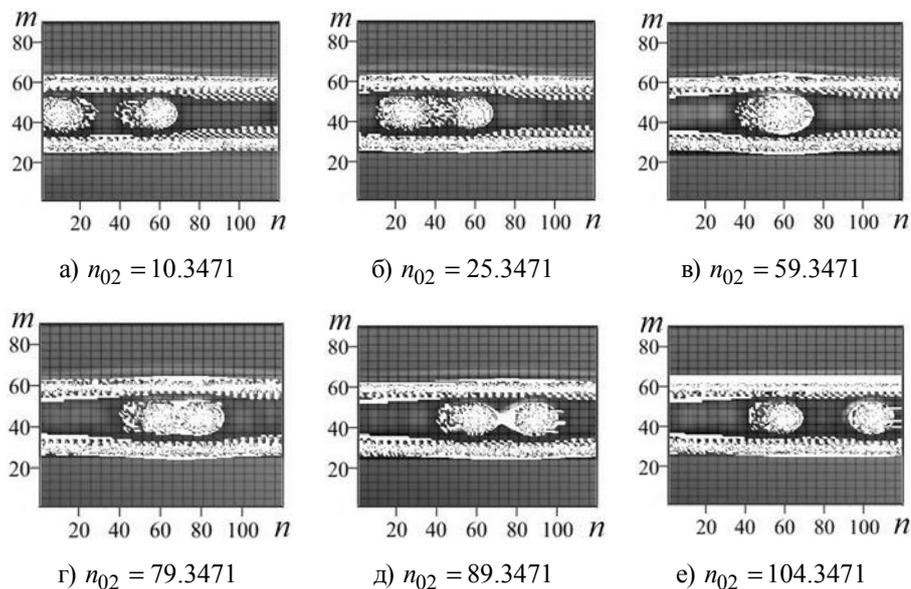


Рис. 8. Две квантовые точки. Перемещение первой квантовой точки. Сечение функции  $u \in [-0.001; 1]$  (вид сверху).

Анализ этих результатов показывает, что прямой (для ФКТ1) и обратный (для ФКТ2) итерационные процессы для двух квантовых точек в наноловушке влияют друг на друга. Когда ФКТ1 находится на значительном расстоянии от ФКТ2 (рис. 8, а, д) взаимовлияние практически отсутствует. При сближении квантовых точек их «хвосты» перекрываются, и наблюдается ярко выраженное стохастическое поведение между ними (рис. 8, б, г). Когда параметр  $n_{02}$  находится в окрестности  $n_{03}$  ядра квантовых точек перекрываются, а амплитуды смещений  $u$  резко возрастают (рис. 8, в). Когда  $n_{02}$  становится больше чем  $n_{03}$ , область перекрытия ядер квантовых точек уменьшается и, между ними образуется сужение (рис. 8, д).

При изменении параметра  $n_{02}$  в связанной системе с двумя квантовыми точками также наблюдается отличие структуры самой РД по сравнению с рис. 7, г-и, где рассматривается вариант связанной системы с одной квантовой точкой.

**Выводы.** Показано, что в многослойной наносистеме возможно образование связанных систем: НЛ-ФОС. Это подтверждается исследованием аттракторов – особых точек поля деформации связанных систем. Ядро особых точек расположено на поверхностях. Анализ изолиний ядра особых точек показывает, что поведение связанных систем с одинаковыми и различными центрами тяжести существенно различается. Наблюдается изменение структуры изолиний с гладкой на гексагональную; образование дыр, щелей, мостиков между внутренними границами поверхностей. Эти особенности структуры связанных систем дают возможность определения характерных расстояний и направлений в многослойной наносистеме (возможность навигации).

Поведение поля деформации для связанных систем I – III существенно отличается от поведения поля деформации как отдельной ловушки (РД), так и фрактальных структур (ФЭЦ, ФКТ, ФКТ1, ФКТ2). Это объясняется влиянием стохастических процессов друг на друга в результате решения нелинейных уравнений методом итераций для связанных систем. Наблюдаются эффекты смещения фрактальных структур внутри ловушки при изменении параметра фрактальной структуры  $n_{02}$  от слоя к слою или в отдельном слое во времени. При этом существенно изменяется тонкая квазипериодическая структура внутри ловушки, дополнительно появляется тонкая структура вне ловушки.

Прямой и обратный итерационные процессы для двух квантовых точек в наноловушке также влияют друг на друга. При сближении квантовых точек их «хвосты» перекрываются, и наблюдается ярко выраженное стохастическое поведение между ними. Когда ядра квантовых точек перекрываются, то амплитуды смещений  $u$  резко возрастают.

Полученные результаты также можно использовать при моделировании структуры полей деформации и напряжения, аттракторов различных фрактальных объектов (галактики, звезды, черные дыры) трехмерной Вселенной.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Spatial representation in the entorhinal cortex / M. Fyhn, S. Molden, M.P. Witter et al. // Science. – 2004. – Vol. 305. – P. 1258-1264.
2. Microstructure of spatial map in the entorhinal cortex / T. Hafting, M. Fyhn, S. Molden et al. // Nature. – 2005. – Vol. 436. – P. 801-806.
3. Conjunctive representation of position, direction, and velocity in the entorhinal cortex / F. Sargolini, M. Fyhn, T. Hafting et al. // Science. – 2006. – Vol. 312. – P. 758-762.
4. Heyman K. The Map in the Brain: Grid Cells May Help Us Navigate / K. Heyman // Science. – 2006. – Vol. 312. – P. 680-681.
5. Abramov V.S. Transient Processes in a Model Multilayer Nanosystem with Nonlinear Fractal Oscillator / V.S. Abramov // CMSIM Journal. – 2015. – N 1. – P. 3-15.
6. Abramov V.S. Model of Nonlinear Fractal Oscillator in Nanosystem / V.S. Abramov // In book Applied Non-Linear Dynamical Systems, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics. – 2014. – Vol. 93. – P. 337-350.
7. Abramova O.P. Fractal nanotraps based on quasi-two-dimensional fractal structures / O.P. Abramova, S.V. Abramov // In book Dynamical Systems Theory. – Poland, Lodz. 2013. – P. 71-80.
8. Абрамова О.П. Комплексное поле деформации фрактального эллиптического параболоида в многослойной наносистеме с переменными параметрами / О.П. Абрамова, С.В. Абрамов // Вестник Донецк. нац. ун-та. Сер. А: Естеств. науки. – 2014. – Вып. 2. – С. 32-40.
9. Abramova O.P. Coupled Fractal Nanosystem: Trap – Quasi-two-dimensional Structure / O.P. Abramova, S.V. Abramov // Nonlinear Dynamics and Systems Theory. – 2015. – Vol. 15. – N 1. – P. 4-13.
10. Skiadas C.H. Chaotic Modeling and Simulation: Analysis of Chaotic Models, Attractors and Forms / C.H. Skiadas, C. Skiadas. – Taylor and Francis/CRC, London, 2009. – 367 p.
11. Sculpting oscillators with light within a nonlinear quantum fluid / G. Tosi, G. Christmann, N.G. Berloff et al. // Nature physics. – 2012. – Vol. 8. N 3. – P. 190-194.

*Поступила в редакцию 12.04.2016 г.*

**FRactal Bulk Structures and Attractors  
in Multilayer Nanosystem**

*O.P. Abramova*

The behavior of the deformation field of coupled multilayer nanosystems: fractal nanotrap – fractal bulk structure is investigated. It is shown that when crossing the surface of the coupled structure critical planes formed a line of singular points (attractors) of the deformation field. Analysis of the isolines of singular points core shows that the behavior of coupled systems with the same or different centers of gravity varies considerably. It is shown that the deformation field of coupled structures is determined by mutual influence of stochastic processes on each other. Such effect as the displacements of fractal structures, the transformation of a thin quasiperiodic structure inside the trap, the appearance of an extra thin structure outside the trap are possible when changing the parameters.

**Keywords:** fractal bulk structure; fractal nanotraps; coupled systems; attractors; deformation field; multilayer nanosystem.

**Абрамова Ольга Петровна**

кандидат физико-математических наук, доцент  
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк  
ул. Университетская 24, Донецк, 83001  
oabramova@ua.fm

**Abramova Olga Petrovna**

Candidate of Physics and Mathematical Sciences, Docent  
Donetsk National University,  
24 University st., Donetsk, 83001

УДК 621.375.4

## ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ИСКАЖЕНИЙ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО НАСЫЩЕННОГО УСИЛИТЕЛЯ КЛАССА F<sub>3</sub>

© 2016. А.П. Ефимович

В работе впервые проведено экспериментальное исследование влияния амплитуды входного напряжения на коэффициент гармоник, стоковый КПД и выходную мощность насыщенного усилителя мощности класса F<sub>3</sub> с рабочей частотой 13,56 МГц, выполненного на транзисторе 2N7000. Предложены рекомендации по снижению коэффициента гармоник усилителя.

*Ключевые слова:* коэффициент гармоник, насыщенный усилитель, класс F<sub>3</sub>, стоковый КПД, выходная мощность.

**Введение.** В настоящее время для усилителя мощности (УМ) класса F существует довольно много вариантов названий и реализаций, применяемых как в высокочастотном диапазоне (ВЧ), так и сверхвысокочастотном (СВЧ) диапазоне [1]. Одним из наиболее не исследованных усилителей данного класса является насыщенный УМ класса F<sub>3</sub> с добавлением третьей гармоники напряжения [2–4]. Отличительной особенностью данного УМ является работа транзистора как генератора тока, управляемого не только напряжением затвор-исток, но и напряжением сток-исток. В этом случае на динамической нагрузочной характеристике транзистора есть участок, где рабочая точка заходит в область насыщения транзистора [4], что может служить причиной возрастания нелинейных искажений в усилителе. Для количественной оценки нелинейных искажений в усилителе обычно используют коэффициент гармоник ( $K_G$ ) выходного напряжения или тока [5]. В современной литературе отсутствуют какие либо сведения о величине коэффициента  $K_G$  и его зависимости от амплитуды гармонического напряжения на входе насыщенного УМ класса F<sub>3</sub>. В данном случае экспериментальные исследования целесообразно проводить для высокочастотного усилителя, поскольку в ВЧ диапазоне частот есть возможность измерить амплитуды напряжений как на входе усилителя, так и в узлах его нагрузочной цепи. Это значительно расширит анализ работы усилителя.

Цель работы – экспериментальное исследование коэффициента гармоник и энергетических характеристик насыщенного УМ класса F<sub>3</sub>.

**Усилитель мощности класса F<sub>3</sub>.** Для экспериментального исследования влияния величины амплитуды гармонического напряжения затвор-исток на коэффициент  $K_G$  и энергетические характеристики усилителя была взята за основу схема экспериментального макета усилителя (рис. 1) приведенная в [4].

В схеме (рис. 1) резисторы  $R_1...R_3$  образуют делитель напряжений, обеспечивающий требуемое напряжение смещения на затворе транзистора. Конденсаторы  $C_1, C_6$  – разделительные,  $C_2, C_3$  – обеспечивают фильтрацию помех в цепи питания,  $L_1$  – дроссель. Значения элементов секции 1 нагрузочной цепи (рис. 1) вычисляются по формулам (1) [6].

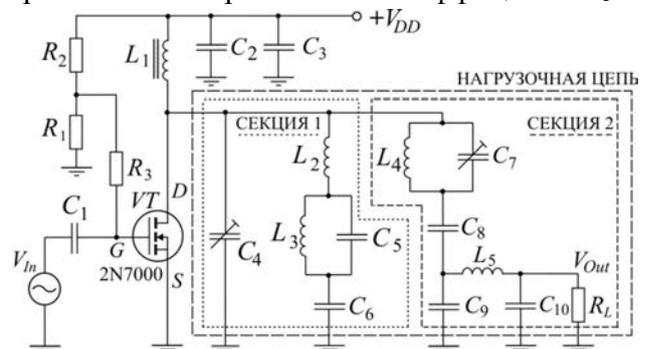


Рис. 1. Схема экспериментального макета УМ класса F<sub>3</sub>

$$L_2 = 1/6\omega_0^2 C, \quad L_3 = 5/3L_2, \quad C_5 = 12/5C, \quad (1)$$

где  $C = C_{out} + C_4$ ,  $C_{out}$  – выходная емкость транзистора,  $\omega_0 = 2\pi f_0$ ,  $f_0$  – рабочая частота. Данная секция обеспечивает на стоке транзистора на третьей гармонике нагрузочный импеданс на много больше нагрузочного импеданса на первой гармонике ( $Z(3f_0) \gg Z(f_0)$ ), поскольку она представляет собой параллельный контур. Обычно, как было показано в [7–8], для высокоэффективной работы усилителя достаточно выполнения условия  $|Z(3f_0)| = (3-5)|Z(f_0)|$ , где импеданс  $Z(f_0)$  равен активному нагрузочному сопротивлению  $R$ . На второй гармонике секция 1 создает на стоке транзистора нагрузочный импеданс  $Z(2f_0) = 0$ , поскольку в этом случае она представляет собой последовательный контур. Учитывая, что величина  $C_{out}$  зависит от напряжения питания ( $V_{DD}$ ), был использован подстроечный конденсатор  $C_4$ , с помощью которого можно настроить секцию 1. В секции 2 (рис. 1)  $L_4 C_4$  – контур, настроенный на третью гармонику. Величина  $C_5$  должна быть такой, чтобы на  $f_0$  элементы  $L_4$  и  $C_4$  совместно с  $C_5$  образовывали последовательный контур. Значение  $C_8$  рассчитывается с помощью известной [4] формулы (2)

$$C_8 = (1 - \omega_0^2 L_4 C_7) / \omega_0^2 L_4. \quad (2)$$

Таким образом, на  $f_0$  транзистор нагружен на нагрузочный импеданс  $Z(f_0) = R$ , который трансформируется в сопротивление нагрузки ( $R_L$ ) с помощью П-контра, образованного элементами  $C_6$ ,  $C_7$  и  $L_6$ . В данной работе нагрузочная цепь рассчитывалась для усилителя с рабочей частотой  $f_0 = 13,56$  МГц. Расчетные значения элементов усилителя (рис. 1) приведены в таблице.

Таблица

Номиналы элементов схемы исследуемого УМ класса F<sub>3</sub>

Элемент	Номинал	Элемент	Номинал	Элемент	Номинал
$C_{out}$	25 пФ	$C_7$	38,3 пФ	$L_4$	400 нГн
$C_1$	10 нФ	$C_8$	306,1 пФ	$L_5$	590 нГн
$C_2$	100 пФ	$C_9$	339 пФ	$R_1$	3,15 кОм
$C_3$	10 мкФ	$C_{10}$	622,3 пФ	$R_2$	39 кОм
$C_4$	25 пФ	$L_1$	150 мкГн	$R_3$	0,42 кОм
$C_5$	120 пФ	$L_2$	460 нГн	$R_L$	50 Ом
$C_6$	10 нФ	$L_3$	765 нГн	$VT$	2N7000

**Экспериментальное исследование насыщенного УМ класса F<sub>3</sub>.** В исследуемом усилителе было установлено напряжение питания  $V_{DD} = 25$  В. Делитель напряжений, состоящий из резисторов  $R_1 \dots R_3$ , обеспечивал напряжение смещения на затворе транзистора 1,86 В, что соответствовало углу отсечки  $\theta_C = 90^\circ$ . На вход усилителя подавалось напряжение  $V_{in}$ , изменяющееся по гармоническому закону. Измеренные значения нагрузочных импедансов, создаваемых нагрузочной цепью на стоке транзистора были

равны:  $Z(f_0)=180,4+j3,0$  Ом,  $Z(2f_0)=2,5+j6,0$  Ом,  $Z(3f_0)=1502+j20,0$  Ом. Нагрузочные импедансы, полученные экспериментально на первой и второй гармониках, близки к теоретическим, где  $Z(f_0)$  должен быть чисто активным, а  $Z(2f_0)$  должен быть равен нулю [9]. На третьей гармонике импеданс  $Z(3f_0)$  хоть и не стремится к бесконечности, как этого требует теория [9], однако  $|Z(3f_0)|$  значительно превосходит  $|Z(f_0)|$ , как было показано в [7-8], достаточно для высокоэффективной работы усилителя. Годограф нагрузочных импедансов, измеренный с помощью векторного анализатора цепей Agilent FieldFox N9923A, показан на рис. 2. Экспериментальный макет исследуемого УМ класса F<sub>3</sub> показан на рис. 3

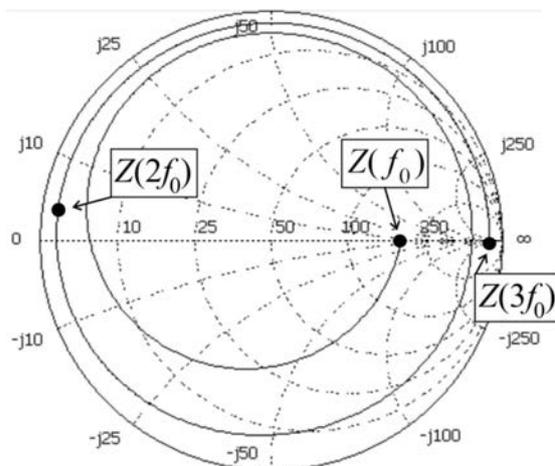


Рис. 2. Годограф нагрузочных импедансов ВЧ УМ класса F<sub>3</sub>

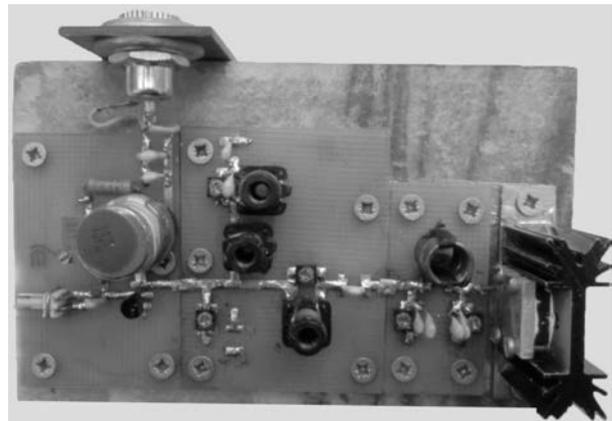


Рис. 3. Экспериментальный макет исследуемого ВЧ УМ класса F<sub>3</sub>

Для исследования величины гармонических искажений в насыщенном УМ класса F<sub>3</sub> были найдены амплитуды первой и высших гармоник выходного напряжения ( $V_{Out}$ ) в зависимости от амплитуды гармонического напряжения, подаваемого на вход усилителя. Значения амплитуд гармоник находились путем разложения напряжения  $V_{Out}$  в ряд Фурье. После чего вычислялся коэффициент гармоник с помощью [5]

$$K_G = \sqrt{\frac{V_{2m}^2 + V_{3m}^2 + \dots + V_{nm}^2}{V_{1m}^2}}, \quad (3)$$

где  $V_{nm}$  – амплитуда  $n$ -той гармоники напряжения  $V_{Out}$  на выходе усилителя (на сопротивлении  $R_L$ ). При расчетах коэффициента  $K_G$  использовалось 10 гармоник напряжения. Использование большего числа гармоник при расчете  $K_G$  является нецелесообразным и малоинформативным, поскольку все гармоники с номером  $n > 10$  практически не оказывают никакого влияния на  $K_G$ . Зависимость  $K_G$  от величины отношения  $V'_{GSm}/V_{GSm}$  амплитуды напряжения затвор-исток насыщенного УМ класса F<sub>3</sub>, к амплитуде напряжения затвор-исток не насыщенного УМ класса F<sub>3</sub> приведена на рис. 4. В данной работе для не насыщенного УМ  $V_{GSm} = 1,72$  В соответствует критическому режиму работы усилителя, где при  $\theta_C = 90^\circ$  не может быть получен высокий стоковый КПД ( $\eta_D$ ) и выходная мощность ( $P_{Out}$ ). Высокие значения  $\eta_D$  и  $P_{Out}$  УМ класса F<sub>3</sub>

при  $\theta_C = 90^\circ$  могут быть достигнуты только в насыщенном режиме работы усилителя [2–4]. Поэтому отношение  $V'_{GSm}/V_{GSm} = 1$  соответствует границе между критическим и насыщенным режимом, что в данной работе не рассматривалось.

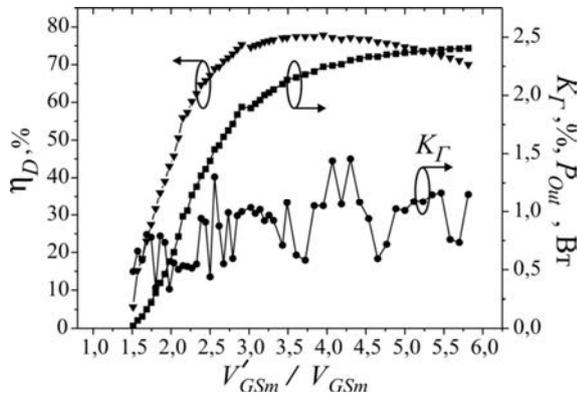


Рис. 4. Зависимость  $\eta_D$ ,  $P_{OUT}$  и  $K_G$  от величины  $V'_{GSm}/V_{GSm}$

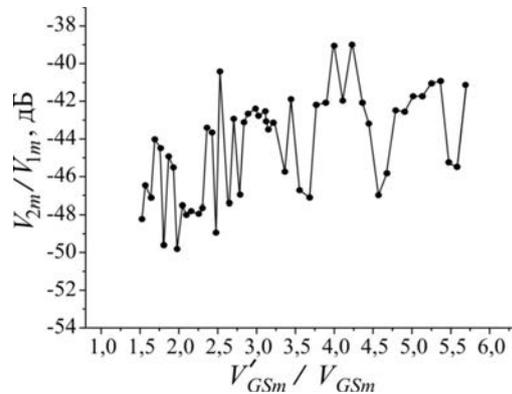


Рис. 5. Зависимость  $V_{2m}/V_{1m}$  от величины  $V'_{GSm}/V_{GSm}$

В диапазоне значений  $V'_{GSm}/V_{GSm} = 1,5 \dots 3$  (рис. 4) несмотря на существование участков, где значение  $K_G$  колеблется в пределах  $\pm 0,3\%$ , наблюдалась общая тенденция к увеличению  $K_G$ . Это может быть объяснено заходом динамической нагрузочной характеристики транзистора в нелинейную область его статических характеристик, соответствующих режиму насыщения. При дальнейшем увеличении  $V'_{GSm}/V_{GSm}$  значение  $K_G$  колеблется в пределах  $\pm 0,4\%$  без проявлений общей тенденций к возрастанию. На рис. 4 также приведены зависимости  $\eta_D$  и  $P_{OUT}$  от величины отношения  $V'_{GSm}/V_{GSm}$ . Когда  $V'_{GSm}/V_{GSm} = 3,95$  достигалось максимальное значение  $\eta_D = 78\%$  при  $P_{OUT} = 2,3$  Вт (рис. 4). Коэффициент гармоник при этом был равен  $K_G = 1,05\%$ , что примерно соответствует уровню ослабления высших гармоник напряжения на выходе усилителя относительно первой гармоники на -40 дБ.

Чтобы определить, какая из высших гармоник напряжения на выходе усилителя дает наибольший вклад в значение  $K_G$ , были рассчитаны величины отношений амплитуд  $V_{(2-10)m}/V_{1m}$  высших гармоник к первой гармонике. После обработки результатов расчета было установлено, что основной вклад в значение  $K_G$  дает амплитуда  $V_{2m}$  второй гармоники напряжения. В этом можно убедиться, сравнив зависимость  $K_G$  (рис. 4) с зависимостью отношения  $V_{2m}/V_{1m}$  от величины  $V'_{GSm}/V_{GSm}$  (рис. 5). Сравнение указанных зависимостей позволяет сделать важный вывод, что для уменьшения коэффициента гармоник  $K_G$  необходимо как можно большее ослабление второй гармоники напряжения. Это может быть достигнуто как повышением нагрузочной добротности согласующего П-контура, образованного элементами  $C_6$ ,  $C_7$  и  $L_6$  (рис. 1), так и включением в нагрузочную цепь дополнительных фильтров, ослабляющих вторую гармонику напряжения.

**Выводы.** Изготовлен УМ класса  $F_3$  на полевом транзисторе 2N7000, работающий в режиме насыщения на частоте 13,56 МГц. Экспериментально установлено, что при  $V'_{GSm}/V_{GSm} = 3,95$  стоковый КПД усилителя максимален и равен 78% при выходной

мощности 2,3 Вт и коэффициенте гармоник  $K_G = 1,05\%$ . Показано, что основной вклад в значение  $K_G$ , дает амплитуда второй гармоники напряжения. Данная закономерность может служить рекомендацией к снижению  $K_G$  при проектировании нагрузочной цепи усилителя.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kazimierzczuk M.K. RF Power Amplifiers / M.K. Kazimierzczuk. – USA.: Wiley, 2008. – 403 p.
2. Behaviors of class-F and class-F<sup>-1</sup> amplifiers / J. Moon, S. Jee, Jungjoon Kim, et al. // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2012. – Vol. 60, No. 6. – P. 1937-1951.
3. Highly efficient saturated power amplifier / J. Moon, J. Lee, R. Pengel-ly, et al. / IEEE Microwave Magazine. – 2012. – Vol. 13, No. 1. – P. 125-131.
4. Yefimovich A.P. Investigation into energy characteristics of saturated class-F amplifier / A.P. Yefimovich, V.G. Kryzhanovskii // Telecommunications and Radio Engineering. – 2015. – Vol. 74, Issue 8. – P. 709-723.
5. Лачин В.И. Электроника: учебное пособие для высших учебных технических заведений / В.И. Лачин, Н.С. Савелов. – Изд. 6-е, перераб. и доп. – Ростов н/Д : Феникс, 2007. – 703 с.
6. Grebennikov A.V. Circuit design technique for high efficiency class F amplifiers / A.V. Grebennikov // Proc. of IEEE MTT-S Int. Microwave Symp. Digest. – 2000. – Vol. 2. – P. 771-774.
7. Load-Pull Characterization technique accounting for harmonic tuning / V. Vadala, A. Raffo, S. Falco, et al. // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2013. – Vol. 61, No. 7. – P. 2695-2704.
8. Ефимович А. П. Компенсация паразитных элементов транзистора с настройкой импедансов на гармониках в усилителе класса F / А.П. Ефимович, В.Г. Крыжановский // Технология и конструирование в электронной аппаратуре (ТКЭА). – 2014. – № 1.– С. 3-10.
9. Raab F.H. Maximum efficiency and output of class-F power amplifiers / F.H. Raab // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2001. – Vol. 49, No 6. – P. 1162-1166.

*Поступила в редакцию 21.04.2016 г.*

#### INVESTIGATION NONLINEAR DISTORTION OF THE HIGH FREQUENCY SATURATED CLASS-F<sub>3</sub> AMPLIFIER

**A.P. Yefymovych**

In this paper the first time an experimental investigation of the influence of the input voltage amplitude on the harmonic distortion, drain efficiency and output power of saturated Class-F<sub>3</sub> power amplifier with an operating frequency of 13.56 MHz, performed on the transistor 2N7000. The proposed recommendations to reduce the coefficient harmonic distortion of amplifier.

**Keywords:** coefficient harmonic, saturated amplifier, class-F<sub>3</sub>, drain efficiency, output power.

**Ефимович Андрей Павлович**

ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк  
физико-технический факультет,  
ассистент кафедры радиофизики  
yefymovych@gmail.com ,  
+38(099)-321-64-93.

**Yefymovych Andrii Pavlovich**

Donetsk National University, Donetsk  
Lecturer at the Department of Radio Physics

УДК 536: 539.312: 621.7

**НЕРАВНОВЕСНАЯ ЭВОЛЮЦИОННАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ВАКАНСИЙ И МЕЖУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ. ТЕОРИЯ ПЛАВЛЕНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

© 2016. Л.С. Метлов

В статье классическая задача плавления твердых тел представлена с позиций неравновесной эволюционной термодинамики. Анализируется роль вакансий и межузельных атомов в плавлении твердых тел, рассмотрены различные приближения по плотности вакансий.

*Ключевые слова:* Фазовые переходы, энтропия, плавление, вакансии, межузельные атомы.

**Введение.** Существуют несколько подходов к описанию процесса плавления твердых тел, основанных на различных основных предположениях. Одни из них стартуют с точки зрения, что идеальная кристаллическая структура теряет свою стабильность вследствие одних или других условий. Простейшим из них является критерий Линдемана, который определяет точку плавления по амплитуде тепловых колебаний. А именно, когда амплитуда достигает порядка 10 % межатомного расстояния, кристаллическая решетка теряет устойчивость и разрушается (плавится) [1, 2]. Несколько более высокое значение критическое значение амплитуды порядка 30 % достигается в случае 2D систем [3, 4]. Этот подход, однако, не обладает универсальностью и для разных кристаллов с типами решетки объемно-центрированной кубической (ОЦК), гранецентрированной кубической (ГЦК) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ), константа Линдемана разная. Кроме того, теория Линдемана является однофазной и не определяет свободную энергию для жидкого состояния [5].

Второй подход основан на механическом критерии устойчивости Борна, твердое тело плавится, когда статический сдвиговый модуль обращается в нуль или очень мал [6–10]. Однако модель Борна также является однофазной теорией, которая не содержит непосредственного описания жидкой фазы и таким образом оказывается непригодной для учета разрывного характера, то есть первого рода, перехода при плавлении. Известно интересное обоснование полезности однофазного подхода для определения термодинамических характеристик в точке фазового перехода с позиций потери устойчивости [11, 12]. Локальное приближение Орнштейна–Цернике позволяет естественным образом учесть структуру вещества, но вопрос об учете этим способом нарушения структуры, очевидно, является достаточно сложным.

В то же время в большинстве работ однофазный подход считается недостаточным и одновременный учет характеристик обеих фаз в точке перехода настоятельно необходимым. Большую роль в фазовых переходах играют тепловые (гомофазные) и структурные (гетерофазные) флуктуации [13]. Гомофазные флуктуации протекают без изменения локальной симметрии относительно материнской фазы (неравновесные фононы), и они могут разрастаться при приближении к точке фазового перехода. Гетерофазные флуктуации, наоборот, сопровождаются изменением симметрии, формируя зародыши новой фазы. И здесь важны предпереходные эффекты в фазовых переходах кристалл-жидкость, когда возникают жидкоподобные флуктуации в кристаллах или твердоподобные кластеры в жидкостях [13–15].

Особый подход, ведущий начало с работ Френкеля и Эйринга, основывается на переходах порядок-беспорядок с участием вакансий [14, 15] или дислокаций [16].

В отличие от предыдущих эта теория является двухфазной. Однако в классическом варианте этой теории в работах Френкеля не учитывался скачкообразный характер перехода между твердым и жидким состоянием. Позже появились работы, учитывающие это обстоятельство, например, [17], в которой принимается во внимание взаимодействие между вакансиями, а также в модель введена вариация свободной энергии относительно концентрации вакансий.

Ранее для описания процессов фрагментации твердых тел (металлов) в процессе интенсивного внешнего нагружения был предложен метод неравновесной эволюционной термодинамики [18–22]. Он, по сути, является модификацией метода Ландау, и представляет собой сверхдемпированную и детерминистическую динамику плотностей дефектов (дислокаций и границ зерен), как некоторых несохраняющихся и однородных параметров порядка [22]. В работе [21] этот подход в замкнутом и последовательном виде был продемонстрирован на примере твердых тел с вакансиями. В качестве побочного результата такого рассмотрения было получено новое решение в области концентрации вакансий порядка 10 %. Это решение в соответствии с идеей Френкеля [14] предлагалось трактовать как жидкое состояние, а переход от низкой концентрации к высокой, как процесс плавления.

**Функция распределения вероятностей.** Больцманом для твердого тела с вакансиями было получены выражения для термодинамической вероятности  $W_V$  и конфигурационной энтропии  $S_{cV}$  в предположении максимального вырождения по микросостояниям

$$W_V = \frac{(N + n_V)!}{N!n_V!}, \quad (1)$$

$$S_{cV} = k_B \ln W_V, \quad (2)$$

где  $N$  – общее количество атомов в кристалле,  $n_V$  – количество вакансий,  $k_B$  – постоянная Больцмана. Отметим, что конфигурационная энтропия  $W_V$  является однозначной функцией числа вакансий и не зависит от их энергии (а также от температуры).

Таким же способом в предположении максимального вырождения по микросостояниям можно записать выражение для термодинамической вероятности  $W_i$  и конфигурационной энтропии  $S_{ci}$  для межузельных атомов

$$W_i = \frac{(N_i + n_i)!}{N_i!n_i!}, \quad (3)$$

$$S_{ci} = k_B \ln W_i, \quad (4)$$

где  $N_i$  – общее количество равновесных позиций для межузельных атомов в кристалле (локальных минимумов потенциальной энергии),  $n_i$  – количество межузельных атомов. Для разной симметрии кристаллов число таких позиций может быть разным и кратным  $N$ . Отметим, что конфигурационная энтропия  $W_i$  также является однозначной функцией числа межузельных атомов и также не зависит от энергии межузельных атомов и температуры. Если считать, что микросостояния по вакансиям и межузельным атомам статистически независимы, то общая термодинамическая вероятность  $W$  микросостояния будет равна произведению

$$W = W_V \cdot W_i, \quad (5)$$

а общая конфигурационная энтропия  $S_c$  – сумме энтропий по подсистемам

$$S_c = S_{cV} + S_{ci}, \quad (6)$$

так, что конфигурационная свободная энергия будет равна

$$F_c = U - T S_c, \quad (7)$$

где  $U$  – внутренняя энергия системы,  $T$  – температура

Общая вероятность состояния, содержащего  $n_V$  вакансий и  $n_i$  межузельных атомов, будет содержать ограничивающий экспоненциальный множитель, вероятность Гиббса для данного микроскопического состояния

$$f(n_V, n_i) = \frac{W}{Z} \exp\left(-\frac{U(n_V, n_i)}{k_B T}\right), \quad (8)$$

где  $Z$  – нормирующая статистическая сумма,  $U(n_V, n_i)$  – внутренняя энергия с учетом существования вакансий и межузельных атомов. В условиях тотального вырождения внутренняя энергия является линейной функцией концентрации дефектов

$$U = U_0 + u_{V0} n_V + u_{i0} n_i, \quad (9)$$

где  $U_0$  – внутренняя энергия без учета вклада дефектов,  $u_{V0}$ ,  $u_{i0}$  – энергии вакансии и межузельного атома, которые в данном случае являются постоянными величинами для всех возможных конфигураций атомов системы.

Условие тотального вырождения выполняется практически точно для низкой концентрации (числа) вакансий и межузельных атомов, когда взаимодействием между дефектами можно пренебречь. В то же время, это условие не выполняется для тех конфигураций, для которых вакансии расположены близко друг к другу или вообще сливаются (бивакансии, тривакансии, вакансионные поры) и при высокой концентрации вакансий. То же самое относится и к межузельным атомам. В этих случаях необходимо учитывать снятие условия тотального вырождения за счет взаимодействия дефектов. Как известно связывающее взаимодействие приводит к снижению общей энергии системы, что снижает эффект действия ограничивающего экспоненциального множителя и к возможности появления долгоживущих конфигураций, которые, таким образом, могут конкурировать с более многочисленными конфигурациями с более высокой энергией.

Функция распределения вероятностей (ФРВ), как вероятность реализации макросостояния с полной (внутренней) энергией  $E_l$  будет равна

$$f(E_l) = \frac{w(E_l)}{Z} \exp\left(-\frac{E_l}{k_B T}\right), \quad (10)$$

где  $w(E_l)$  – распределение состояний по энергиям или число микросостояний (конфигураций) с энергией  $E_l$ ,  $Z$  – статистическая сумма по всем возможным энергетическим состояниям системы

$$Z = \sum_{l=1}^{N_{st}} w(E_l) \exp\left(-\frac{E_l}{k_B T}\right), \quad (11)$$

где  $N_{st}$  – общее число состояний системы.

Последние пронумерованы в порядке ее возрастания  $E_{l+1} > E_l$ . Распределение  $w(E_l)$  зависит от числа вакансий и межузельных атомов, и от их соотношения, а также от

симметрии их расположения (упорядочения). По этой причине нельзя установить взаимнооднозначное соответствие между внутренней энергией и количеством или концентрацией дефектов. Нахождение функции  $w(E_l)$  является сложной комбинаторной задачей, определение энергетического спектра  $E_l$ , как совокупности разрешенных для  $l$  состояния энергий, также является трудноразрешимой задачей. Однако, такое однозначное соответствие можно получить для среднего значения внутренней энергии  $U$  по всем состояниям при фиксированном значении количества вакансий  $n_V$  и межузельных атомов  $n_i$ . Пользуясь выражением ФРВ (10), можно записать

$$U(n_V, n_i) = \frac{1}{Z} \sum_{l=1}^{N_{st}(n_V, n_i)} E_l w(E_l) \exp\left(-\frac{E_l}{k_B T}\right). \quad (12)$$

Здесь в отличие от случая (9) внутренняя энергия не является линейной функцией  $n_V$  и  $n_i$ , но является функцией общего вида. Увеличение доли симметричных низкоэнергетических состояний будет уменьшать среднее значение внутренней энергии. Переход к состояниям, у которых вакансии и межузельные атомы при высокой степени их концентрации могут переходить в более высокоэнергетические распределенные (и более подвижные) состояния, будет приводить к росту внутренней энергии. Для отображения всех этих свойств внутренней энергии она представляется в форме полинома с чередующимися знаками

$$U(n_V, n_i) = U_0 + \sum_{m=V, i} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} u_{mk-1} n_m^k - \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{k+l} u_{kl} n_V^k n_i^l. \quad (13)$$

Первая сумма описывает вклад от каждой подсистемы точечных дефектов отдельно, вторая – описывает вклад от взаимодействия между вакансиями и межузельными атомами. Знак минус перед второй суммой выбран из тех соображений, что взаимодействие между вакансиями и межузельными атомами имеет в целом притягивающий характер. Пренебрегая вырождением в пределах одной группы состояний с количеством вакансий  $n_V$  и количеством межузельных атомов  $n_i$ , для такой средней внутренней энергии мы можем записать «эффективную» функцию распределения вероятностей с учетом (1), (3) и (5) в виде (8), в котором внутренняя энергия задается не (9), а более общим выражением (13). Относя независимые от  $n_V$  и  $n_i$  переменные к несущественной постоянной  $1/Z$ , выражение (8) можно представить в виде произведения

$$f(n_V, n_i) = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^N (n_V + i) \prod_{j=1}^{N_i} (n_i + j) \exp\left(-\frac{U(n_V, n_i)}{k_B T}\right). \quad (14)$$

Отметим, что термодинамическая вероятность Больцмана для вакансий и межузельных атомов строится из представлений о статистической независимости формирования этих подсистем (позиции межузельных атомов не совпадают с позициями узлов решетки). В то же время в общей функции распределения эти системы не являются независимыми из-за смешанных слагаемых во внутренней энергии (см. последнюю сумму в (13)).

Значения  $n_V$  и  $n_i$ , при которых ФРВ имеет экстремальные (равновесные) значения, могут быть найдены из следующей системы трансцендентных уравнений [21]

$$\sum_{i=n_V}^{N+n_V} \frac{1}{i} - \frac{u_V}{k_B T} = 0, \quad (15)$$

$$\sum_{i=n_i}^{N+n_i} \frac{1}{i} - \frac{u_i}{k_B T} = 0, \quad (16)$$

где

$$u_V \equiv \frac{\partial U}{\partial n_V} = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} u_{V k-1} n_V^{k-1} - \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{k+l} k u_{kl} n_V^{k-1} n_i^l, \quad (17)$$

$$u_i \equiv \frac{\partial U}{\partial n_i} = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} u_{V k-1} n_V^{k-1} - \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{k+l} k u_{kl} n_V^{k-1} n_i^l \quad (18)$$

– энергии или химические потенциалы вакансии и межузельного атома. Уравнения (17), (18) являются уравнениями состояния для общего неравновесного случая. Уравнения (15) и (16) зацепляются за счет смешанных слагаемых в разложении внутренней энергии в (13), определяющих взаимодействие между подсистемами вакансий и межузельных атомов.

Заменяя суммирование интегрированием с учетом определений (1)–(8), уравнения (15), (16) можно привести к виду

$$\mu_V = \frac{\partial F_c}{\partial n_V} = k_B T \left( \frac{u_V}{k_B T} - \ln \frac{N+n_V}{n_V} \right) = 0, \quad (19)$$

$$\mu_i = \frac{\partial F_c}{\partial n_i} = k_B T \left( \frac{u_i}{k_B T} - \ln \frac{N+n_i}{n_i} \right) = 0. \quad (20)$$

Здесь учтено, что максимум ФРВ совпадает с минимумом «истинной» свободной энергии  $F_c$  и равенством нулю химического потенциала вакансий и межузельных атомов. Отметим, что химические потенциалы  $\mu_V$  и  $\mu_i$  отличаются от химических потенциалов (17) и (18), определенных через внутреннюю энергию, ибо последние в равновесном состоянии нулю не равны. Правые части уравнений (19), (20) представляют собой фундаментальную часть этих уравнений, убывающую с возрастанием параметра  $n_V$  или  $n_i$ , соответственно (кривые 1 на рис. 1–3). Фундаментальная кривая  $S$  на этих рисунках построена при  $N = N_i = 2000$ .

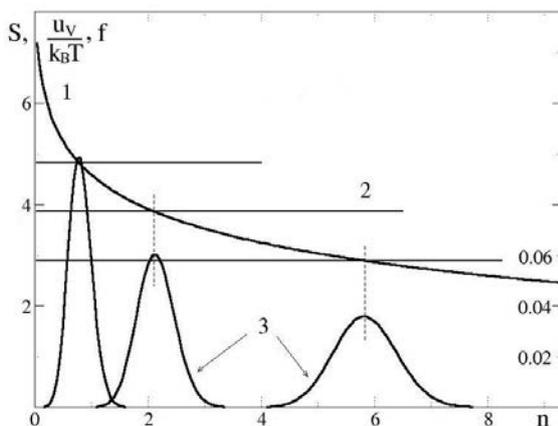


Рис. 1

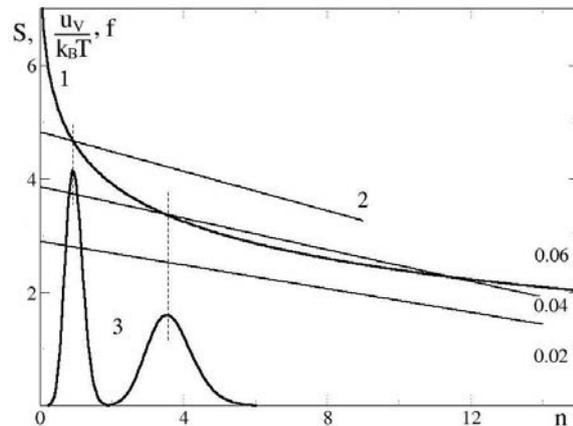


Рис. 2

Левые части уравнений (19), (20) через коэффициенты  $u_k$  зависят от параметров материала, и они представляет собой материальную часть этих уравнений (кривые 2 на рис. 1–3). Различные кривые 2 на рис. 1, 2 соответствуют температурам  $T=2400$ ;  $3000$ ;  $4000$  К, а на рис. 3 температурам  $T=260$ ;  $286$ ;  $300$ ;  $330$  К (случай  $T = 286$  выделен пунктиром). Кривые 3 на этих рисунках соответствуют графикам ФРВ (правая шкала). На рис. 1 и 2 материальные кривые построены при параметрах  $u_{V0} = 1$  эВ,  $u_{V1} = 0.0018$  эВ, на рис. 3 – при параметрах  $u_{V0} = 0.125$  эВ,  $u_{V1} = 0.0006$  эВ и  $u_{V2} = 0.125 \cdot 10^{-5}$  эВ. Как видим, положения корней уравнений (19), (20) во всех случаях совпадают с максимумами ФРВ, рассчитанных напрямую по формулам (1)–(4), (17), (18). На всех графиках все виды энергии представлены в эВ, а зависимость от концентрации вакансий в процентах  $n=100 \cdot n/N$ .

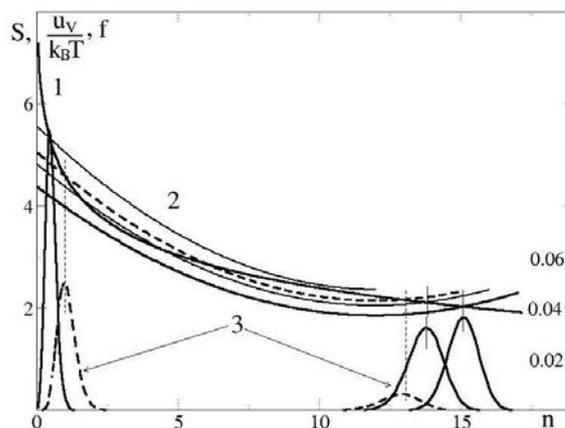


Рис. 3

**Равновесные состояния.** Известно, что межузельные атомы имеют более высокую подвижность по сравнению с вакансиями, поэтому они раньше придут к равновесному состоянию (адиабатический предел). На временах больших адиабатического предела вкладом межузельных атомов можно пренебречь, в результате получим чисто вакансионную задачу [21]. Рассмотрим эту задачу в различной степени приближения. В линейном по числу вакансий приближении для внутренней энергии или при постоянной энергии вакансии уравнение (19) имеет только одно решение, которое является хорошо известным решением Френкеля [14] (рис. 1)

$$n_{Ve} = N \exp\left(-\frac{u_{V0}}{k_B T}\right), \quad (21)$$

где  $n_{Ve}$  – равновесное значение количества вакансий.

При понижении энергии вакансии или при повышении температуры решение непрерывно смещается в область более высокого числа (или концентрации) вакансий. Формально мы можем получить любое значение концентрации вакансий, но, понятно, что слишком высокие концентрации вакансий порядка 100% теряют физический смысл и теория становится непригодной. Однако не слишком высокие концентрации вакансий порядка 10 % Френкель предложил рассматривать, как переход в жидкое состояние. В то же время, предложенное им (в приближении независимости энергии вакансии от концентрации вакансий) решение не может объяснить или описать процесс плавления твердого тела, как скачкообразный фазовый переход первого рода. Переход в область высокой концентрации вакансий с ростом температуры осуществляется непрерывно.

В квадратичном по числу вакансий приближении для внутренней энергии или в линейном приближении для энергии вакансии уравнение (19) имеет уже в области высоких значений энергии вакансии или в области низких температур два решения (рис. 2). Одно из них в области более низкой концентрации вакансий, фактически, совпадает с тем же решением Френкеля, но несколько смещено за счет взаимодействия вакансий. Второе решение в области более высокой концентрации вакансий описывает

также равновесное или стационарное решение задачи, однако, оно соответствует минимуму ФРВ и является неустойчивым. Вероятность этого состояния оказывается меньшей не только по отношению к устойчивому стационарному состоянию, но и по отношению к любому неравновесному состоянию. Кроме того, для низких значений энергии вакансии или для высоких температур мы попадаем в область, в которой вообще отсутствуют решения уравнения (19). Последнее обстоятельство свидетельствует о непригодности данного приближения в этой области, и необходимости прибегнуть к более высокому приближению.

В кубическом по числу вакансий приближении для внутренней энергии или в квадратичном приближении для энергии вакансии уравнение (19) может иметь уже одно или три решения (рис. 3). В области высоких значений энергии вакансии или низких температур уравнение по-прежнему будет иметь одно решение, которое является модифицированным за счет нелинейных вкладов решением Френкеля. При понижении энергии вакансии или с ростом температуры уравнение будет иметь три решения, одно из которых (левое) есть модифицированное решение Френкеля, второе (промежуточное) является неустойчивым, а третье (правое) в области высокой концентрации вакансий можно рассматривать как соответствующее жидкому состоянию материала. В этом случае будем иметь равновесное сосуществование твердой и жидкой фазы вещества. При еще большем повышении температуры мы перейдем в область существования только одного решения, которое будет соответствовать полностью расплавленному материалу. При этом переход из твердого состояния в жидкое осуществляется разрывно, как фазовый переход первого рода. Для того, чтобы говорить о переходе именно к жидкому состоянию (а, не скажем, к аморфному), необходимо чтобы имела место не только высокая концентрация вакансий, но и сдвиговой модуль материала обращался в нуль.

Влияние межузельных атомов можно качественно оценить из тех соображений, что они имеют по сравнению с вакансиями более высокую энергию, а поэтому в равновесном состоянии имеют более низкую концентрацию. Поскольку перед константой  $u_{II}$ , согласно (13) и (17), стоит знак «минус», то за счет перекрестных эффектов это приведет к уменьшению энергии вакансии  $u_V$ , и к некоторому смещению корней первого уравнения (15) в область более высоких количеств (концентраций) вакансий. Для прямого участия межузельных атомов в процессах плавления твердого тела необходимо, чтобы уравнение (20) имело еще одно решение в области большего количества межузельных атомов. Поскольку их энергия выше, то соответствующая им материальная кривая будет располагаться значительно выше соответствующей материальной кривой для вакансий. Следовательно, в то время как уравнение (19) будет иметь два решения, уравнение (20) будет иметь только одно решение, и межузельные атомы не будут принимать прямого самостоятельного участия в процессах плавления, а будут только лишь немного модифицировать участие вакансий. Поэтому ниже в явном виде мы их учитывать не будем.

**Система неравновесных термодинамических потенциалов.** На рис. 4 представлены графики ФРВ (кривая 1) и различных термодинамических потенциалов, классическая конфигурационная свободная энергия  $F_{cV}$  (кривая 2), внутренняя энергия (кривая 3), модифицированная конфигурационная свободная энергия  $\tilde{F}_c$  (кривая 4), эффективная внутренняя энергия  $\bar{U}$  (кривая 5) и эффективная свободная энергия  $\bar{F}_c$ .

Здесь  $\mathcal{E}$  – общее собирательное обозначение всех видов энергии. Правая шкала для ФРВ  $f$ . Вертикальная линия соответствует равновесному состоянию.

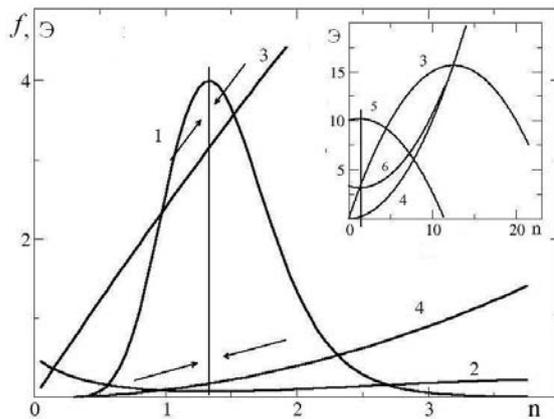


Рис. 4

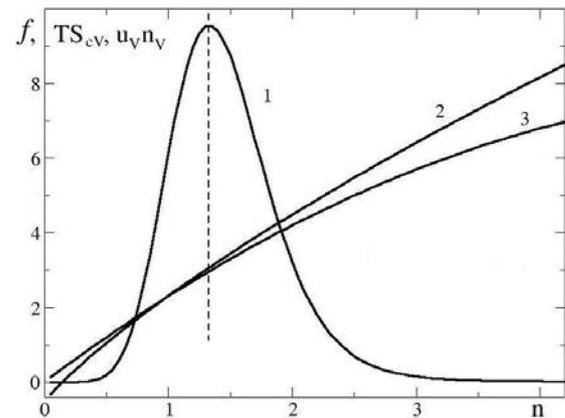


Рис. 5

Свободная энергия  $F = U - TS$ , где  $S$  – энтропия, была введена при решении квазиравновесных тепловых задач в бездефектных конденсированных средах, как один из видов термодинамического потенциала, наряду с внутренней энергией, энтальпией и энергией Гиббса. В определенных внешних условиях она, как и другие термодинамические потенциалы для других условий, обладала экстремальными свойствами по отношению к внутренним неравновесным процессам. При рассмотрении дефектных твердых тел, в частности твердых тел с вакансиями, согласно гипотезе Больцмана, по аналогии была введена (конфигурационная) свободная энергия

$$F_{cV} = U - T S_{cV}, \quad (22)$$

где конфигурационная энтропия  $S_{cV}$  задается соотношениями (1), (2). Этой (конфигурационной) свободной энергии также приписывались свойства термодинамического потенциала, и она обладает свойством минимальности относительно вариации концентрации структурных дефектов. Не трудно видеть, что это свойство следует из того факта, что свободная энергия в логарифмическом масштабе и с противоположным знаком с точностью до константы совпадает с ФРВ (8)

$$F_{cV} = -k_B T \ln(Zf), \quad (23)$$

вследствие чего минимумы свободной энергии автоматически совпадают с максимумами ФРВ (сопоставьте кривые 1 и 2 на рис. 4), которые определяют наиболее вероятные, то есть, равновесные состояния. Другими словами, свободная энергия  $F_{cV}$  это обратная величина к ФРВ, выраженная в энергетических единицах в логарифмическом масштабе.

При некоторой схожести энергий  $F$  и  $F_{cV}$  между ними имеются также важные принципиальные различия. А именно, известно, что внутренняя и свободная энергия, связанные преобразованиями Лежандра, зависят каждая от своих аргументов  $U = U(T, V)$ ,  $F = F(S, V)$ , назовем их условно собственными аргументами этих потенциалов. Это свойство, и следующее из него дифференциальные соотношения, и позволяют интерпретировать эти энергии как термодинамические потенциалы. Если сопоставить энергию вакансии  $u_V$  с температурой  $T$ , то в этом контексте количество вакансий  $n_V$  следует сопоставить с энтропией  $S$ . Казалось бы, конфигурационная

свободная энергия  $F_{cV}$  должна быть функцией энергии вакансии, однако, из соотношений (1), (2) и (22) следует, что она является функцией количества или концентрации вакансий. Это позволяет заключить, что свободная энергия  $F_{cV}$  не является термодинамическим потенциалом в строгом смысле этого понятия.

Чтобы построить некоторый термодинамический потенциал свободной энергии заметим, что в случае вакансий согласно (1) и (2) конфигурационная энтропия  $S_{cV}$  и количество вакансий  $n_V$  взаимнооднозначно зависят друг от друга, то есть, в качестве независимого аргумента задачи вместо конфигурационной энтропии  $S_{cV}$  мы всегда можем использовать количество вакансий  $n_V$ . В этом случае, выполняя преобразование типа Лежандра по отношению к паре термодинамически сопряженных переменных  $u_V$  и  $n_V$ , получим новый вид свободной энергии (кривая 4 на рис. 4)

$$\tilde{F}_{cV} = U - u_V n_V, \quad (24)$$

Легко установить, что

$$n_V = -\frac{\partial \tilde{F}_{cV}}{\partial u_V}, \quad (25)$$

Соотношения (17) и (25) представляют собой связанную пару уравнений между внутренней энергией  $U$  и модифицированной конфигурационной свободной энергией  $\tilde{F}_{cV}$  с одной стороны, и между концентрацию вакансий  $n_V$  и энергией вакансии  $u_V$  с другой стороны. Можно видеть, что концентрация вакансий является «собственным» аргументом внутренней энергии, а энергия дефектов является «собственным» аргументом модифицированной конфигурационной свободной энергией. В квадратичном приближении эту зависимость можно записать в явном виде (см. кривую 4 на рис. 4):

$$\tilde{F}_{cV} = U_0 + \frac{1}{2u_1} (u_0 - u_V)^2. \quad (26)$$

Поскольку энергия, необходимая для образования новой вакансии меньше в присутствии других дефектов, чем в безвакансионном кристалле, квадратичная поправка в (13) имеет отрицательный знак. Заметим, что выражение (13) пригодно, как в равновесном, так и не равновесном состоянии. В этом приближении внутренняя энергия является выпуклой функцией концентрации вакансий, имеющей максимум в точке  $n_V = n_{Vmax}$ , как показано на вставке к рис. 4. В том же приближении модифицированная конфигурационная свободная энергия является вогнутой функцией с минимумом в точке  $n_V = 0$  (или  $u_V = u_0$ ).

Из соотношений (17) и (25), легко показать, что стационарное состояние не соответствует ни максимуму внутренней энергии  $U$ , ни минимуму свободной энергии  $\tilde{F}_{cV}$ , поскольку в стационарной точке  $n_V = n_{Ve}$ , где  $u_{Ve}$  и  $n_{Ve}$  удовлетворяют уравнениям

$$u_{Ve} = \frac{\partial U}{\partial n_{Ve}} \neq 0 \quad \text{и} \quad n_{Ve} = -\frac{\partial \tilde{F}_{cV}}{\partial u_{Ve}} \neq 0. \quad (27)$$

На рис. 5 приведены графики ФРВ (кривая 1, правая шкала), связанная энергия в форме  $TS_{cV}$ , (кривая 2), а также связанная энергия в форме  $u \cdot n$  (кривая 3). Из термодинамики известно, что произведение  $TS_{cV}$  в (22), входящее в определение

свободной энергии  $F_{cV}$ , имеет смысл связанной энергии. С другой стороны, общая энергия дефектов  $u_V \cdot n_V$  в главной части физически является энергией, которая также потеряна для производства работы. Только малая часть ее остается для производства работы. Тогда мы можем заключить, что эти две энергии должны быть равны, по крайней мере, в области равновесного состояния (рис. 5).

$$TS_{cV} \approx u_V n_V. \quad (28)$$

Природа данной эквивалентности кроется в том, что мы имеем дело, фактически, с энергией одного и того же происхождения, но записанной в различных формах. Величины, входящие в это соотношение, довольно точно определены, и энергию  $u_V n_V$  следует понимать, как всю энергию, запасенную в дефектах. Температура  $T$  есть температура теплового движения, и она не связана напрямую с дефектной подсистемой. Приближенное равенство (28) отражает динамическое тепловое равновесие между тепловой подсистемой, как динамическим движением атомов, и статической подсистемой дефектов. Интерфейсом между этими подсистемами является конфигурационная энтропия  $S_{cV}$ . Интересно также отметить, что как температура  $T$ , так и энергия вакансии  $u_V$  являются удельными энергетическими характеристиками каждой из подсистем. Кроме того, и конфигурационная энтропия  $S_{cV}$ , и концентрация дефектов  $n_V$  обе обладают свойством адитивности, что наряду с их взаимнооднозначным соответствием (1), (2) может быть основанием для их взаимозаменяемости.

Обобщая сказанное выше, можно аналогичные соотношения и рассуждения повторить относительно межузельных атомов. Вопрос о том, можно ли применить это и к другим типам дефектов (дислокациям, границам зерен и т.д.) пока остается открытым, поскольку для них отсутствуют простые и надежные статистические выражения. Следует отметить, что для решения практических задач. В то же время, очевидно, что с термодинамической точки зрения все структурные дефекты характеризуются одинаковым образом избыточной энергией, затраченной на их образование, и поэтому они могут описываться похожими эволюционными уравнениями, но записанными пока на феноменологическом уровне.

**Кинетические (эволюционные) уравнения.** Если система отклонена от равновесного (стационарного) состояния, то она будет стремиться к этому состоянию, с тем более высокой скоростью, чем сильнее отклонена. Эволюционные уравнения для твердого тела с точечными дефектами в таком случае будут иметь вид

$$\frac{dn_m}{dt} = \pm \gamma_{n_m} \left( \frac{\partial U}{\partial n_m} - u_{me} \right), \quad \frac{du_m}{dt} = \mp \gamma_{u_m} \left( \frac{\partial \tilde{F}_c}{\partial u_m} + n_{me} \right). \quad (29)$$

Здесь и дальше  $m = V, i$ .

Форма кинетических уравнений (29) симметрична относительно использования внутренней и модифицированной свободной конфигурационной энергии. Если равновесное состояние располагается ближе к максимуму внутренней энергии, то из соображений устойчивости решения выбирается верхний знак (выпуклая функция). Если оно располагается ближе к минимуму внутренней энергии, то – нижний (вогнутая функция). Оба варианта кинетических уравнений являются эквивалентными, и их применение является вопросом удобства.

В то же время по ряду причин более предпочтительными являются эволюционные уравнения, выраженные в терминах внутренней энергии. Во-первых, концентрация (или количество) дефектов является более легко измеряемой величиной, во-вторых,

внутренняя энергия является базовой величиной в термодинамике (первое начало термодинамики), она является универсальной как для равновесного, так и для неравновесного состояния. Задавая внутреннюю энергию, как функцию переменных состояния мы конкретизируем систему и полностью ее определяем с термодинамической точки зрения.

Если полагать, что равновесная энергия дефекта  $u_V = u_{Ve}$  (или  $u_i = u_{ie}$ ) и количество дефектов  $n_V = n_{Ve}$  (или  $n_i = n_{ie}$ ) медленно меняются в течение внешнего воздействия, тогда их произведения могут быть введены под знак дифференцирования в (29). Это позволяет определить новый вид (смещенной) внутренней и свободной энергии (см. кривые 5, 6 на вставке рис. 4)

$$\bar{U} = U - u_{Ve}n_V, \quad \bar{F}_c = \tilde{F}_c + u_V n_{Ve}. \quad (30)$$

Тогда уравнения (29) немного упрощаются

$$\frac{\partial n_V}{\partial t} = \pm \gamma_{n_V} \frac{\partial \bar{U}}{\partial n_V}, \quad \frac{\partial u_V}{\partial t} = \mp \gamma_{u_V} \frac{\partial \bar{F}_c}{\partial u_V}. \quad (31)$$

Исходные потенциалы  $U$  и  $\tilde{F}_c$  связаны посредством преобразования типа Лежандра (24). Смещенные потенциалы  $\bar{U}$  и  $\bar{F}_c$  связаны посредством преобразования

$$\bar{F}_c = \bar{U} - u_V n_V + u_{Ve} n_V + u_V n_{Ve}, \quad (32)$$

которое отличается от преобразования типа Лежандра антикоммутиционной скобкой  $[u_V n_V] = u_{Ve} n_V + u_V n_{Ve}$ .

Стационарная точка для сдвинутых потенциалов совпадает с максимумом  $\bar{U}$  и с минимумом  $\bar{F}_c$  для верхних знаков в (31). Таким образом,  $\bar{U}$  является некоторым эффективным термодинамическим потенциалом, который учитывает тот факт, что стремление внутренней энергии  $U$  к минимуму полностью уравновешивается энтропийным фактором. Свободная энергия  $\bar{F}_c$  стремится к минимуму, но в пространстве собственного аргумента  $u$ , тогда как свободная энергия  $F_c$  стремится к минимуму в пространстве несобственного «аргумента»  $n$ .

**Краткие выводы.** В статье в рамках идей неравновесной эволюционной термодинамики рассмотрена вакансионная теория плавления твердых тел. Учет снятия вырождения энергий вакансий за счет их взаимодействия и аппроксимации этого взаимодействия полиномиальным представлением внутренней энергии позволил обобщить представления Френкеля и описать процесс плавления, как скачкообразный фазовый переход 1-го рода. Показано, что влияние межузельных атомов на процесс плавления не имеет принципиального значения, поскольку соответствующие материальные кривые лежат выше таких же кривых для вакансий и не имеют пересечений с фундаментальной кривой в этой области температур. Они могут только немного смещать соответствующие стационарные (равновесные) решения для вакансий. Влияние дислокаций на поведение системы может играть роль только при относительно невысоких температурах. При температурах близких к точке плавления вследствие размерного эффекта усиления подвижности вакансий, они начинают играть решающую роль в сдвиговом деформировании материала.

Кроме того, в статье на примере твердого тела с вакансиями проиллюстрирован более общий метод неравновесной эволюционной термодинамики. Показано, что кинетические уравнения могут быть записаны не только в терминах свободной энергии, но также в терминах эффективной внутренней и модифицированной свободной энергии. Получена целая система взаимосвязанных неравновесных термодинамических потенциалов, включая эффективную внутреннюю и модифицированную свободную энергию. Проанализирована взаимосвязь между классической и модифицированной свободной энергией через компонент связанной энергии в обеих формах (см. рис. 5).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lindemann L.A. The calculation of molecular vibration frequencies / L. A. Lindemann // Z. Phys. – 1910. – Vol. 11. – P. 609-612.
2. Soma T. Lindeman's Melting Law and the Effect of Pressure on the Melting Point of Si and Ge / T. Soma, H. Matsuo // Phys. Stat. Sol. (b) – 1982. – V. 109, - P. 387-391.
3. Zheng X. H. On the Lindemann criterion in 2D / X. H. Zheng, J. C. Earnshaw // Europhys. Lett. – Vol. 41, No 6. – P. 635-640.
4. Zheng X. H. Melting behavior of single two-dimensional crystal / X. H. Zheng, R. Grieve // Phys. Rev. B – 2006. – Vol. 73. – P. 064205.
5. Chattopadhyay K. Microstructure, shape, stability and melting in embedded nanoparticles / K. Chattopadhyay, V. Bhattacharya, J. Indian Inst. Sci. – 2009. – Vol. 89. – P. 49.
6. Sutherland W. A kinetic theory of solids, with an experimental introduction / W. Sutherland // Phil. Mag., ser. 5. – 1891. – Vol. 32. – P. 30.
7. Brillouin L. On thermal dependence of elasticity in solids / L. Brillouin // Phys. Rev. – 1938. – Vol. 54. – P. 916.
8. Born M. Thermodynamics of crystals and melting / M. Born, J. Chem. Phys. – 1939. – Vol. 7. – P. 591.
9. Mei Q.S. Melting and superheating of crystalline solids: From bulk to nanocrystals / Q.S. Mei, K. Lu // Progr. Mat. Sci. – 2007. – Vol. 52. – P. 1175.
10. Shanker J. Studies on melting of alkali halides / J. Shanker, M. Kumar // Phys. Stat. Sol. (b) – 1990. – Vol. 158. – P. 11.
11. Yukalov V.I. Theory of melting and crystallization / V.I. Yukalov // Phys. Rev. B – 1985. – Vol. 32. – P. 436.
12. Yukalov V.I. Phase transitions and heterophase fluctuations / V.I. Yukalov // Phys. Rep. – 1991. – Vol. 208. – P. 395.
13. Yukalov V.I. Mesoscopic phase fluctuations: General phenomenon in condensed matter // V.I. Yukalov, Int. J. Mod. Phys. B – 2003. – Vol. 17. – P. 2333.
14. Frenkel Ya.I., Kinetic Theory of Liquids. – Dover, New York, 1955.
15. Eyring H. Significant liquid structures, VI. The vacancy theory of liquids / H. Eyring, T. Ree // Proc. Nat. Acad. Sci. – 1965. – Vol. 47. – P. 526.
16. Jensen E.J. Order-disorder transition produced by dislocations in an FCC Lennard-Jones solid / E. J. Jensen, W. D. Kristensen, R. M. J. Cotterill // Phys. Rev. Lett. – 1975. – Vol. 36. – P. C2-49.
17. O'Reilly D.E. Vacancy theory of melting and condensation / D.E. O'Reilly // Phys. Rev. A. – 1997. – Vol. 15. – P. 1198.
18. Метлов Л.С. Неравновесная эволюционная термодинамика твердых тел / Л.С. Метлов // Вестник Донецкого университета. Сер. А: Естественные науки. – 2008. – Вып 2. – С. 209.
19. Метлов Л.С. Двухуровневая неравновесная эволюционная термодинамика ИПД / Л.С. Метлов // Вестник Донецкого университета. Сер. А, Естественные науки. – 2009. – Вып 2. – С. 144.
20. Metlov L.S. Formation of the internal structure of solids under severe load / L.S. Metlov // Phys. Rev. E. – 2010. – Vol. 81. – P. 051121.
21. Metlov L.S. Nonequilibrium evolution thermodynamics of vacancies / L.S. Metlov // Phys. Rev. Lett. – 2011. – Vol. 106. – P. 165506.
22. Metlov L.S. Nonequilibrium dynamics of a two-defect system under severe load / L.S. Metlov // Phys. Rev. E. – 2014. – Vol. 90. – P. 022124.

*Поступила в редакцию 11.03.2016 г.*

**NONEQUILIBRIUM EVOLUTION THERMODYNAMICS OF VACANCIES AND INTERSTITIAL ATOMS. THEORY OF SOLID MELTING**

***L.S. Metlov***

In the paper a classic problem for solid melting is presented from a positions of nonequilibrium evolution thermodynamics. A role of vacancies and interstitial atoms in solid melting is analyzed, different approximations with vacancy density are considered.

*Keywords:* Phase transitions, entropy, melting, vacancies, interstitial atoms

**Метлов Леонид Семенович**

Доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник  
Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, г. Донецк  
Донецкий национальный университет, г. Донецк  
lsmet@fti.dn.ua

**Metlov Leonid Semenovich**

Doctor of of Physico-Mathematical Sciences, Senior Research Officer  
Donetsk Institute for Physics and Engineering named by A.A. Galkin, Donetsk  
Donetsk National University, Donetsk

УДК 004.67

**ОПТИЧЕСКИЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ.  
ПРЕОБРАЗОВАНИЕ РАДИОСИГНАЛОВ**© 2016. *И.А. Третьяков, М.Л. Павлов, Т.С. Тебенева, В.В. Данилов*

Приведены результаты исследования оптической информационной технологии, в частности, преобразования радиосигналов в их лазерные аналоги, с минимальными искажениями при акустооптическом взаимодействии.

**Ключевые слова:** гомоморфность; акустооптическое взаимодействие; акустооптическая ячейка; дифракция; параметр Клейна-Кука.

**Введение.** Естественнонаучной основой информационных технологий преобразования радиосигналов в лазерные аналоги, является физическая акустооптика [1–7].

Вопрос гомоморфности преобразований входных радиосигналов (РС) при акустооптическом взаимодействии в выходную информацию, в виде дифрагированного лазерного пучка, обладающего всеми атрибутами входного РС, является центральным в информационных технологиях обработки радиосигналов.

Основными элементами структуры обобщенного акустооптического устройства являются модули [7]: возбуждения электроакустического преобразователя, акустооптическая ячейка (АОЯ), обеспечения эксплуатационной стабильности, где АОЯ является, по сути, физической моделью акустооптического взаимодействия. На рис. 1 показаны структурные элементы АОЯ: 1 – электроакустический преобразователь; 2 – верхний электрод электроакустического преобразователя, 3 – нижний электрод электроакустического преобразователя; 4 – среда акустооптического взаимодействия; 5 – лазерный пучок, не принявший участия в акустооптическом взаимодействии (недифрагированный), 6 – дифрагированный (выходной) лазерный пучок, несущий информацию входного радиосигнала; 7 – акустическая нагрузка; 8 – входной (падающий) лазерный пучок; L и Н – размеры электроакустического преобразователя; D – апертура лазерного пучка.

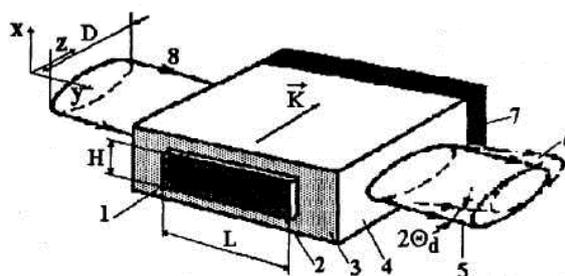


Рис. 1. Структурные элементы АОЯ

Таким образом, в данной работе исследуется процесс преобразования радиосигнала в его акустический и далее, световой аналог в виде выходного (дифрагированного) лазерного пучка. Акустооптическое (фотоупругое) взаимодействие, как физическое явление исследовалось в работах [8–10]. Радиосигнал, поступающий на электроакустический преобразователь (ЭАП) порождает в среде акустооптического взаимодействия (АОВ) упругую (акустическую) волну, которая распространяется в направлении  $z$  с волновым вектором  $\vec{k}$ . На область распространения акустического луча, геометрия которой определяется размерами L и H, падает лазерный луч 8. При выполнении неко-

торых условий, различают три режима возникающей дифракции, режим Рамана-Ната, Брэгга и промежуточный.

**Режим Рамана-Ната** характеризуется дифракционным спектром, компоненты которого определяются из отношения напряженности электромагнитного поля дифрагированного лазерного пучка  $E_{dm}$  к напряженности электромагнитного поля лазерного пучка  $E_i$  падающего на область АОВ, в соответствии с выражением [7, 10]:

$$\frac{E_{dm}}{E_i} = J_0(\Delta\phi) \cos(\omega t + \phi_0) + \sum_{m=1}^{\infty} J_m(\Delta\phi) [\cos(\omega t + m\Omega T + \phi_0) + (-1)^m \cos(\omega t - m\Omega T + \phi_0)], \quad (1)$$

где  $J_m(\Delta\phi) [\cos(\omega t + m\Omega T + \phi_0) + (-1)^m \cos(\omega t - m\Omega T + \phi_0)]$  – боковые дифракционные спектральные составляющие, фаза которых,  $\phi_m = \phi_m(z) = \phi_0 - m\Omega z / V = 2\pi m z / \Lambda$ ,  $\Lambda$  – длина волны упругих колебаний,  $\phi_0 = -2\pi n L / \lambda = -knL$  – фазовый набег немодулированного лазерного излучения, не зависящий от координат,  $\Delta\phi = -k_0 \Delta n L$  – изменяемое значение фазы световой волны, обусловленное модуляцией упругой волной показателя преломления среды АОВ –  $\Delta n$ .

Из (1) следует, что в результате акустооптического взаимодействия дифракционный спектр режима Рамана-Ната содержит световой не отклоненный компонент  $J_0(\Delta\phi)$ , несущий информацию об акустическом сигнале (радиосигнале) и ряд симметрично расположенных по отношению к нему пространственно-разнесенных компонент, несущих информацию о входном радиосигнале. Это компоненты  $J_m(\Delta\phi)$ , отклоненные на угол  $\Theta_m$ , причем частота светового пучка в  $\pm m$  порядке определяется  $\omega \pm m\Omega$ , где  $\omega, \Omega$  – частоты лазерного и акустического пучков. Для первого дифракционного порядка, очевидно:

$$E_d / E_i = J_1(\Delta\phi). \quad (2)$$

**Режим дифракции Брэгга** имеет дифракционный спектр отличный от предыдущего. Лазерный луч, падает на область АОВ, под некоторым углом (угол Брэгга). В результате взаимодействия, на выходе из среды акустооптического взаимодействия (см. рис. 1), наблюдаются два лазерных луча, один из которых принял участие в АОВ и отклонился от первоначального направления на угол  $2\Theta_d$ , другой не принял участия в АОВ и продолжил распространение в том же направлении. Соотношения между напряженностью падающего пучка лазерного излучения  $E_i$  и дифрагированного  $E_d$  определяется из соотношения [7, 10]:

$$(E_d / E_i)^2 = \sin^2(\Delta\phi / 2) = \sin^2(0,5\Delta\phi). \quad (3)$$

Соотношение (3) справедливо, если выполняется условие Брэгга:

$$\sin \Theta_d = \sin \Theta_B = \lambda / 2\Lambda_B = \lambda \Omega_B / (2V), \quad (4)$$

где  $\Omega_B = 2nV \sin \Theta_B / \lambda_0$ , частота Брэгга,  $\Lambda_B = V / \Omega_B$  – длина упругой (акустической) волны Брэгга,  $V$  – скорость распространения упругой волны в среде АОВ.

Согласно (4) только на частоте Брэгга ( $\Omega_B$ ) возможно отклонение дифрагированного пучка. Тем не менее, предположение, что акустическая волна и волна лазерного излучения имеют плоский фронт – идеализация. В работе [9] показано, что диаграмма

направленности электроакустического преобразователя шириной  $L$  в дальней зоне определяется согласно  $R(\Delta\Theta) = R_0 \{[\sin(\pi L \Delta\Theta / \Lambda)] / (L \Delta\Theta / \Lambda)\}$ , где  $\Delta\Theta$  – отклонение акустического пучка от центрального направления. Так как  $\Theta_B$  постоянен, взаимодействие акустических волн, идущих в направлении  $\Delta\Theta$ , происходит и на частотах  $\Omega_B \approx \Omega$ . Тогда, как следствие (4),  $\Delta\Theta = [(\lambda / (2V))](\Omega_B - \Omega)$ , и в предположении слабого акустооптического взаимодействия имеет место выражение:

$$[E_a(\Delta\Theta) / E_i]^2 = \sin^2 \left[ \frac{\pi L \lambda \Omega (\Omega_B - \Omega)}{2V^2} \right] / \left[ \frac{\pi L \lambda \Omega (\Omega_B - \Omega)}{2V^2} \right],$$

которое определяет полосу частот акустооптического взаимодействия в режиме Брэгга.

Остается невыясненным численный критерий, при котором сохраняется линейная зависимость между уровнем входного радиосигнала и интенсивностью выходного лазерного пучка, несущего информацию о входном радиосигнале.

Фотоупругий эффект в тензорной форме определяется соотношением вида [10]:  $\Delta n_{ij} = -0,5 n_0^3 p_{ijkl} S_{kl}$ . Используя соотношение  $\Delta\varphi = -k_0 \Delta n L$  и перейдя к матричным представлениям:

$$\Delta\varphi = (\pi n_0^3 p_{mn} S_n L) / \lambda_0, \quad (5)$$

где  $p_{nm}$  – фотоупругая постоянная среды акустооптического взаимодействия;  $S_n$  – амплитуда деформации среды акустооптического взаимодействия при распространении в ней упругой волны,  $\lambda_0$  – длина волны лазерного излучения в вакууме,  $n_0$  – показатель преломления среды АОВ. Из теории упругого взаимодействия [11] известно, что упругая деформация определяется выражением  $S_n^2 = 2P_a / (\rho V^3 L H)$ , где  $LH$  – сечение акустического столба;  $P_a$  – мощность упругой. Сделав соответствующие замены в (5), получим:

$$\Delta\varphi = (\pi / \lambda_0) \sqrt{2P_a M_2 L / H},$$

откуда следует, что изменение фазы световой волны определяется уровнем мощности упругой волны  $P_a$ , акустооптической добротностью  $M_2$  среды акустооптического взаимодействия, соотношениями размеров акустического столба  $L / H$ .

Рассмотрим соотношения (2) и (3). Разложим  $J_1(\Delta\varphi)$  и  $\sin(0,5\Delta\varphi)$  в степенной ряд:

$$J_1(\Delta\varphi) = 0,5\Delta\varphi - (0,5\Delta\varphi)^3 / (1!2!) + (0,5\Delta\varphi)^5 / (2!3!) - (0,5\Delta\varphi)^7 / (3!4!) + \dots, \quad (6)$$

$$\sin(0,5\Delta\varphi) = 0,5\Delta\varphi - (0,5\Delta\varphi)^3 / 3! + (0,5\Delta\varphi)^5 / 5! - (0,5\Delta\varphi)^7 / 7! + \dots, \quad (7)$$

Учитывая (6) и (7), построим общий ряд разложения вида:

$$G(\Delta\varphi) = 0,5\Delta\varphi - \gamma_3(\Delta\varphi)^3 + \gamma_5(\Delta\varphi)^5 - \gamma_7(\Delta\varphi)^7 + \dots \quad (8)$$

Критерием различимости режимов дифракции при акустооптическом взаимодействии, является параметр Клейна-Кука [5]:  $Q_{KK} = 2\pi L \lambda / \Lambda^2$ . Согласно [5], при  $Q_{KK} \leq 0,3$  – наблюдается дифракция Рамана-Ната, при  $Q_{KK} \geq 4\pi$  – дифракция Брэгга. Область значений  $0,3 < Q_{KK} < 4\pi$  соответствует промежуточному режиму дифракции. Вычисления показывают, что при  $Q_{KK} = 0,5$ ,  $0 \leq \Delta\varphi \leq 3$  и значениях коэффициентов

$\gamma_i$ , определяемых согласно графику (рис. 2):

$|[0,5\Delta\varphi - \gamma_3(\Delta\varphi)^3 + \gamma_5(\Delta\varphi)^5] - J_1(\Delta\varphi)| \leq 0,03$  – кривая 1, а при  $Q_{KK} = 15$ ,  $0 \leq \Delta\varphi \leq 3$ :

$|[0,5\Delta\varphi - \gamma_3(\Delta\varphi)^3 + \gamma_5(\Delta\varphi)^5] - \sin(0,5\Delta\varphi)| \leq 0,015$  – кривая 2.

Таким образом, с достаточной для технических расчетов точностью (погрешность составляет единицы процента) члены ряда (8) описывают амплитудную характеристику АОЯ в режимах дифракции Рамана-Ната и Брэгга, причем это возможно, если параметр Клейна-Кука соответствует  $0,5 < Q_{KK} < 12$ .

Учитывая, что при выводе (2) и (3) делались определенные допущения, утверждение (8) подверглось экспериментальной проверке. Были изготовлены две акустооптические ячейки, с условными названиями АОЯ-1 и АОЯ-2. В качестве среды акустооптического взаимодействия в АОЯ-1 использовалось стекло СТФ-2 ( $n_0 = 2,06$ ;  $V = 3500$  м/с;  $M_2 = 20 \cdot 10^{-15}$  с<sup>3</sup>/кг), продольные акустические волны в которой возбуждались электроакустическим преобразователем из ниобата лития ( $L = 7$  мм,  $H = 2$  мм) в диапазоне  $30 \leq \Omega \leq 80$  МГц. Средой акустооптического взаимодействия в АОЯ-2 служил монокристаллический кварц ( $n_0 = 1,553$ ;  $V = 5720$  м/с;  $M_2 = 2,4 \cdot 10^{-15}$  с<sup>3</sup>/кг), в котором акустическая волна распространялась вдоль кристаллографического направления X, а когерентная световая волна – вдоль Z.

На рис. 3 сплошные линии соответствуют расчетным, кривая 3 – амплитудно-частотная характеристика (АЧХ) акустооптического взаимодействия в АОЯ-1 при нормальном падении плоской когерентной волны на область акустооптического взаимодействия ( $\Theta_i = 0$ ); кривая 2 – АЧХ в +1 дифракционном порядке АОЯ-1 при  $\Theta_i = 0,003$  рад; кривая 1 – АЧХ в -1 дифракционном порядке при  $\Theta_i = 0,003$  рад; кривая 4 – АЧХ акустооптического взаимодействия в АОЯ-2, при нормальном падении света; кривая 5 – АЧХ акустооптического взаимодействия в +1 дифракционном порядке при  $\Theta_i = 0,006$  рад.

Макет АОЯ-1 показан на рис. 4. На рис. 5. представлены амплитудные ее характеристики.

Измерения производились при:  $Q_{KK} = 2$  ( $\Omega = 45$  МГц) – кривая 1;  $Q_{KK} = 3$  ( $\Omega = 50$  МГц) – кривая 2;  $Q_{KK} = 4$  ( $\Omega = 62$  МГц) – кривая 3. Погрешности измерений АЧХ и амплитудной характеристики не превышали 10 %.

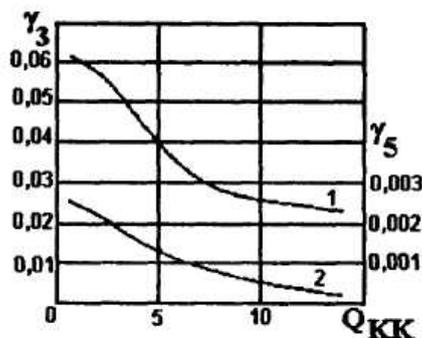


Рис. 2. График зависимости коэффициентов разложения ряда (8), как функции параметра Клейна-Кука

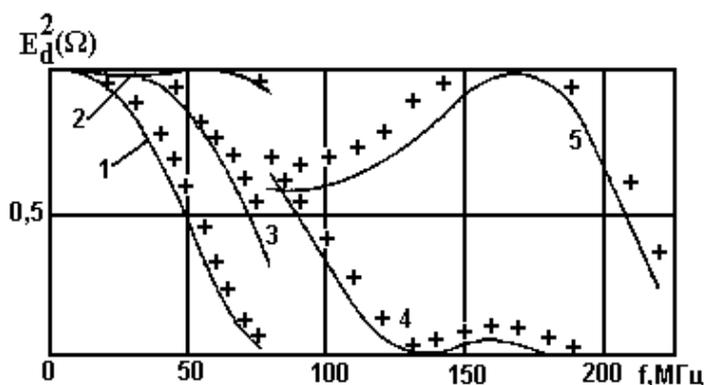


Рис. 3. Амплитудно-частотные характеристики акустооптического взаимодействия в АОЯ-1 и АОЯ-2

Сравнение расчетных и экспериментальных характеристик АОЯ показывает, что соотношение (8) может использоваться для определения амплитудных характеристик АОЯ при условии  $0,5 < Q_{KK} < 12$ , причем как для режима дифракции Рамана-Ната, так и Брэгга амплитудная характеристика акустооптического взаимодействия при индексах фазовой модуляции  $\Delta\varphi \leq 1$  может быть аппроксимирована выражением:

$$I_d = I_i(0,5\Delta\varphi)^2,$$

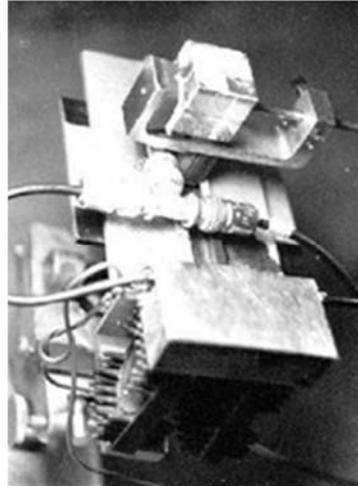


Рис. 4. Макет акустооптической ячейки АОЯ-1

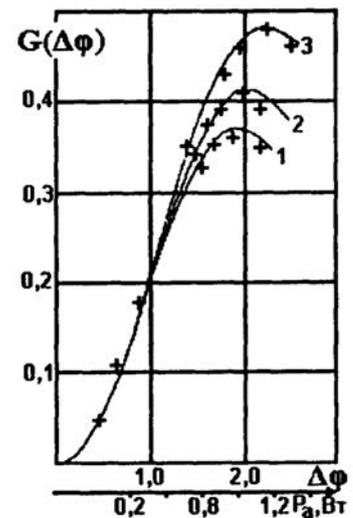


Рис. 5. Амплитудная характеристика АОЯ-1

где  $I_d$  и  $I_i$  – соответственно интенсивности дифрагированного и падающего пучков.

**Гомоморфность преобразования радиосигнала** акустооптической ячейкой рассмотрим на следующем примере. Пространственно-временной акустический сигнал в апертуре  $D$  (рис. 1), соответствующий входному радиосигналу  $s(t)$ , представим в виде:

$$e_p(z, Vt) = p(z)\mu(Vt - z),$$

где  $p(z) = \begin{cases} 1, & |z| \leq D/2 \\ 0, & |z| > D/2 \end{cases}$  – весовая функция, определяемая апертурой  $D$ . Преобразованием Фурье функции  $e_p(z, Vt)$  получим:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e_p(z, Vt) e^{-j\Omega_z z} dz = \int_{-\infty}^{\infty} p(z)\mu(Vt - z) e^{-j\Omega_z z} dz,$$

где  $\Omega_z = -\Omega/V$  – пространственная частота [10],  $\Omega$  – частота упругой волны.

Сделаем замену переменной вида  $\int_{-\infty}^{\infty} e_p(z, Vt) dz = e^{-j\Omega_z Vt} \int_{-\infty}^{\infty} p(z)\mu(Vt - z)\mu(x) e^{-j\Omega_z x} dx$ .

В соответствии с [12]  $\int_{-\infty}^{\infty} p(z)\mu(Vt - z)\mu(x) e^{-j\Omega_z x} dx$  – аналог интеграла, определяющего мгновенный спектр. Тогда:

$$R_D(\Omega_z, Vt) = \int_{-\infty}^{\infty} p(Vt - x)\mu(x) e^{-j\Omega_z x} dx,$$

по аналогии, принятой в электронной технике, назовем спектром пространственных частот (пространственный мгновенный спектр) зеркального изображения сигнала частот (пространственный мгновенный спектр), зеркального изображения сигнала  $\mu(x)$ . Перепишем  $R_D(\Omega_z, Vt)$ , в виде:

$$R_z(\Omega_z, Vt) = \int_{-\infty}^{\infty} p(z)\mu(Vt-z)e^{-j\Omega_z(Vt-z)} dz .$$

Реализуя обратное преобразование Фурье от обеих частей  $R_z(\Omega_z, Vt)$ , получим выражение вида:

$$p(z)\mu(Vt-z) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} R_D(\Omega_z, Vt)e^{-j\Omega_z(Vt-z)} d\Omega_z .$$

Данное соотношение определяет пространственный сигнал в апертуре АОЯ, как совокупность гармонических волн вида  $e^{-j\Omega_z(Vt-z)}$ . Используя теорему о спектре произведения двух функций, выразим пространственный мгновенный спектр через пространственные спектры сигнала и весовой функции [8,12]:

$$R_D(\Omega_z, Vt) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} R^*(\Omega'_z) \dot{P}(\Omega_z - \Omega'_z) e^{j(\Omega_z - \Omega'_z)Vt} d\Omega'_z ,$$

где пространственный спектр весовой функции  $\dot{P}(\Omega_z) = 2 \sin \Omega_z \frac{D}{2} / \Omega_z$ ,  $R^*(\Omega'_z)$  – комплексно – сопряженный пространственный спектр сигнала  $\mu(x)$ . Представим  $R_D(\Omega_z, Vt)$ , в виде :

$$R_D(\Omega_z, Vt) = (1/\pi) \int_{-\infty}^{\infty} R^*(\Omega'_z) \frac{\sin(\Omega_z - \Omega'_z)(D/2)}{\Omega_z - \Omega'_z} e^{j(\Omega_z - \Omega'_z)Vt} d\Omega'_z .$$

Откуда следует выражение:

$$p(z)\mu(Vt-z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-j\Omega_z(Vt-z)} d\Omega_z = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R^*(\Omega'_z) \frac{\sin(\Omega_z - \Omega'_z)(\frac{D}{2})}{\Omega_z - \Omega'_z} e^{j(\Omega_z - \Omega'_z)Vt} d\Omega'_z ,$$

определяющее пространственно-временной сигнал в апертуре идеализированной акустооптической ячейки (плоские взаимодействующие акустическая и световая волны, отсутствует затухание акустической волны).

Электроакустический преобразователь АОЯ можно рассматривать как линейный четырехполюсник [13], в котором входным является радиосигнал, выходным - акустический сигнал, имеющий соответствующий коэффициент передачи  $K_{ЭАП}(j\Omega)$ . В соответствии с [12], если для  $s(t)$ , известна его спектральная плотность  $\dot{s}(\Omega)$ , то:

$$P(\Omega_z) = \dot{s}(\Omega_z) K_{ЭАП}(j\Omega_z) .$$

В реальных средах акустооптического взаимодействия существует затухание акустической волны, т. е. пространственно-временной сигнал в апертуре АОЯ содержит совокупность волн вида  $e^{\alpha(\Omega_z)z} e^{-j\Omega_z(Vt-z)}$ . С учетом этого реальный пространственно-временной сигнал в апертуре АОЯ, можно представить в виде:

$$p(z)s(V, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(\Omega_z)z} e^{-j\Omega_z(Vt-z)} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \dot{s}(\Omega'_z) K_{ЭАП}(\Omega'_z) \frac{\sin(\Omega_z - \Omega'_z)(\frac{D}{2})}{\Omega_z - \Omega'_z} e^{j(\Omega_z - \Omega'_z)Vt} d\Omega'_z . \quad (9)$$

Найдем мгновенный спектр пространственных частот пространственно-временного сигнала (9) в апертуре АОЯ:

$$R_D(\Omega_z, z, Vt) = \frac{1}{\pi} e^{-\alpha(\Omega_z)z} \int_{-\infty}^{\infty} s(\Omega'_z) K_{\text{АП}}(\Omega'_z) \frac{\sin(\Omega_z - \Omega'_z)(\frac{D}{2})}{\Omega_z - \Omega'_z} e^{j(\Omega_z - \Omega'_z)Vt} d\Omega'_z, \quad (10)$$

причем:

$$p(z)s(Vt, z) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} R_D(\Omega_z, z, Vt) e^{-j\Omega_z(Vt-z)} d\Omega_z, \quad (11)$$

– пространственно-временной сигнал в апертуре АОЯ.

**Выводы.** Таким образом, следствием акустооптического взаимодействия в режимах дифракции Рамана-Ната, Брэгга и промежуточном является фазовая модуляция выходного лазерного излучения. Амплитудная характеристика акустооптического взаимодействия в режиме дифракции Рамана-Ната определяется выражением (2), в режиме Брэгга - соотношением (3).

Ширина полосы акустических частот (частотная характеристика) акустооптического взаимодействия, при которой реализуется режим дифракции Брэгга, соответствует выражению (7).

Индекс фазовой модуляции, информационной технологии акустооптического взаимодействия, численно равный  $\Delta\varphi \leq 1$ , может быть использован как критерий гомоморфности преобразований информации при слабом АОВ.

Информационная технология преобразования радиосигналов при акустооптическом взаимодействии, предполагает, что радиосигнал временной природы сначала преобразуется в акустический аналог пространственно-временной природы, а затем - в выходной световой аналог пространственно-временной природы (9), (10), причем существует жесткая связь между частотой радиосигнала и пространственной частотой его светового аналога (11).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lucas R. Optical properties of solids and liquids, under ultrasonic vibrations / R. Lucas, P. Biquard // Journ. Phys. Rad. – 1932. – Vol. 3. – P. 464-472.
2. Debye P. On the scattering of light by supersonic waves / P. Debye, F. Sears // Proc. Nat. Acad. Sciences. – 1932. – Vol. 18. – P. 409-413.
3. Raman C.V. The diffraction of light by high frequency sound waves / C.V. Raman, N.S.N Nalh // Proc. Indian Acad. Sciences. – 1936. – Vol. 92. – P.406-420.
4. Рытов С.М. Дифракция света на ультразвуковых волнах / С.М. Рытов // Изв. АН СССР. Сер. Физика. – № 2. – С. 222-242.
5. Klein W.R. Unified approach to ultrasonic light diffraction / W.R. Klein, B.D. Cook // IEEE Trans. – 1967. – SU-14. No. 3. – P. 123-134.
6. Балакший В.И. Физические основы акустооптики / В.И. Балакший, В.Н. Парыгин, Л.Е. Чирков. – М.: Радио и связь, 1985. – С. 224-240.
7. Данилов В.В. Классификационный анализ устройств управления лазерным пучком / В.В. Данилов // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2000. – № 2-3. – С. 52-57.
8. Анго А. Математика для электро- и радиоинженеров / А. Анго. – М.: Наука, 1965. – 772 с.
9. Ультразвуковые преобразователи для неразрушающего контроля / Под ред. И.Н. Ермолова. – М.: Машиностроение, 1986. – 356 с.
10. Ярив А. Введение в оптическую электронику / А. Ярив. – М.: Высш. школа, 1983. – 398 с.
11. Най Д. Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц / Д. Най. – М.: Мир, 1967. – 386 с.

12. Харкевич А.А. Спектры и анализ / А.А. Харкевич. – М.: Гостехиздат, 1953. – 236 с.  
13. Данилов В.В. Моделирование акустически нагруженного пьезопреобразователя акустооптической ячейки / В.В. Данилов, С.В. Иванов // Радиотехника. – 2000. – № 115. – С. 66-70.

Поступила в редакцию 18.04.2016 г.

## OPTICAL INFORMATION TECHNOLOGIES. TRANSFORMATION OF RADIO SIGNALS

*I. Tretyakov, M. Pavlov, T. Tiebienieva, V. Danilov*

The article gives the results of optical information technology's research, in particular, transformation of radio signals in their laser analogies with minimum garbling by using acousto-optical interaction

**Keywords:** homomorphy, acousto-optical interaction, acousto-optic cell, diffraction, The Klein-Cook parameter.

**Третьяков Игорь Александрович**

Донецкий национальный университет, г. Донецк  
Аспирант  
es75i@mail.ru

**Павлов Максим Леонидович**

Донецкий национальный университет, г. Донецк  
Студент  
maksim-pavlov199294@mail.ru

**Тебенева Татьяна Сергеевна**

Донецкий национальный университет, г. Донецк  
Студентка  
tetasia19@gmail.com

**Данилов Владимир Васильевич**

Доктор технических наук, профессор  
ut5iv@mail.ru  
Контактный телефон: +38 066 605 67 62

**Tretyakov Igor**

Donetsk National University, Donetsk  
Postgraduate

**Pavlov Maxim**

Donetsk National University, Donetsk  
Student

**Tiebienieva Tetiana**

Donetsk National University, Donetsk  
Student

**Danilov Vladimir**

Donetsk National University, Donetsk  
Doctor of Engineering Sciences, Full Professor

УДК 004.932.75'1

## РАСПОЗНАВАНИЕ ТЕКСТА В ЗАШУМЛЕННЫХ ИЗОБРАЖЕНИЯХ СКАНИРОВАННЫХ ДОКУМЕНТОВ

© 2016. Т.В. Шарий, Р.О. Лялин, А.Е. Гукай, В.Н. Котенко

В настоящее время по-прежнему актуальна проблема перевода сканированных документов относительно низкого качества в текстовый формат. В статье предлагается робастный метод распознавания текстовых символов в зашумленных изображениях. Описаны алгоритмы, применяемые для очистки изображения от шумов, выделения контуров текстовых областей, сегментации текста по буквам. Приведены результаты экспериментов по распознаванию текста на основе статистической модели машин опорных векторов.

**Ключевые слова:** OCR, машинное обучение, медианный фильтр, бинаризация, сегментация.

**Введение.** Оптическое распознавание символов (Optical Character Recognition, OCR) [1–4] остается на протяжении многих лет актуальной задачей с точки зрения как бизнеса, так и развития научно-технического направления компьютерного зрения. Суть OCR-процесса состоит, прежде всего, в переводе цифровых изображений в другие цифровые форматы, более подходящие для редактирования, поиска, реферирования информации, а именно: непосредственно текст и метаданные о документе (количество слов, абзацев, таблиц, подписей и т.д.). С каждым годом число изображений на локальных компьютерах и в сети интернет стремительно растет, и все больше документов нуждается в оцифровке и постобработке. В данном контексте OCR является элементом передового направления разработок в современной IT-сфере – «больших данных» (Big Data and Data Science), в рамках которого большие объемы данных должны эффективно храниться и подготавливаться для оперативного анализа. Также к вариантам применения OCR можно отнести: автоматический ввод данных из бланков разного рода в компьютер, автоматическое распознавание автомобильных номеров, программы-помощники для лиц с нарушениями зрения и др.

В настоящее время существуют программные решения для распознавания текста в изображениях и преобразования форматов файлов, среди которых следует отметить коммерческие приложения [5]: OmniPage, Adobe Acrobat, ABBYY FineReader, ReadIris, PowerPDF, SodaPDF. Точность распознавания текста в лучших из них достигает 97–99 % для качественных сканов документов. Тем не менее, ряд проблем значительно ухудшает качество OCR даже самых эффективных программ. Эти проблемы вызваны искажением изображений фоновым шумом (пятна от чашек с кофе, завернутые уголки, следы от скрепок и т.д.), возможным поворотом текста, вариабельностью цветов и начертаний шрифтов, языков. Таким образом, предварительная обработка зашумленного сканированного изображения выходит на первый план в современных информационных технологиях хранения и обработки цифровых документов.

**Постановка задачи.** Целью данной работы является разработка и исследование робастного метода распознавания текста в изображениях отсканированных документов, содержащих шумы. Для визуализации и автоматизации проведения исследований необходимо создать соответствующий программный инструментарий. В статье акцент делается на предварительной цифровой обработке изображения. Этап распознавания также рассмотрен, однако подробный анализ и разработка статистических моделей машинного обучения, применяемых на этом этапе, является предметом дальнейших исследований.

**Цифровая обработка зашумленного сканированного изображения.** В статье за основу взята типовая схема процесса OCR, включающая блок предварительной обработки скана документа и блок распознавания символов. В первом блоке решаются следующие задачи (рис. 1):

- 1) фильтрация шумов и удаление фона;
- 2) бинаризация изображения;
- 3) идентификация текстовой области документа;
- 4) поворот текстовой области при необходимости (выравнивание документа);
- 5) сегментация (горизонтальная сегментация по строкам текста и вертикальная сегментация по символам).



Рис. 1. Схема OCR

Вся описываемая далее цифровая обработка производится над изображением документа в шкале серого цвета с нормированными значениями пикселей. На первом этапе в работе производится медианная фильтрация. Медианный фильтр является распространенным простым средством удаления импульсных шумов в сигнале. Данный фильтр представляет собой нелинейный низкочастотный фильтр, заменяющий значение каждого пикселя изображения медианным значением пикселей из его окрестности, подавляя, таким образом, выбросы:

$$y[m, n] = \text{median} \{x[i, j], (i, j) \in \omega_N\},$$

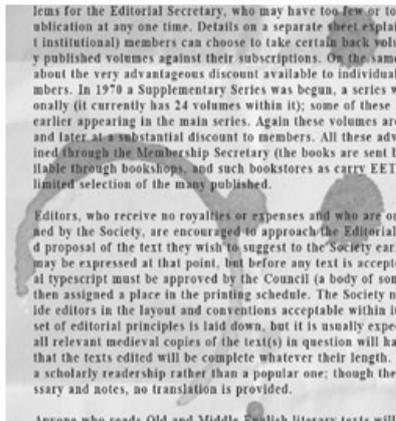
где  $x$  – исходное изображение;  $y$  – отфильтрованное изображение;  $m, n$  – координаты текущего центрального пикселя;  $\omega_N$  – окрестность пикселя размера  $N$ .

Результатом медианной фильтрации является изображение, которое можно считать фоном, т.к. данная операция сохраняет медленно меняющиеся признаки и удаляет высокочастотные компоненты изображения, представленные самим текстом. Таким образом, для получения текста можно вычистить изображение фона из исходного изображения скана или оставить только те пиксели, цвет которых темнее фона. При этом, в работе, по аналогии с предложенным в [6] алгоритмом, используется также некоторый порог для уменьшения влияния шумов и отбрасывания незначительных для текста пикселей:

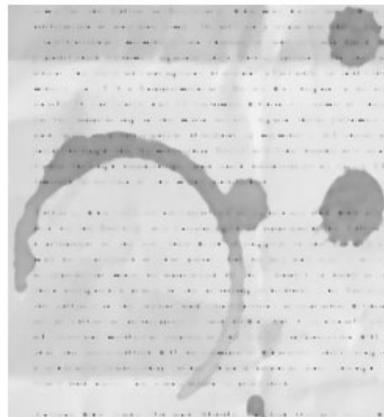
$$t[m, n] = \begin{cases} x[m, n], & \text{если } x[m, n] < y[m, n] - \delta_S \\ 1.0, & \text{иначе} \end{cases},$$

где  $t$  – результирующее изображение, содержащее текст;  $m, n$  – координаты текущего пикселя;  $\delta_S$  – порог вычитания. Экспериментально подобраны значения параметров  $N = 7$  и  $\delta_S = 0.1$ , при которых текст на тестовых сканах документов субъективно воспринимается наиболее отчетливо.

Результаты для двух изображений с текстом приведены на рис. 2. На рис. 2, а и 2, г показаны сканы документов, на рис. 2, б и 2, д – фон как результат работы медианного фильтра, на рис. 2, в и 2, е – разность изображения и фона, являющаяся искомым текстом.



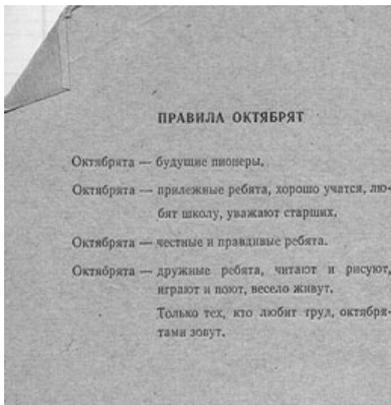
а



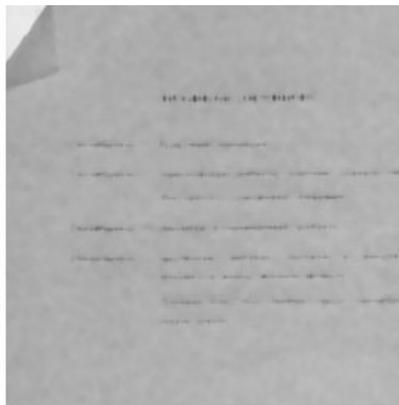
б



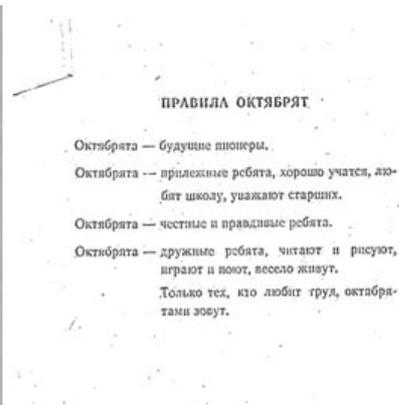
в



г



д



е

Рис. 2. Примеры результатов медианной фильтрации сканированных изображений: а) тестовое изображение №1; б) выделенный фон в изображении №1; в) выделенный текст в изображении №1; г) тестовое изображение №2; д) выделенный фон в изображении №2; е) выделенный текст в изображении №2

Следующим шагом при цифровой обработке изображения документа является его бинаризация. В работе используется следующий алгоритм бинаризации:

1. Изображение фильтруется с помощью гауссовского фильтра с ядром размером  $L = 11$  пикселей и стандартным отклонением  $\sigma = 2$ :

$$G[m, n] = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{m^2 + n^2}{2\sigma^2}\right).$$

2. В отфильтрованном изображении рассчитывается порог для бинаризации на основе алгоритма Оцу [7]. Алгоритм позволяет вычислить на основе гистограммы

изображения оптимальный глобальный порог для разделения всех пикселей на бинарные группы.

- По результатам сравнения с порогом, вычисленным на шаге 2, пикселям изображения присваивается значение 0 или 1 (черный или белый цвет).

Приведенный алгоритм позволяет улучшить качество бинаризации по сравнению со стандартным глобальным алгоритмом Оцу за счет удаления лишних теней.

Далее в бинарном изображении осуществляется идентификация области, содержащей текст. В большинстве случаев этой областью является абзац. Для этих целей применяется алгоритм выделения контуров, предложенный в [8]. Алгоритм относится к классу алгоритмов следования границам (Border following), позволяет отслеживать как внешние, так и внутренние границы, и может быть использован для широкого круга задач топологического анализа изображений. Об эффективности алгоритма говорит, в частности, тот факт, что он реализован в функции `findContours` популярной библиотеки компьютерного зрения OpenCV [9]. Пример результата выделения границ текстовых областей приведен на рис. 3.

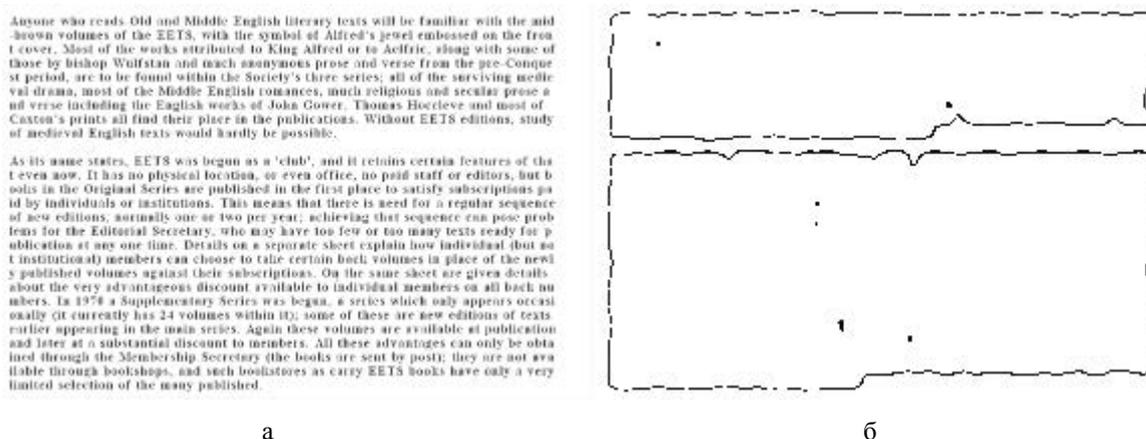


Рис. 3. Пример результатов выделения текстовых областей:  
а) исходное изображение; б) выделенные контуры текстовых областей

Важной частью предлагаемого метода распознавания текста в зашумленных сканах документов является обнаружение наклона и поворот выделенной текстовой области. Для этого в работе на основе координат левого верхнего, правого верхнего, левого нижнего и правого нижнего пикселей контура текстовой области определяется угол наклона и производится поворот области на найденный угол (преобразование на основе стандартной матрицы поворота).

Завершающим шагом цифровой обработки изображения сканированного документа перед распознаванием символов является сегментация. В качестве единицы распознавания выбрана буква как алфавитная единица любого естественного языка, а также двухбуквенные сочетания, которые в данной статье не рассматриваются и являются предметом дальнейших исследований. В связи с этим, необходимо разделять абзацы сначала на строки (горизонтальная сегментация), а затем на буквы (вертикальная сегментация). При горизонтальной сегментации в каждой строке пикселей изображения вычисляется среднее значение пикселей, и если оно превышает пороговое значение, то полагается, что текущая линия принадлежит пустой области, разделяющей строки текста. Термин «строка пикселей» необходимо отличать от термина «строка текста». Первый относится к изображению, второй – к распознаваемому тексту на изображении. На рис. 4 приведен при-

мер результата алгоритма построчной сегментации (слева расположены графики средних значений пикселей по строкам пикселей; белый цвет имеет максимальное значение).

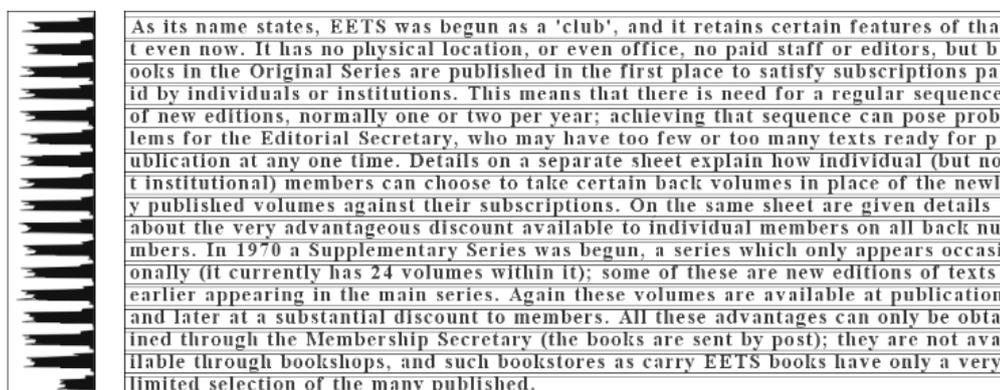


Рис. 4. Пример результата алгоритма построчной сегментации

При вертикальной (побуквенной) сегментации вычисляется среднее значение пикселей столбцов в каждом столбце участка строки текста, выделенной ранее. На рис. 5 приведен пример результата такой побуквенной сегментации (вверху указан график средних значений пикселей по столбцам пикселей).

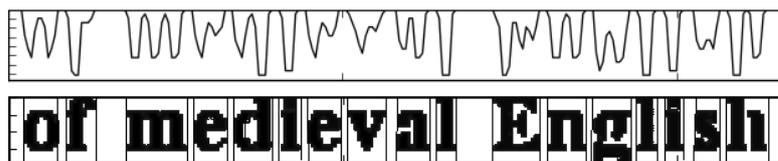


Рис. 5. Пример результата алгоритма побуквенной сегментации

В данном случае также осуществляется сравнение с порогом, которого в ряде случаев оказывается достаточно. Однако при артефактах изображения, не удаленных на предыдущих этапах предобработки, алгоритм может давать ложные срабатывания. В связи с этим, в работе вводится еще адаптивный порог разности между соседними темными пикселями в столбцах, благодаря которому отсеиваются случайные темные пиксели в выделенной строке, а сохраняются только относительно плотно прилегающие друг к другу символы.

**Распознавание текстовых символов.** На этапе распознавания текстовых символов традиционно применяются статистические модели и методы машинного обучения. Данные модели сначала обучаются на большом количестве изображений образцов символов, представляющих обучающую выборку, после чего могут быть использованы для решения задач классификации и регрессии, в частности, для распознавания текста. Также в последнее время наблюдается тенденция использования моделей машинного обучения и на этапе цифровой обработки сигнала. На текущем этапе работы детальный анализ моделей машинного обучения не производится. Тем не менее, проведены предварительные эксперименты по распознаванию текста на основе машин опорных векторов (Support Vector Machine, SVM) [10, 11].

Алгоритм обучения SVM находит среди элементов обучающей выборки векторы, лежащие на границе двух разделяемых подмножеств и строит между этими векторами гиперплоскость, максимально разделяющую входные образы в пространстве признаков. В терминах SVM это опорные векторы.

Решающая функция классификатора SVM задана формулой:

$$h(x) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{i=1}^m \lambda_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) - \omega_0\right),$$

где  $\lambda_i$  и  $\omega_0$  – коэффициенты;  $\mathbf{x}_i$  и  $y_i$  – входной вектор и соответствующее ему значение (0 или 1) из обучающей выборки, соответственно;  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})^T \varphi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$  – ядро. Функция ядра служит для того, чтобы отображать входной вектор в пространство более высокой размерности, в котором, согласно теореме Ковера [11], вероятность разделимости образов повышается. В работе в качестве ядра применяются так называемые радиально-базисные функции:

$$\varphi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \exp(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2), \quad \gamma > 0 \quad (1)$$

Обучение SVM заключается в нахождении коэффициентов  $\lambda_i$  и  $\omega_0$ . Для этого решается задача квадратичной оптимизации с ограничениями:

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \lambda_i \lambda_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \rightarrow \max_{\lambda},$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0, \\ 0 \leq \lambda_i \leq C; \quad C > 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \end{cases} \quad (2)$$

Константы  $\gamma$  и  $C$  в формулах (1) и (2), соответственно, являются свободными параметрами модели и задаются пользователем. Наиболее часто параметр  $\gamma$  в случае радиально-базисных функций устанавливается в диапазоне  $[0.0001, 0.1]$ , параметр  $C$  – в диапазоне  $[1, 100]$ .

Отдельная SVM решает задачу бинарной классификации, т.е. способна разделить образы по принципу «свой-чужой». В случае текстовых символов число выходных образов соответствует числу букв в тестовом алфавите, поэтому в работе модель SVM расширяется на случай мультиклассовой классификации путем композиций автономных SVM, принимающих для каждого символа решение по типу «один против остальных».

Для решения задачи, рассматриваемой в статье, SVM обучаются и тестируются на буквах из алфавита английского языка. В тестовых сканах документов используются шрифты со сходным начертанием символов. При формировании вектора признаков для SVM двумерный образ сегментированного символа масштабируется к размеру 20x20 пикселей, центрируется и преобразовывается в одномерный вектор размерности 400 пикселей. Отметим, что это простейший способ представления символа. В дальнейшем планируется исследовать более эффективные и компактные способы описания символа на основе специальных дескрипторов изображения: гистограмм ориентированных градиентов (HOG), признаков SURF и др.

**Подготовка эксперимента и анализ результатов.** Информационная технология распознавания текста в зашумленных сканах документов основывается на методе, описанном в статье, и специально разработанном инструментальном комплексе TextRecognizer. Программный комплекс представляет собой пакет модулей на языке Python: denoising.py (очистка изображения от шумов), segmentation.py (сегментация), train.py

(обучение SVM) и recognize.py (распознавание текста). Модули опираются на внешние зависимости: библиотеки numpy, scikit-image и cv2 для цифровой обработки изображений, scikit-learn для машинного обучения.

Методология работы с инструментальным комплексом предполагает следующий набор действий:

- 1) подготовка конфигурационного файла в формате json, в котором указываются настраиваемые параметры всех алгоритмов, применяемых в системе;
- 2) подготовка директории train с файлами изображений (формат png, jpg или bmp) для обучения, директории test с файлами изображений для тестов и файлами с соответствующим текстом из каждого документа;
- 3) обучение SVM: система в автоматическом режиме работает с каталогом train; после сегментации исследователь уточняет каждый полученный символ для корректного обучения; обученная SVM сохраняется в служебном файле;
- 4) пакетное распознавание: система запускает SVM, загруженную из служебного файла, на тестовых данных, которые она извлекает из каталога test.

Для эксперимента была обучена модель SVM на выборке из 12274 букв, выделенных в 25 изображениях. Среди изображений присутствовали, в том числе, тексты, на которые накладывались шумы в графическом редакторе искусственным путем. Тестовая выборка включала 10 документов с 4106 буквами. Свободные параметры модели выбирались с помощью методологии Grid Search (перебор всех сочетаний коэффициентов из определенных вариантов): параметр  $\gamma$  – из списка [0.0001, 0.001, 0.01, 0.1], параметр  $C$  – из списка [1, 10, 25, 50, 100]. Результаты распознавания текста варьируются от 72 % до 98 % для отдельных документов из тестовой выборки. Средний процент точности распознавания составил 87 %. Лучшие результаты ожидаемо демонстрируются на документах с меньшим шумом, более разборчивым текстом и более крупными символами.

**Выводы.** Проблема распознавания текста в зашумленных изображениях остается актуальной и нуждается в решении. Как видно из приведенных в статье иллюстраций, медианная фильтрация позволяет достаточно хорошо определять фон некачественно отсканированного документа для дальнейшей очистки. Алгоритм сегментации, предложенный и описанный в работе, позволяет с высокой точностью выделять строки с текстом и, с меньшей точностью, фрагменты изображения, содержащие буквы. Вариативность начертания шрифтов и размеров символов, «склеивание» букв, остаточные шумы после первых шагов предобработки изображения – все эти факторы затрудняют как сегментацию, так и распознавание отдельных символов. Смягчить влияние указанных факторов можно в следующих направлениях: использовать в качестве образца, помимо буквы еще двухбуквенные и, возможно, трехбуквенные сочетания (слова для этой цели не подходят ввиду слишком большого числа вариантов); выполнять дополнительную постобработку символа в виде расчета специальных дескрипторов (HOG, SURF и др.). На этапе распознавания символов использовались машины опорных векторов. Результаты распознавания колебались для разных параметров SVM, документов и шрифтов в пределах 72–98 %.

Дальнейшая работа связана также с применением и детальным анализом в задаче распознавания текста других эффективных статистических моделей машинного обучения, помимо SVM, таких как: классификатор методом  $k$  ближайших соседей, классификатор на основе случайного леса, сверточные нейронные сети и нейронные сети с глубоким обучением.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pai N. Optical Character Recognition: An Encompassing Review / N. Pai, V.S. Kolkure // International Journal of Research in Engineering and Technology. – 2015. – Vol. 4. – P. 407-409.
2. Drinkwater R. The use of Optical Character Recognition (OCR) in the digitisation of herbarium specimen labels / R. Drinkwater, R. Hubey, E. Haston // PhytoKeys. – 2014. – Vol. 38. – P. 15-30.
3. Marinai S. Machine Learning in Document Analysis and Recognition / S. Marinai, H. Fujisawa. – Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2008. – 433 p.
4. Huang G. Bounding the Probability of Error for High Precision Optical Character Recognition / G. Huang, A. Kae, C. Doersch // The Journal of Machine Learning Research. – 2012. – Vol. 13 (1). – P. 363-387.
5. The Best OCR Software of 2016 / URL: <http://ocr-software-review.toptenreviews.com/> / 19.02.2016.
6. Dokov R. Background Removal Script in Python / URL: <https://www.kaggle.com/rdokov/denoising-dirty-documents/background-removal/> / 05.06.2015.
7. Xu C. Fast Algorithm for 2D Otsu Thresholding Algorithm / C. Xu, G. Peng // Journal of Computer Applications. – 2013. – Vol.32 (5). – P. 1258-1260.
8. Suzuki S. Topological Structural Analysis of Digitized Binary Images by Border Following / S. Suzuki, K. Abe // Computer Vision, Graphics and Image Processing. – 1985. – Vol. 30. – P. 32-46.
9. Minichino J. Learning OpenCV3 Computer Vision with Python / J. Minichino, J. Howse. – Packt. Publishing, 2015. – 266 p.
10. Steinwart I. Support Vector Machines / I. Steinwart, A. Christmann. – New York: Springer-Verlag, 2008. – 601 p.
11. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс / С. Хайкин. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2008. – 1102 с.

*Поступила в редакцию 23.03.2016 г.*

## TEXT RECOGNITION IN NOISY IMAGES OF SCANNED DOCUMENTS

*T.V. Sharii, R.A. Lialin, A.Ye. Gukai, V.N. Kotenko*

The problem of transforming scanned documents of a relatively poor quality into text is still relevant today. The article offers a new robust method for recognizing text symbols in noisy images. The algorithms are described that have been applied for image de-noising, paragraph detection and letter segmentation. The results of text recognition experiments based on a Support Vector Machine statistical model are given.

**Keywords:** OCR, machine learning, median filter, binarization, segmentation.

### **Шарий Тимофей Вячеславович**

кандидат технических наук, доцент, [tsphere@mail.ru](mailto:tsphere@mail.ru)

### **Лялин Роман Олегович**

студент, [bumagniyapacket@yandex.ru](mailto:bumagniyapacket@yandex.ru)

### **Гукай Алексей Евгеньевич**

старший преподаватель, [exxxar@gmail.com](mailto:exxxar@gmail.com).

### **Котенко Владислав Николаевич**

старший преподаватель, [kotenko1967@gmail.com](mailto:kotenko1967@gmail.com)

ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк

Тел. для контактов: +38 (050) 769-61-79

### **Sharii Timofei Viacheslavovich**

Candidate of Engineering Sciences, associate professor

### **Lialin Roman Olegovich**

student

### **Gukai Aleksei Yevgenievich**

senior lecturer

### **Kotenko Vladislav Nikolaevich**

senior lecturer

Donetsk National University, Donetsk.

УДК 541.128:546.92

**К ВОПРОСУ О РОЛИ ДИМЕТИЛФОРМАМИДА И МЕХАНИЗМЕ  
РЕАКЦИЙ С-С СОЧЕТАНИЯ АРИЛИОДИДОВ В СИСТЕМЕ  
ДИМЕТИЛФОРМАМИД –  $K_2PtCl_4$  – ArI**

© 2016. Т.В. Безбожная

Проанализированы альтернативные механизмы участия диметилформаида в катализируемом комплексами платины сочетании арилиодидов. Имеются основания полагать, что стадийный механизм реакций С-С-сочетания арилиодидов включает стадию восстановления  $ArPt^{IV}$  – продукта окислительно-го присоединения арилиодида к комплексу платины (II) – муравьиной кислотой, образующейся в системе в результате гидролиза диметилформаида, с генерированием активной частицы  $ArPt^{II}$ .

**Ключевые слова:** арилиодиды; реакции С-С сочетания; комплексы платины; диметилформаид.

**Введение.** В настоящее время важное место среди продуктов нефтехимического синтеза занимают бифенилы, востребованность которых на рынке высокотехнологической продукции достаточно велика. Так 4,4'-замещенные бифенилы являются предшественниками жидкокристаллических материалов [1], потребление которых неуклонно растет, соединения с бифенильными фрагментами рассматриваются в качестве кандидатов для производства молекулярных транзисторов [2], в области нанотехнологий – для получения нанопроводников [3], являются необходимой составляющей многих самоорганизующихся систем [4]. В связи с этим особую значимость приобретает разработка высокоселективных простых и доступных методов синтеза соединений этого класса. Знание кинетики и механизма образования целевых продуктов позволяет не только разрабатывать принципиально новые методы синтеза, но и совершенствовать уже имеющиеся.

Цель настоящей работы – выяснение механизма катализируемого комплексами платины (II) С-С - сочетания арилиодидов в диметилформаиде, результатом которого может быть образование как симметричных, так и несимметричных бифенилов. Выбор N,N-диметилформаида (ДМФА) в качестве растворителя обусловлен как растворимостью в нем исходных арилиодидов, так и возможностью подбора для этих условий растворимой формы комплекса платины (II) –  $M_2PtCl_4$  ( $M^+$  - комплекс иона  $K^+$  с эфиром 18-краун-6).

**Результаты и обсуждение.** Ранее показано [5], что взаимодействие *n*- и *m*-иоднитробензола с  $M_2PtCl_4$  в ДМФА в присутствии твердой фазы безводного  $K_2CO_3$  приводит к образованию 4,4'- и 3,3'-динитробифенилов, соответственно, и нитробензолу. Препаративный выход 4,4'-динитробифенила составляет 40 % на исходный арилиодид (440 % на комплекс платины), 3,3'-динитробифенила – 55 % (550 % на комплекс платины). Наряду с аренами в реакции образуются  $CO_2$  и диметиламин.

Скорость расходования исходных арилиодидов, измеренная ГЖХ-методом, в свежеприготовленных растворах заметно ниже аналогичных величин, полученных после предварительного выдерживания раствора платины (II) в диметилформаиде при 80 °С. Так, при термостатировании в течение 30 мин скорость расходования *n*-иоднитробензола в системе 0,005 моль/л *n*-иоднитробензола – 0,05 моль/л  $M_2PtCl_4$  увеличивается от  $(3,66 \pm 0,01) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$  до  $(6,5 \pm 0,1) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ , а при термостатировании в течение 1-2 часов – до  $(7,1 \pm 0,1) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ .

Реакция является чувствительной к введению в систему кислот и оснований. Добавки трифторуксусной кислоты (0,05 моль/л) к системе 0,005 моль/л *n*-иод-нитробензола – 0,05 моль/л  $M_2PtCl_4$  приводят к уменьшению скорости расходования арилиодида от  $(3,66 \pm 0,01) \cdot 10^{-4}$  до  $(2,9 \pm 0,3) \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$ , а при проведении реакции в присутствии твердой фазы безводного  $K_2CO_3$  и интенсивном перемешивании скорость возрастает до  $(8,9 \pm 0,7) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ .

Эти результаты первоначально были объяснены в рамках механизма, представленного формулами (1)–(9)

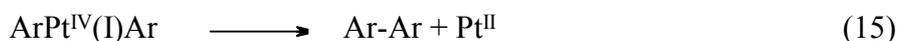
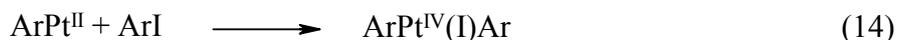
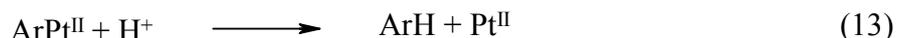


Здесь на первой стадии происходит образование активной частицы  $PtCl_3(CONMe_2)^-$  в результате активации С-Н связи диметилформамида платиной (II). Эта стадия введена по аналогии с реакциями активации С-Н связи алканов и аренов комплексами платины [6]. Реакция протолиза (2) включает воду, остающуюся в растворителе после обычных методов очистки. Окислительное присоединение арилиодида к  $PtCl_3(CONMe_2)^-$  (стадия 3) дает комплекс платины (IV), восстановительное элиминирование которого (стадия 4) приводит к образованию  $ArPt^{II}$ . Бифенилы образуются в результате перехвата активной частицы  $ArPt^{II}$  второй молекулой субстрата (стадия 8) и последующего восстановительного элиминирования (стадия 9) диарильного комплекса платины (IV).

Однако дальнейшие усилия зафиксировать образование  $PtCl_3(CONMe_2)^-$  методом ЯМР-спектроскопии, к сожалению, оказались безуспешными. Это может быть как результатом низкой концентрации  $PtCl_3(CONMe_2)^-$  в растворе, так и нетипичности электрофильного замещения в альдегидной группе.

Вместе с тем возможно и другое объяснение представленных результатов. Известно, что муравьиная кислота и ее соли – продукты распада и/или гидролиза ДМФА – могут восстанавливать [7] комплексы Pt (IV). В конечном итоге это могло бы обеспечить генерирование активной в синтезе бифенилов частицы  $ArPt^{II}$  из  $ArPt^{IV}$  – продукта окислительного присоединения  $ArI$  к Pt (II) (формулы (10)–(16)).





Проанализируем формулы (10)–(16). Возможность реализации стадии (10), приводящей к образованию  $\text{ArPt}^{\text{IV}}$  в исследуемых условиях, не вызывает сомнений. В работе [8] был выделен и охарактеризован  $^1\text{H}$  ЯМР-спектром комплекс  $\text{ArPt}^{\text{IV}}$  – продукт взаимодействия иодбензола и  $\text{K}_2\text{PtCl}_4$ .

Аргументами, подтверждающими образование на координате реакции частицы  $\text{ArPt}^{\text{II}}$  (стадия 12), является как образование аренов (стадия 13), симметричных бифенилов (стадия 15), о чем уже сообщалось выше, так и продуктов кросс-сочетания при введении в реакционную систему двух различных арилиодидов (табл. 1).

Таблица 1

Составы реакционных растворов и соотношения выходов продуктов сочетания

№ п/п	Составы реакционных растворов <sup>а,б</sup>	Время, температура	Продукты сочетания, их мольное соотношение <sup>г</sup> в смеси (выход на $\text{Pt}^{\text{II}}$ /исх. $\text{ArI}$ , %)
1	$\text{K}_2\text{PtCl}_4$ ( $5,5 \cdot 10^{-5}$ ) – иодбензол ( $3,57 \cdot 10^{-3}$ ) – 4-иодтолуол ( $5,3 \cdot 10^{-3}$ )	5 – 15 ч 80 °С	Бифенил 4-метилбифенил 4,4'-диметилбифенил 0,4 : 1 : 0,5
2	$\text{K}_2\text{PtCl}_4$ ( $1,35 \cdot 10^{-4}$ ) – иодбензол ( $2,7 \cdot 10^{-3}$ ) – 4-иодтолуол ( $5,8 \cdot 10^{-3}$ )	5 – 15 ч 180 °С	Бифенил 4-метилбифенил 4,4'-диметилбифенил 0,1 : 1 : 1,5
3	$\text{K}_2\text{PtCl}_4$ ( $1,35 \cdot 10^{-4}$ ) – иодбензол ( $2,7 \cdot 10^{-3}$ ) – 4-иоданизол ( $5,4 \cdot 10^{-3}$ )	17 ч 180 °С	Бифенил 4-метоксибифенил 4,4'-диметоксибифенил 0,1 : 1 : 0,6
4	$\text{K}_2\text{PtCl}_4$ ( $2,3 \cdot 10^{-5}$ ) – иодбензол ( $1,8 \cdot 10^{-2}$ ) – 1,4-иоднитробензол ( $1 \cdot 10^{-3}$ )	4 ч, 180 °С	Бифенил (280) 4-нитробифенил (1310/30 <sup>в</sup> ) 4-иодбифенил (155) 4,4'-динитробифенил (535/2.5 <sup>в</sup> ) 1 : 4,7 : 0,5 : 1,9
5	$\text{K}_2\text{PtCl}_4$ ( $9,2 \cdot 10^{-5}$ ) – иодбензол ( $4 \cdot 10^{-3}$ ) – 1,4-иоднитробензол ( $9 \cdot 10^{-4}$ )	8,5 ч, 180 °С	4,4'-динитробифенил (36/7 <sup>д</sup> ) 4-нитробифенил (554/57 <sup>д</sup> ) 1 : 15,4

Примечания. <sup>а</sup> количества веществ в моль; <sup>б</sup> все опыты проводили в присутствии 18-краун-6 и твердой фазы  $\text{K}_2\text{CO}_3$  в диметилформамиде ( $6,4 \cdot 10^{-2}$  моль); <sup>в</sup> в расчете на исходный 1,4-иоднитробензол, степень превращения 1,4-иоднитробензола – 85%; <sup>г</sup> соотношение выходов продуктов по данным ГЖХ и ПМР; <sup>д</sup> в расчете на исходный 1,4-иоднитробензол, степень превращения 1,4-иоднитробензола – 100%;

Соотношение продуктов сочетания не изменяется во времени, но зависит от соотношения арилиодидов в реакционной смеси, их относительной реакционной способности. Реакции являются каталитическими по Pt (II).

На рис. 1 представлена зависимость величины скорости расходования *n*-иоднитробензола от концентрации добавки *n*-иоданизола. Отметим, что реакционная спо-

способность *n*-иоднитробензола выше реакционной способности *n*-иоданизола, измеренной в одинаковых условиях, примерно в 15 раз (скорость расходования  $(3,66 \pm 0,01) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$  и  $(2,5 \pm 0,3) \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$ , соответственно, при  $[\text{ArI}] = 0,005$  моль/л,  $[\text{Pt}^{\text{II}}] = 0,05$  моль/л,  $80^\circ \text{C}$ ). С учетом этого и механизма, представленного формулами (10)–(16), участок заметного увеличения скорости расходования *n*-иоднитробензола при добавках *n*-иоданизола в количествах в 2–10 раз больших, чем концентрация *n*-иоднитробензола, должен соответствовать появлению на координате реакции наряду с симметричным комплексом  $\text{ArPt}^{\text{IV}}\text{Ar}$  ( $\text{Ar} = \text{NO}_2\text{-C}_6\text{H}_4$ ) также и несимметричного диарильного комплекса платины (IV) –  $\text{ArPt}^{\text{IV}}\text{Ar}'$  ( $\text{Ar} = \text{NO}_2\text{-C}_6\text{H}_4$ ,  $\text{Ar}' = \text{CH}_3\text{O-C}_6\text{H}_4$ ), образующегося по реакции (14) в результате конкурентного перехвата комплекса  $\text{ArPt}^{\text{II}}$  молекулой *n*-иоданизола.

В соответствии с формулами (10)–(16) можно было ожидать, что увеличение концентрации восстановителя (НСООН) должно привести к увеличению скорости расходования арилиодида. Рост концентрации НСООН может быть достигнут как за счет увеличения в системе концентрации воды, так и за счет добавок кислоты или щелочи. Известно [9], что гидролиз амидов может катализироваться как кислотами, так и основаниями. Действительно, добавки 10 об. %  $\text{H}_2\text{O}$  к системе ДМФА – 18-краун-6 –  $\text{K}_2\text{PtCl}_4$  ( $5 \cdot 10^{-2}$  моль/л) – *n*-иоднитробензол ( $5 \cdot 10^{-3}$  моль/л) при  $80^\circ \text{C}$  не только не тормозят расходование *n*-иоднитробензола, как следовало ожидать в соответствии со формулами (1)–(9), но приводят к росту скорости расходования арилиодида примерно в 60 раз (от  $(3,66 \pm 0,01) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$  до  $(2,2 \pm 0,2) \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ ). Единственный продукт реакции в этих условиях – нитробензол.

С учетом формул (10)–(16) введение в систему ДМФА –  $\text{K}_2\text{PtCl}_4$  – *n*-иоднитробензол окислителя также должно было бы вызвать изменение кинетических характеристик. На рис. 2 представлены типичные кинетические кривые расходования *n*-иоднитробензола в системах без добавок (1) и в присутствии добавок  $\text{K}_2\text{PtCl}_6$  (2).

Для реакций в присутствии окислителя на кинетической кривой наблюдается изгиб, причем на втором участке происходит ускоренное, по сравнению с начальным участком, расходование *n*-иоднитробензола. Это ускорение можно объяснить, приняв, что образующийся в системе восстановитель НСООН расходует по двум параллельным маршрутам (17) и (18):

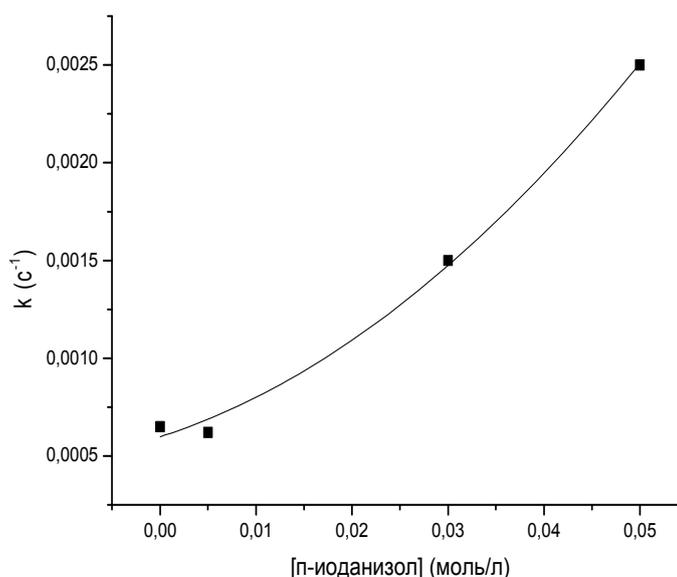


Рис. 1. Зависимость величины скорости расходования *n*-иоднитробензола от количества добавленного *n*-иоданизола в системе ДМФА –  $\text{K}_2\text{PtCl}_4$  (0,05 моль/л),  $[\text{n-иоднитробензол}] = 0,005$  моль/л,  $80^\circ \text{C}$  (раствор комплекса платины в ДМФА предварительно термостатировали в течение 30 мин.)

Образовавшийся на стадии (17) комплекс  $PtCl_4^{2-}$  действует как дополнительная порция катализатора, что и приводит к увеличению скорости на втором участке кинетической кривой.

Важным аспектом в понимании тормозящего действия кислоты на скорость расходования арилиодидов стало изучение состава продуктов в таких системах. Установлено, что в системах, содержащих фосфорную кислоту, наблюдается не только уменьшение скорости расходования *n*-иоднитробензола, но и образование (табл. 2), наряду с нитробензолом, 4,4'-динитробифенилом также *n*-нитро(*N,N*-диметил)аминобензола. Принимая во внимание, что образование 4,4'-динитробифенила лимитируется стадией (10) на формулах (10)–(16), а образование *n*-нитро(*N,N*-диметил)аминобензола протекает по пути нуклеофильного замещения иода в арилиодиде [9], содержащем в *n*-положении активирующую нитрогруппу, на аминогруппу (стадия 16) становится очевидным, что сравнивать скорости расходования арилиодидов в ДМФА без/и с добавками кислот является некорректным, т.к. лимитирующие стадии процессов образования *n*-нитро(*N,N*-диметил)аминобензола и 4,4'-динитробифенила, происходящие в этих системах, различны.

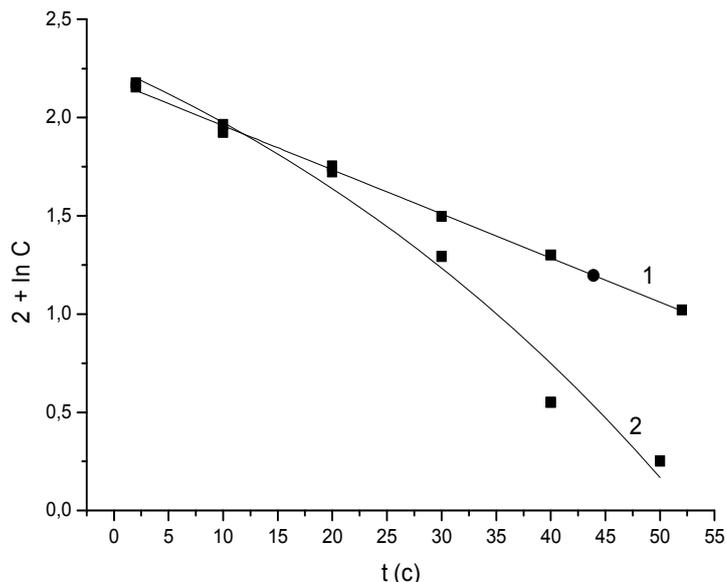


Рис. 2. Кинетика расходования *n*-иоднитробензола в системе ДМФА –  $M_2PtCl_4$  (0,05 моль/л) – *n*-иод-нитробензол (0,05 моль/л), 80 °С (С – соотношение концентраций *n*-иоднитробензола и внутреннего стандарта *n*-бромнитробензола). 1 – без добавок  $M_2PtCl_6$ . 2 – в присутствии 0,005 моль/л  $M_2PtCl_6$

Таблица 2

Влияние условий проведения реакции на выход *n*-нитро(*N,N*-диметил)аминобензола и 4,4'-динитробифенила

№ п/п	Время, ч	$[H_2O]$ , об. %	$[H_3PO_4]^a$ , об. %	$[K_2PtCl_4]$ , моль	$[ArI] \cdot 10^{-3}$ , моль <sup>б</sup>	Степень превращения ArI, %	Выход ари-ламина, % на исх. ArI	Выход бифенила, % на исх. ArI/Pt
1	28	10	5	$3 \cdot 10^{-5}$	1,45	100	30	0
2	23	10	5	0	1,45	18	2	0
3	23	0	5	$3 \cdot 10^{-5}$	1,45	55	8	9/208
4	7	0	0	$3 \cdot 10^{-5}$	1,45	100	0	40/400

Примечания. <sup>а</sup> Использована 85 %-ная  $H_3PO_4$ , <sup>б</sup> *n*-иоднитробензол

Одним из дополнительных аргументов, подтверждающих участие диметилформаида (продукта его превращений) как реагента в последовательности реакций, приводящих к бифенилам, можно рассматривать резкое снижение выхода бифенила при переходе от диметилформаида к бензолу. Кипячение *n*-иод-нитробензола в присутствии твердой фазы безводного  $K_2CO_3$ , эфира 18-краун-6 и  $K_2PtCl_4$  ( $2 \cdot 10^{-4}$  моль) в течение 35 ч приводит к 4,4'-динитробифенилу с выходом менее 4 %.

Таким образом, механизм образования бифенилов, включающий участие в реакции продукта гидролиза диметилформаида (формулы (10)–(16)) в качестве восстано-

ливающего агента, представляется более предпочтительным. Исследованная система может быть использована как для гомосочетания арилиодидов, так и их деиодирования.

**Экспериментальная часть.** Исходный комплекс платины  $K_2PtCl_4$  синтезирован по методике [10]. Комплекс  $K_2PtCl_4$  с 18-краун-6-эфиром получен растворением  $K_2PtCl_4$  и избытка краун-эфира в диметилформамиде с последующим высаждением диэтиловым эфиром.

Расходование исходных арилиодидов и накопление продуктов реакции осуществлялось методами ГЖХ (газо-жидкостный хроматограф ЛХМ-8МД с пламенно-ионизационным детектором, колонка – 2000 x 3 мм, неподвижная фаза SE-30, температура – 150–200 °С) и  $^1H$  ЯМР-спектроскопии (прибор BRUKER AVANCE 400 МГц, спектры записывали в  $CDCl_3$ ). Продукты реакции идентифицированы ГЖХ-методом по времени удерживания стандартных образцов и сравнением  $^1H$  ЯМР спектров с литературными данными [11, 12]. Кинетические измерения, синтез и выделение бифенилов проведены как в [5].

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гребенкин М.Ф. Жидкокристаллические материалы [Текст]: монография / М.Ф. Гребенкин, А.В. Иващенко – М.: Химия, 1989. – 288 с.
2. Solomon P. M. The biphenyl molecule as a model transistor [Text] / P. M. Solomon, N. D. Lang // ACS Nano. – 2008. – Vol. 2, № 3. – P. 435-440.
3. Supramolecular insulating networks sheathing conducting nanowires based on organic radical cations [Text] / H. M. Yamamoto, Y. Kosalca, R. Maeda et al. // ACS Nano. – 2008. – Vol. 2, № 1. – P. 143-155.
4. Stacey, F. B. Heads or tails: Which is more important in molecular self-assembly? [Text] / F. B. Stacey // ACS Nano. – 2007. – Vol. 1, № 1. – P. 10-12.
5. Активация связи С-Н диметилформаида как ключевая стадия окислительного присоединения арилиодидов к платине (II) в системе  $PtCl_4^{2-}$  – диметилформаид [Текст] / Т.В. Безбожная, С.Л. Литвиненко, С.Ю. Скрипник, В.В. Замашиков // ЖОХ. – 1999. – Т. 69, вып. 8. – С. 1244–1249.
6. Shilov A.E. Activation and catalytic reactions of saturated hydrocarbons in the presence of metal complexes [Text]: monograph / A.E. Shilov, G.B. Shul'pin. – Boston : Kluwer, 2000. – 525 p.
7. Аналитическая химия платиновых металлов [Текст]: монография / Под ред. А.П. Виноградова – М.: Наука. – 1972. – 309 с.
8. Литвиненко, С.Л. Окислительное присоединение арилиодидов к хлоридным комплексам платины (II) в водных средах [Текст] / С.Л. Литвиненко, В.В. Замашиков, Е.С. Рудаков и др. // Координационная химия. – 1985. – Т.11, вып.3. – С. 356-358.
9. Терней А. Современная органическая химия [Текст]: монография / А. Терней. – М.: Мир, 1981. – Т.2. – 651 с.
10. Синтез комплексных соединений металлов платиновой группы [Текст]: справочник / Под ред. И.И. Черняева. – М.: Наука, 1964. – 340 с.
11. Iranpoor N. H. Imidazolium-based phosphinite ionic liquid (IL-OPPh<sub>2</sub>) as Pd ligand and solvent for selective dehalogenation or homocoupling of aryl halides [Text] / N. Iranpoor, H. Firouzabadi, R. Azadi // J. Organometal. Chem. – 2008. – Vol. 693. – P. 2469-2472.
12. Yang J. Synthesis and characterization of dinuclear NHC-palladium complexes and their applications in the Hiyama reactions of aryltrialkoxysilanes with aryl chlorides [Text] / J. Yang, L. Wang // Dalton Trans. – 2012. – Vol. 41. – P. 12031-12037.

*Поступила в редакцию 09.03.2016 г.*

## THE ROLE OF DIMETHYLFORMAMIDE AND MECHANISM OF C-C COUPLING REACTIONS OF ARYL IODIDES IN THE SYSTEM DIMETHYLFORMAMIDE – $K_2PtCl_4$ – ArI

*T.V. Bezbozhnaya*

Alternative mechanisms of dimethylformamide participation in coupling reactions of aryl iodides catalyzed by platinum complexes were analyzed. There is reason to believe that the stepwise reaction mechanism

of C-C-coupling of aryl iodides include the reduction stage of  $\text{ArPt}^{\text{IV}}$  – the product of oxidative addition of aryl iodide to platinum (II) complex – by formic acid that formed in the system as a result of the hydrolysis of dimethylformamide, and as result of it the active particle  $\text{ArPt}^{\text{II}}$  is generated.

**Keywords:** aryl iodides; C-C coupling reactions; platinum complexes; dimethylformamide.

**Безбожная Татьяна Васильевна**

кандидат химических наук

ГУ "Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко", г. Донецк,  
83114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 70

b.t.v@i.ua

тел. +38-095-4070895

**Bezbozhnaya Tatiana Vasil'evna**

Candidate of Chemical Sciences

State institution "L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry", Donetsk  
83114, Donetsk, R. Lyuksemburg, 70

УДК 547.587; 544.421; 543.552; 544.653.3

## КИНЕТИКА РЕАКЦИЙ МОНО- И ДИГИДРОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ С ИНТЕРМЕДИАТАМИ ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА В НЕЙТРАЛЬНЫХ СРЕДАХ

© 2016. *А.В. Белый, Н.И. Белая*

---

Целью работы является изучение кинетики реакции природных гидроксibenзойных кислот с интермедиатами электровосстановления кислорода (ЭВ O<sub>2</sub>) в нейтральных средах на ртутном каплющем электроде. Методом хроноамперометрии установлено, что исследуемая химическая реакция представляет собой взаимодействие электрохимически генерируемых активных форм кислорода (АФК) с моно- и бионами фенолкарбоновых кислот. Определенные величины констант скоростей реакции являются параметром антирадикальной активности изученных фенольных соединений и могут быть аппроксимированы на биологические системы. Полученные результаты будут способствовать развитию представлений о процессе ЭВ O<sub>2</sub> как кинетической модели для оценки антиоксидантных свойств фенолов и их смесей в составе растительных экстрактов при взаимодействии с АФК.

**Ключевые слова:** электровосстановление кислорода, активные формы кислорода, гидроксibenзойные кислоты, антирадикальная активность.

---

**Введение.** Подбор антиоксидантов (АО) растительного происхождения как в индивидуальном виде, так и в составе лекарственных экстрактов и настоек является актуальным научным направлением для химиков, биохимиков и фармацевтов. Особенно востребован поиск и исследование природных фенольных соединений (PhOH), способных тормозить свободнорадикальные процессы, ответственные за многие заболевания в организме человека [1].

В этой области постоянно ведется разработка модельных реакций, максимально приближенных к биологическим системам, что позволило бы проводить исследования *in vitro*, а затем аппроксимировать полученные результаты на процессы в живых тканях. Безусловно, на сегодняшний день уже существуют модели для изучения радикальных процессов, которые успели хорошо себя зарекомендовать. Однако и они имеют ряд недостатков.

Одна из самых распространенных и широко применяемых – модель радикально-цепных процессов окисления органических веществ [2], одним из недостатков которой является исследование преимущественно только в органической фазе. Частично позволило решить эту проблему применение стабильных радикалов, способных растворяться в спирте и воде [3–5]. Но такие радикалы искусственные, а значит и полученные результаты не всегда можно перенести на биологические объекты.

Необходим поиск и развитие таких модельных систем, где имеется широкий диапазон изменения рН среды, температуры, растворителя; генерируются естественные активные формы кислорода; возможно изучение активности веществ в реакции с генерируемыми радикалами одним и тем же методом, простым в аппаратном оформлении и не требующим длительной пробоподготовки.

В качестве такой системы можно использовать реакцию катодного восстановления кислорода на ртутном электроде в апротонных и водных средах. Однако, согласно литературным данным [6–8], применение модели электровосстановления кислорода ограничивается определением суммарной антиокислительной активности веществ без детального изучения кинетических параметров отдельных взятых реакций.

Целью настоящей работы является исследование кинетики реакции гидроксibenзойных кислот с промежуточными продуктами электровосстановления кислорода в нейтральных средах, а также определение константы скорости данной реакции как параметра антирадикальной активности (АРА) антиоксидантов.

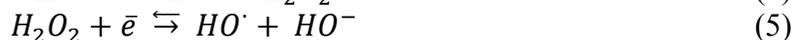
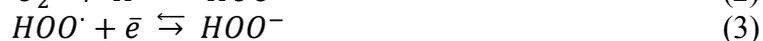
**Методика эксперимента.** В качестве объектов исследования были выбраны моно- и дигидроксibenзойные кислоты в индивидуальном виде, принадлежащие к простым растительным фенолам группы фенолкарбоновых кислот. Кислоты производства «Мегск» применяли без дополнительной очистки. Для приготовления фосфатного буфера использовали бидистиллированную воду, соли  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  и  $\text{NaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  квалификации х.ч., дважды перекристаллизованные. Точное значение pH определяли с помощью лабораторного иономера И-160МИ. Кинетические опыты проводили на полярографе ПУ-1 в постоянно-токовом режиме.

Полярографирование осуществляли в герметичной, термостатируемой ячейке с контролем атмосферы и подачей вещества в реакционную смесь. В качестве электрода сравнения служила донная ртуть, рабочим электродом – ртутный капаящий электрод (РКЭ). Съемка полярограмм проводилась при малых скоростях развертки потенциала до 2–2,5 мВ/с в диапазоне рабочих потенциалов от 0 до –1 В. Исследуемый раствор предварительно барботировали  $\text{O}_2$  в течение 5 мин, а затем его поверхность обдувалась на протяжении всего опыта при  $T=298 \pm 2$  К. Пики ЭВ  $\text{O}_2$  идентифицировали путем барботирования аргона через исследуемый раствор. Пики на полярограмме полностью исчезали при барботировании аргоном в течение 20–30 мин. Начальную концентрацию кислорода  $[\text{O}_2]_0$  в буферных растворах определяли по методу Винклера [9]. В заданных условиях из зависимости предельного диффузионного тока ЭВ  $\text{O}_2$  ( $I_d$ ) от  $[\text{O}_2]_0$  рассчитывали постоянную Ильковича ( $K=3,1 \cdot 10^5$ ).

Расчет констант диссоциации исследуемых фенольных соединений и распределение их ионных форм в зависимости от pH среды проводили методом QSPR (количественная взаимосвязь структура-свойство) в программном пакете Marvin 5.9.1.

УФ-спектры растворов гидроксibenзойных кислот и их производных в фосфатном буфере в диапазоне pH от 5,4 до 7,4 снимали на спектрофотометре СФ-2000 (Россия). Статистическую обработку полученных данных проводили в системе Statistica Demo 6.0.

**Анализ результатов.** Процесс катодного электровосстановления кислорода на РКЭ реализуется с генерацией активных форм кислорода (АФК) в кислых и нейтральных средах по следующей схеме [10]:



При этом наблюдаются две полярографические волны: первая (1)–(4) соответствует восстановлению  $\text{O}_2$  до  $\text{H}_2\text{O}_2$ , а вторая (5)–(8) –  $\text{H}_2\text{O}_2$  до  $\text{H}_2\text{O}$ . Для исследования реакционной способности исследуемых гидроксibenзойных кислот использовали только первую волну (рис. 1), соответствующую реакциям (1)–(4), по которым генерируются АФК – супероксид анион-радикал ( $\text{O}_2^{\cdot -}$ ) и его протонированная форма – гидропероксильный радикал ( $\text{HO}_2^{\cdot}$ ).

При введении гидроксibenзойных кислот и их производных в систему наблюдается (рис. 1) закономерное снижение предельного тока ЭВ  $O_2$  ( $I_k$ ), а потенциал предельного тока смещается в положительную область, что является характерным признаком электродных процессов с последующей химической реакцией [11–13].

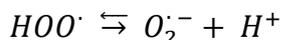
Видно, что чем выше концентрация кислоты, вводимой в реакционную смесь, тем больше падение величины  $I_k$ , а, значит, последующая реакция (9) является лимитирующей и представляет собой взаимодействие фенольного соединения с кислородными радикалами:



При этом предельный ток ЭВ  $O_2$  в присутствии PhOH будем считать кинетическим  $I_k$ , а величину относительного изменения тока  $I_d/I_k$  – первичной оценкой антирадикальных свойств изученных веществ.

Дискуссионным остается вопрос о том, в какой форме будут вступать в последующую химическую реакцию кислородные радикалы и фенолкарбоновые кислоты.

Что касается свободнорадикальных интермедиатов восстановления кислорода, то образующийся  $HO\dot{O}$  (реакция 2) имеет  $pK_a=4,88$  [14], а значит при  $pH=7,4$  будет диссоциировать согласно уравнению:



Таким образом, восстановление  $O_2$  до  $H_2O_2$  на РКЭ в фосфатном буфере при  $pH=7,34$  позволяет длительное время до (1 ч) с постоянной скоростью генерировать в качестве интермедиатов смесь депротонированной  $O_2^{\cdot-}$  и протонированной  $HO\dot{O}$  форм супероксид анион-радикала кислорода.

Это подтверждается УФ-спектрами буферного раствора после 3-х часового полярографирования в присутствии тетразолиевого синего (NBT), где четко наблюдается появление небольшого максимума в области  $\lambda=530$  нм образования формазана – продукта восстановления NBT супероксид анион-радикалом [15]. В области низких pH характерный пик исчезает, а значит супероксид анион-радикал полностью переходит в протонированную форму  $HO\dot{O}$  (рис. 2).

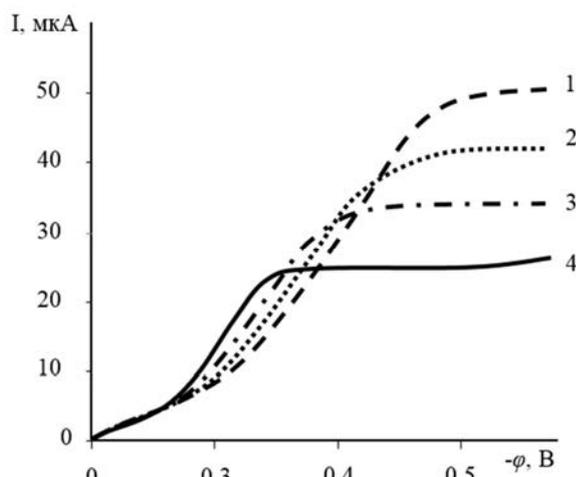


Рис. 1. Полярограмма ЭВ  $O_2$  до  $H_2O_2$  (1) в солянокислом буфере при  $pH=7,4$  в присутствии о-гидроксibenзойной кислоты: 2 –  $0,25 \cdot 10^{-5}$ ; 3 –  $0,5 \cdot 10^{-5}$ ; 4 –  $1 \cdot 10^{-5}$  моль  $\cdot$  л $^{-1}$ .  $T=298 \pm 2$  К

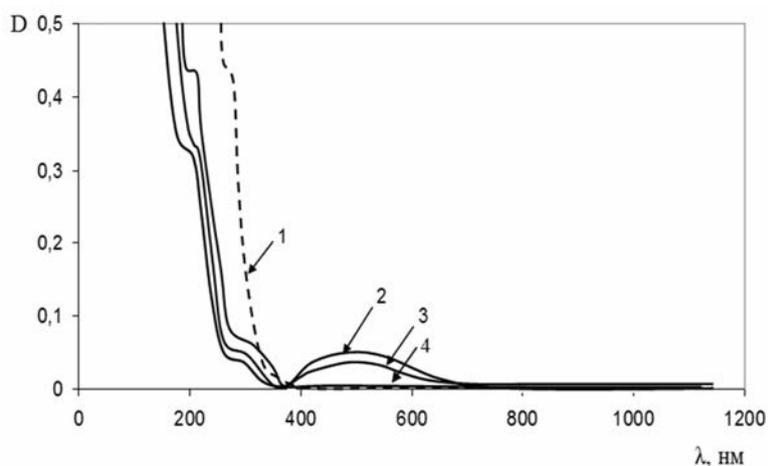


Рис. 2 – УФ-спектры солянокислого буфера в присутствии NBT при ЭВ  $O_2$  (после 3-х часов электролиза на РКЭ): 1 – до электролиза; 2 –  $pH=7,4$ ; 3 –  $pH=5$ ; 4 –  $pH=3$ .

В качестве второго реагента в исследуемой реакции будут выступать моно- и би-ионы гидроксibenзойных кислот, активность которых в реакциях с радикалами намного выше, тем соответствующих молекул [16, 17].

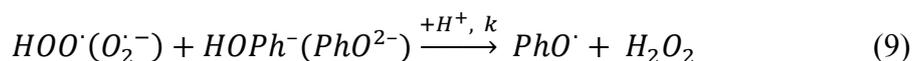
Для доказательства этого утверждения в программе Marvin 5.9.1. было рассчитано распределение ионных форм исследуемых веществ в областях pH близких к физиологическим.

Установлено, что с ростом pH от 5,8 до 7,8 концентрация моноионных форм  $\text{HOPh}^-$  (карбоксилат-ионов) почти не изменяется и составляет приблизительно 100%, а вот количество би-ионов  $\text{PhO}^{2-}$  (фенолятов) непрерывно растет (рис. 3).

Причем, чем выше pH среды, тем больше доля образующихся активных  $\text{PhO}^{2-}$  и выше величина относительного изменения тока ЭВ  $\text{O}_2$  ( $I_d/I_k$ ). По-видимому, вследствие высокой реакционной способности би-ионов, образование даже небольшого их количества (до 0,5%) способно существенно

усилить активность фенолкарбоновых кислот в реакции с  $\text{O}^{\bullet-}$  ( $\text{HOO}^{\bullet}$ ).

Таким образом, ЭВ  $\text{O}_2$  на РКЭ при pH=7,4 в присутствии гидроксibenзойных кислот протекает как электродный процесс с последующей лимитирующей химической реакцией (9) кислородных радикалов с моно- и би-ионными формами гидроксibenзойных кислот:



Суммарная константа ( $k$ ) скорости исследуемой реакции определялась методом хроноамперометрии путем непрерывной записи предельного тока ЭВ  $\text{O}_2$  во времени при фиксированном значении потенциала напряжения в присутствии антиоксиданта [18]. Концентрация кислорода, растворенного в буфере, поддерживалась на уровне  $[\text{O}_2]_0 = 1,6 \cdot 10^{-4}$  моль·л<sup>-1</sup>. Фенольный антиоксидант вводили в систему в диапазоне рабочих концентраций  $(0,5-1) \cdot 10^{-4}$  моль·л<sup>-1</sup>, который обеспечивает линейную зависимость величины  $I_k$  от концентрации кислот.

В условиях, когда кинетика изучалась по изменению предельного тока ЭВ  $\text{O}_2$  можно считать [18], что весь кислород реакционной смеси восстанавливается на катоде до  $\text{H}_2\text{O}_2$  через образование в качестве промежуточного интермедиата радикалов, то есть  $[\text{O}_2] = [\text{O}^{\bullet-}(\text{HOO}^{\bullet})]$ .

Полученные хроноамперограммы преобразовывали в кинетические кривые распада кислорода (рис. 4, а), а затем получали их анаморфозы (рис. 4, б).

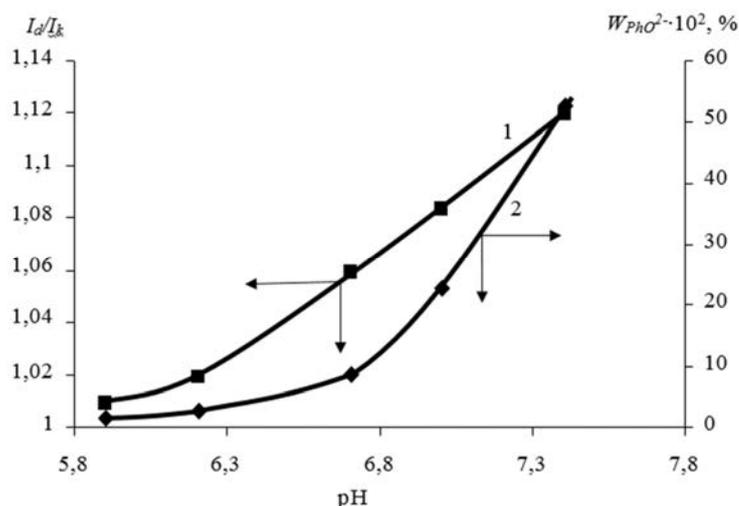


Рис. 3. Зависимость от pH среды раствора: 1 – относительного изменения тока ЭВ  $\text{O}_2$  ( $I_d/I_k$ ) в присутствии 4-гидроксibenзойной кислоты ( $C_{\text{PhOH}} = 1 \cdot 10^{-4}$  моль·л<sup>-1</sup>); 2 – процентного содержания фенолят-ионов 4-гидроксibenзойной кислоты ( $W_{\text{PhO}^{2-}}$ ).  $T = 298 \pm 2$  К.

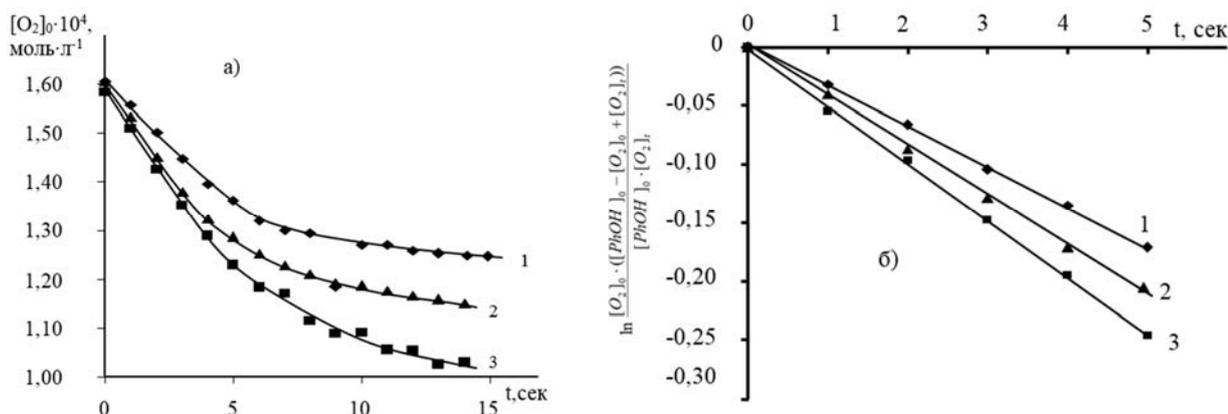


Рис. 4. Кинетические кривые расходования  $O_2$  в процессе ЭВ на РКЭ в фосфатном буфере в присутствии о-, п- и м-гидроксibenзойных кислот с концентрацией  $1 \cdot 10^{-4}$  моль/л (кривые 1, 2 и 3 соответственно) при  $pH=7,4$  и  $T=298 \pm 2$  К (а) и анаморфозы кинетических кривых в координатах уравнения (12) (б)

Спрявление проводили в координатах кинетического уравнения бимолекулярной реакции второго порядка (в случае, когда начальные концентрации реагирующих веществ различны  $a \neq b$ ) [18]:

$$kt = \frac{1}{t} \cdot \frac{1}{(a-b)} \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)}$$

После преобразований

$$([PhOH]_0 - [O_2]_0)k \cdot t = \ln \frac{[O_2]_0 \cdot ([PhOH]_0 - [O_2]_0 + [O_2]_t)}{[PhOH]_0 \cdot [O_2]_t},$$

где  $[O_2]_0$ ,  $[PhOH]_0$  – начальные концентрации кислорода и фенольных соединений соответственно, моль · л<sup>-1</sup>;  $t$  – время протекания реакции, сек;  $[O_2]_t$  – концентрация кислорода, прореагировавшая в виде  $O^{\bullet-}$  ( $HOO^{\bullet}$ ) с антиоксидантом к моменту времени  $t$ , моль · л<sup>-1</sup>;  $k$  – константа скорости реакции, л · моль<sup>-1</sup> · с<sup>-1</sup>.

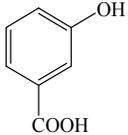
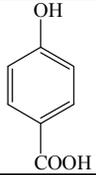
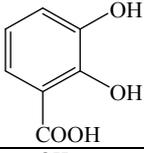
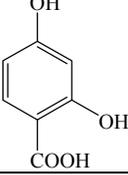
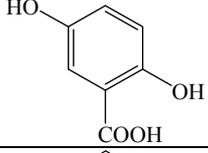
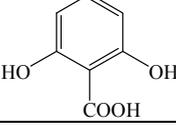
Из полученных анаморфоз кинетических кривых расходования кислорода (рис. 4б) с помощью линейного однофакторного регрессионного анализа были рассчитаны константы скорости  $k$  исследуемой реакции (9), которые являются параметром антирадикальной активности представленных фенольных соединений в реакции с АФК. Видно, что моногидроксibenзойные кислоты обладают низкой активностью в реакции с кислородными радикалами. С ростом числа ОН-групп в молекуле кислоты величина константы закономерно растет (таблица).

Таблица

Экспериментальные значения констант скоростей ( $k$ ) реакции гидроксibenзойных кислот с кислородными радикалами  $O^{\bullet-}$ ,  $HOO^{\bullet}$  при катодном ЭВ  $O_2$ , расчетные значения  $pK_a$  кислот по I и II ступеням диссоциации и содержание их бионных форм  $W_{PhO^{2-}}$  при  $pH = 7,4$  и  $T = 298$  К

№	Соединение	Структура	$pK_a$	$W_{PhO^{2-}}$ , %	$k$ , л · моль <sup>-1</sup> · с <sup>-1</sup>
1	2-гидроксibenзойная кислота		2,79 (-COOH) 13,23 (-OH)	0	$(1,52 \pm 0,05) \cdot 10^2$

Продолжение таблицы

2	3-гидроксibenзойная кислота		3,84 (-COOH) 9,55 (-OH)	0,7	$(7,35 \pm 0,22) \cdot 10^2$
3	4-гидроксibenзойная кислота		4,38 (-COOH) 9,67 (-OH)	0,53	$(5,15 \pm 0,15) \cdot 10^2$
4	2, 3-дигидроксibenзойная кислота (пирокатеховая кислота)		2,56 (-COOH) 9,64 (-OH)	0,57	$(4,38 \pm 0,13) \cdot 10^4$
5	2, 4-дигидроксibenзойная кислота (β-резорциловая кислота)		3,10 (-COOH) 9,81 (-OH)	0,24	$(4,29 \pm 0,13) \cdot 10^3$
6	2,5-дигидроксibenзойная кислота (гентизиновая кислота)		2,53 (-COOH) 9,75 (-OH)	0,39	$(2,71 \pm 0,08) \cdot 10^4$
7	2, 6-дигидроксibenзойная кислота (γ-резорциловая кислота)		1,51 (-COOH) 13,26 (-OH)	0	$(5,08 \pm 0,15) \cdot 10^2$

В общем случае, чем больше доля образующихся бионных форм, тем выше антирадикальная активность кислоты. Наиболее активны в реакции с  $O^{\bullet-}$  ( $HO\dot{O}^{\bullet}$ ) дигидроксibenзойные кислоты – пирокатеховая и гентизиновая, которые способны при  $pH=7,5$  диссоциировать с образованием высокорекреационноспособных фенолят-ионов  $PhO^{2-}$ .

**Выводы.** Изучена кинетика реакции электрохимически генерированных активных форм кислорода с моно- и дигидроксibenзойными кислотами в условиях близких к биологическим системам.

Показано, что исследуемая химическая реакция представляет собой взаимодействие депротонированной и протонированной форм супероксид анион-радикала кислорода с моно- и бионами гидроксibenзойных кислот.

Наиболее активны в реакции с АФК гентизиновая, пирокатеховая и β-резорциловая кислоты, которые способны при заданном pH диссоциировать с образованием активных фенолят-ионов  $PhO^{2-}$ .

Хроноамперометрический метод исследования ЭВ  $O_2$  в присутствии природных фенолов позволяет оценивать их антирадикальную активности как в индивидуальном виде, так и в составе растительных экстрактов по отношению к активным формам кислорода в условиях максимально приближенных к физиологическим.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vermerris W. Phenolic compound biochemistry [Text]: monograph / W. Vermerris, R. Nicolson. – Springer, 2006. – 276 p.
2. Азатян В.В. Ингибирование цепных реакций [Текст]: монография / В.В. Азатян, Е.Т. Денисов. – Москва.: Наука, 1997. – 267 с.
3. Wojdylo A. Antioxidant activity and phenolic compounds in 32 selected herbs [Text] / A. Wojdylo, J.Oszmianski, R. Czemerys // J. Food Chemistry. – 2007. – Vol. 105. – P. 940–949.
4. Villano P. Radical scavenging ability of polyphenolic compounds towards DPPH free radical [Text] / P.Villano, M.C. Garcia-Parrilla // Talanta. – 2007. – Vol. 71. – P. 230–235.
5. Белая Н.И. Реакции незамещенных оксibenзолов с 2,2-дифенил-1-пикрилгидразилом в системе вода-апротонный растворитель [Текст] / Н.И. Белая, А.В. Белый, А.И. Пашенко // Журнал общей химии. – 2012. – Т. 82, Вып. 5. – С. 772–781.
6. Короткова Е.И. Вольтамперометрическое определение антиоксидантной активности растительного сырья и некоторых продуктов питания [Текст] / Е.И. Короткова, О.А. Аврамчик, Ю.А. Карбаинов // Химия и химическая технология. – 2002. – Т. 45, № 3. – С. 110–112.
7. Короткова Е.И. Определение антиоксидантной активности экстрактов растительного сырья методом катодной вольтамперометрии [Текст] / Е.И. Короткова, О.А. Аврамчик, Т.И. Андреева // Химико-фармацевтический журнал. – 2003. – Т. 37, № 9. – С. 55–56.
8. Гуминовые кислоты в процессе электровосстановления кислорода [Текст] / Н.В. Юдина [и др.] // Химия и химическая технология. – 2002. – Т. 45, № 3. – С. 106–108.
9. ISO 5813:1983 Water quality. Determination of dissolved oxygen. Iodometric method.
10. Дамаскин Б.Б. Электрохимия [Текст]: учеб для вузов / Б.Б. Дамаскин, О.А. Петрий, Г.А. Цирлина. – Москва.: Химия, 2006. – 670 с.
11. Исследование антиоксидантных свойств каталазы и супероксиддисмутазы методами вольтамперометрии [Текст] / Е.И. Короткова [и др.] // Химико-фармацевтический. журнал. – 2008. – Т. 42, № 8. – С. 45–47.
12. Полярографический метод в изучении антиоксидантной активности аминокислот и белков [Текст] / А.А. Бумбер [и др.] // Журнал общей химии. – 2001. – Т. 71, № 8. – С. 1387–1389.
13. Белый А.В. Антирадикальная активность растительных дубильных веществ в реакции с электрохимически генерированными активными формами кислорода [Текст] / А.В. Белый, Н.И. Белая, Е.Н. Симонова // Химико-фармацевтический. журнал. – 2015. – Т. 49, № 5. – С. 33–36.
14. Янковский О.Ю. Токсичность кислорода и биологические системы (эволюционные, экологические и медико-биологические аспекты) [Текст]: монография / О.Ю. Янковский. – Москва.: Медицина, 2000. – 294 с.
15. Zhang B.-T. Study on superoxide and hydroxyl radicals generated in indirect electrochemical oxidation by chemiluminescence and UV-Visible spectra [Text] / B.-T. Zhang, L.-X. Zhao, J.-M. Lin // J. Environmental Sciences. – 2008. – Vol. 20. – P. 1006–1011.
16. Litwinienko G. Abnormal Solvent Effects on Hydrogen Atom Abstractions. 1. The Reactions of Phenols with 2,2-Diphenyl-1-picrylhydrazyl (dpph) in Alcohols [Text] / G. Litwinienko, K.U. Ingold // J. Org. Chem. – 2003. – Vol. 68. – P. 3433–3438.
17. Litwinienko G. Abnormal Solvent Effects on Hydrogen Atom Abstractions. 2. Resolution of the Curcumin Antioxidant Controversy. The Role of Sequential Proton Loss Electron Transfer [Text] / G. Litwinienko, K.U. Ingold // J. Org. Chem. – 2004. – Vol. 69. – P. 5888–5896.
18. Гейровский Я. Основы полярографии [Текст]: учебник для вузов / Я. Гейровский, Я. Кута. – Москва: Наука, 1965. – 559 с.

*Поступила в редакцию 12.04.2016 г.*

**THE KINETICS OF REACTION OF MONO- AND DIHYDROXYBENZOIC ACID WITH OXYGEN  
ELECTROREDUCTION INTERMEDIATES IN A NEUTRAL ENVIRONMENT**

*A.V. Belyj, N.I. Belaya*

The aim of the project is to study the kinetics of the reaction of hydroxybenzoic acids with intermediates of oxygen electroreduction in neutral environment at a mercury dropping electrode. Using chronoamperometry we have found that the investigated chemical reaction is the interaction between the active forms of oxygen and mono- and biions of phenolic acids. Calculated values of the rate constants are the characteristic of hy-

droxybenzoic acid antiradical activity and can be approximated on the biological system. Obtained results will promote the development of concepts of electroreduction  $O_2$  as the kinetic model to study the reactivity of the substance in the interaction with reactive oxygen species.

**Keywords:** oxygen electroreduction, reactive oxygen species, hydroxybenzoic acids, antiradical activity.

***Белый Александр Владимирович***

кандидат химических наук, доцент  
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк  
доцент кафедры физической химии  
ул. Университетская, 24, 83001, Донецк  
a.v.belyj@gmail.com

***Белая Наталья Ивановна***

кандидат химических наук, доцент  
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк  
доцент кафедры физической химии  
ул. Университетская, 24, 83001, Донецк  
nat.iv.belaya@gmail.com

***Belyj Alexandr Vladimirovich***

Candidate of Chemical Sciences  
Donetsk National University  
Associate Professor at the Department of Physical Chemistry  
Universitetskaya Str., 24  
83001, Donetsk  
a.v.belyj@gmail.com

***Belaya Natalya Ivanovna***

Candidate of Chemical Sciences  
Donetsk National University  
Associate Professor at the Department of Physical Chemistry  
Universitetskaya Str., 24  
83001, Donetsk  
nat.iv.belaya@gmail.com

## ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

1. Для публикации в журнале «Вестник Донецкого национального университета. Серия А: Естественные науки» принимаются не опубликованные ранее научные работы, содержащие новые результаты теоретических и экспериментальных исследований по математике, механике, информатике, физике, химии и биологии. Статьи, представленные для публикации в других журналах, к рассмотрению не принимаются.

Решение о публикации принимается редакционной коллегией журнала после рецензирования, учитывая научную значимость и актуальность представленных материалов. Если рецензия положительна, но содержит замечания и пожелания, редакция направляет статьи авторам на доработку вместе с замечаниями рецензента. Автор должен ответить рецензенту по всем пунктам рецензии. После такой доработки редколлегия принимает решение о публикации статьи. В случае отклонения статьи редакция направляет авторам рецензии или выдержки из них, либо аргументированное письмо редактора. Редколлегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных статей, за исключением случаев явного недоразумения. Рукописи авторам не возвращаются. Статья, задержанная на срок более трех месяцев или требующая повторной переработки, рассматривается как вновь поступившая.

Обзорные статьи готовятся по заказу редколлегии или по инициативе авторов. В случае инициативы авторов они направляют в редакцию письмо-предложение вместе с аннотацией обзора и указанием ориентировочного объема и предполагаемого числа ссылок на литературу. Если заявка одобрена редколлекцией, авторы готовят и присылают текст обзорной статьи.

2. Рукопись подается в одном экземпляре (на русском или английском языках), напечатанном с одной стороны листа бумаги формата А4 (экземпляр подписывается авторами). Объем рукописи, как правило, не должен превышать 10 страниц (для обзорной статьи – 25), включая рисунки, таблицы, список литературы. Вместе с рукописью подается CD-диск с полным текстом статьи и отдельными дополнительными электронными файлами указанными ниже (в формате WORD, Office 97–2010) или файлы представляются по электронной почте. Основной текст статьи – шрифт Times New Roman, размер 12 пт., с выравниванием по ширине; резюме, список литературы, таблицы, подрисуночные подписи – шрифт Times New Roman, размер 10 пт. Без автоматической расстановки переносов. Формулы, их компоненты и все переменные в тексте и отдельно в строках набираются только с помощью редактора формул Microsoft Equation 3.0 или MathType 5.0–6.0; текст и переменная – курсивом, матрица и вектор – полужирным курсивом; размер: 12 пт., 9 пт., 7 пт., 18 пт., 12 пт. (обычный, индекс, мелкий индекс, крупный символ мелкий символ – соответственно). Каждая формула отделяется от основного текста интервалом в 6 пунктов. Поля зеркальные: верхнее – 30 мм, нижнее – 30 мм, внутри – 30 мм, снаружи – 20 мм. Междустрочный интервал – одинарный. Абзацный отступ – 1 см.

3. Текст рукописи должен соответствовать следующей структурной схеме: индекс УДК в верхнем левом углу страницы; **НАЗВАНИЕ** статьи – полужирный, по центру (прописными буквами без переноса слов); копирайт, год, *инициалы и фамилия авторов*, полужирный, курсив, по левому краю **аннотация** объемом до 100 слов, должна кратко отражать предмет статьи, примененные методы исследований и основные результаты, полученные авторами, и заканчиваться *ключевыми словами* (до 10 слов, отделяются друг от друга точкой с запятой); **введение** (постановка проблемы в общем виде и связь с важнейшими научными и практическими задачами, анализ последних исследований и публикаций, в которых начато решение данной проблемы и на которые опирается автор, выделение нерешенных ранее частей общей проблемы, которым посвящена статья, формулировка целей статьи); **основная часть** (где излагаются основные материалы исследования с полным обоснованием полученных научных результатов), как правило, содержит такие структурные элементы: **постановка задачи**, **метод решения** (методика эксперимента), **анализ результатов**; **выводы** по данному исследованию (кратко и четко подытоживаются основные результаты, полученные авторами и перспективы дальнейших изысканий в данном направлении); **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**. Далее приводится название статьи, инициалы и фамилия авторов, аннотация, ключевые слова на

английском языке (перевод). В конце статьи обязательно указываются следующие сведения об авторах: фамилия, имя, отчество всех авторов полностью (на русском и английском языке); ученая степень и звание (на русском и английском языке); полное название организации – место работы каждого автора в именительном падеже, страна, город (на русском и английском языке); адрес электронной почты каждого автора; корреспондентский почтовый адрес и телефон для контактов. Дополнительно размещаются название статьи (строчными буквами, первая – прописная) на русском и английском языках. Страницы рукописи должны быть последовательно пронумерованы. Все числовые значения физических величин выражаются в системе СИ. В десятичных дробях целая часть должна отделяться от дробной запятой, а не точкой. Для текстового материала используется настоящее время (за исключением обращения к предыдущим статьям).

4. Рисунки и таблицы располагаются по тексту строго в пределах печатного поля книжной ориентации страниц после первого упоминания. Вся текстовая информация на рисунках должна быть четкой и разборчивой и не иметь лишних деталей (например, на графиках не допускаются «вторичные» отметки на координатных осях и т.п.). Необходимо следить за тем, чтобы после возможного уменьшения до размера 80 мм высота букв и цифр на рисунке оставалась не менее 2 мм. Каждый рисунок имеет подпись (не совмещенную с рисунком), а таблица – заглавие (выравнивание – по центру). Все рисунки и таблицы должны быть последовательно пронумерованы арабскими цифрами. Желательно прилагать иллюстративный материал в графическом формате JPG, TIFF, BMP и др. (графики – черно-белые, с разрешением 300 dpi; фотографии – в оттенках серого, 300 dpi) в виде отдельных файлов с названиями *gis1*, *gis2*, ... . Сканированные рисунки не принимаются.

5. Формулы выравниваются по центру и имеют, в случае необходимости, сквозную нумерацию по правому краю. Нумеровать следует только те формулы, на которые имеются ссылки в тексте.

6. Перечень литературных источников (**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**) приводится общим списком в конце рукописи *в порядке ссылок* в тексте (а не в алфавитном порядке) на языке оригинала в соответствии с ГОСТ 7.1-2003 «Библиографическая запись. Библиографическое описание» и ГОСТ 7.05-2008 «Библиографическая ссылка». Ссылка на источник дается в квадратных скобках. Ссылки допускаются только на опубликованные работы. Необходимо включение в список как можно больше свежих первоисточников по исследуемому вопросу (не более чем трех-четырёхлетней давности). Не следует ограничиваться цитированием работ, принадлежащих только одному коллективу авторов или исследовательской группе. Желательны ссылки на современные зарубежные публикации. Статьи, не содержащие ссылок на работы, которые вышли в течение последнего десятилетия, как правило, автоматически считаются такими, которые не соответствуют редакционным требованиям.

7. Статья сопровождается письмом-заявлением от организации, сведениями об авторах (фамилия, имя, отчество, ученая степень, ученое звание, место работы, должность, почтовый адрес, телефон, E-mail).

8. Рукописи, не соответствующие редакционным требованиям, и статьи, не соответствующие тематике журнала, к рассмотрению не принимаются.

9. Редакция оставляет за собой право проводить редакционную правку рукописей. В случае отказа в публикации статей редколлегия не возвращает автору рукопись статьи. Корректур статей авторам не высылаются.

10. Плата с авторов за публикацию статей не взимается.

Материалы представляются по адресу: 83001, г. Донецк, ул. Университетская, 24.

Контактный тел.: (062) 302-92-93.

E-mail: [vestnikdonnu\\_a@mail.ru](mailto:vestnikdonnu_a@mail.ru)

Сайт: <http://donnu.ru/vestnikA>

Доступ к электронным версиям журнала за период 2008–2014 гг. имеется на сайте библ. им. В.И. Вернадского <http://nbuv.gov.ua/node/1539> раздел Научная периодика.

*Научное издание*

**Вестник Донецкого национального университета  
Серия А: Естественные науки**

**2016. – № 2**

Редактор: *Е.В. Алтухов*  
Технический редактор: *М.В. Фоменко*

Свидетельство о государственной регистрации № 362 от 18.01.2016 г.

---

Адрес редакции:  
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,  
ул. Университетская, 24,  
83001, г. Донецк  
Тел: (062) 302-92-56, 302-92-93  
E-mail: [vestnikdonnu\\_a@mail.ru](mailto:vestnikdonnu_a@mail.ru)  
URL: <http://donnu.ru/vestnikA>

---

Подписано в печать 05.05.2016 г.  
Формат 60×84/8. Бумага офсетная.  
Печать – цифровая. Усл. печ. л. 13,4.  
Тираж 100 экз. Заказ. № 16-Ин133

ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»  
83001, г. Донецк, ул. Университетская, 24  
Свидетельство о внесении субъекта издательской деятельности  
в Государственный реестр  
серия ДК № 1854 от 24.06.2004 г.