ISSN 1817-2237

Вісник Донецького національного університету

НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ
Заснований у 1997 році

Серія А природничі науки

1/2012

Адреса редакції: Донецький національний університет
вул. Університетська, 24
83001, Донецьк

Тел: (062) 305-16-51
E-mail: res.pro-rector@donnu.edu.ua

Вісник Донецького національного університету

НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ

ЗАСНОВАНИЙ У 1997 РОЦІ

Серія А. **Природничі науки** **№ 1/2012**

ЗМІСТ

Хімія

Біологія

Додаток

Вестник Донецкого национального университета

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

ОСНОВАН В 1997 ГОДУ

Серия А. **Естественные науки** **№ 1/2012**

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

Механика

Физика

Химия

Биология

Приложение

Bulletin of Donetsk National University

SCIENTIFIC JOURNAL

FOUNDED IN 1997

***Series A.* Natural Sciences** **№ 1/2012**

CONTENTS

Mathematics

Mechanics

Physics

Chemistry

Biology

Appendix

МАТЕМАТИКА

УДК 517.5

ТЕОРЕМА О СРЕДНЕМ ДЛЯ ИСКАЖЁННОЙ СВЕРТКИ НА СФЕРЕ

В. С. Василянская, Вит. В. Волчков

Получен аналог классической теоремы о среднем для искажённой свёртки на сфере, при этом был подсчитан инвариантный оператор для данной искаженной свертки и найдены собственные функции этого оператора.

Ключевые слова: свёртка, теорема о среднем, сферическое преобразование.

Введение. Пусть G – связная группа Ли, K – её компактная подгруппа, G/K – однородное пространство левых смежных классов gK. Обозначим через $\mathbf{D}(G/K)$ алгебру дифференциальных операторов на G/K, инвариантных относительно всех сдвигов $xK \to gxK$ на G/K (см. [1, глава 2, §4]). Общей собственной функцией на G/K называется функция, собственная для любого из операторов $D \in \mathbf{D}(G/K)$. Для гомоморфизма $\kappa\colon \mathbf{D}(G/K) \to \mathbb{C}$ положим $E_{\kappa} = \{f \in C^{\infty}(G/K)\colon\ Df = \kappa(D)f$ для любого $D \in \mathbf{D}(G/K)\}$. Каждое общее собственное пространство $E_{\kappa} \neq \{0\}$ содержит ровно одну сферическую функцию φ. Элементы f пространства E_{κ} характеризуются тем, что они удовлетворяют уравнению

$$\int_K f(xkyK)dk = f(xK)\varphi(yK), \quad x, y \in G \tag{1}$$

(см. [1, глава 4, §2]). Соотношение (1) обобщается на распределения следующим образом. Пусть Φ – множество сферических функций на G/K, $\mathcal{E}'_{\natural}(G/K)$ – пространство K-инвариантных распределений с компактными носителями, $\tilde{T}$ – сферическое преобразование распределения $T \in \mathcal{E}'_{\natural}(G/K)$, то есть $\tilde{T}(\varphi) = \left\langle T, \overset{\vee}{\varphi} \right\rangle$, $\varphi \in \Phi$, где $\overset{\vee}{\varphi}(gK) = \varphi(g^{-1}K)$, $g \in G$. Тогда

$$f * T = \tilde{T}(\varphi) f, \tag{2}$$

где $*$ обозначает свертку распределений на G/K (см. [1, глава 2, §5]). Утверждения такого типа называют теоремами о среднем для собственных функций инвариантных дифференциальных операторов. Относительно различных частных случаев формулы (2) и их обобщений см., например, [2–5].

Постановка задачи. Теоремы о среднем играют важную роль в ряде вопросов анализа, дифференциальных уравнений, интегральной геометрии и других областях. Например, при изучении ядер различных свёрточных операторов возникает необходимость в обобщениях формулы (2) для других типов свёртки. В связи с теорией уравнений свёртки на сфере [5], представляют интерес теоремы о среднем для свёртки вида:

$$(f_1 * f_2)(z) = \int_G f_1(go) f_2(g^{-1}z) \left(\frac{1 + \langle go, z \rangle}{1 + \langle z, go \rangle} \right)^S dg, \tag{3}$$

где $G = PSU(2)$ (см. [6, лекция 27]), $\langle z, go \rangle = z \cdot \overline{go}$, $s \in \mathbb{R}$.

Ранее изучался лишь случай $s = 0$ [4, часть 2].

Построение решения задачи. Пусть $\overline{C}$ – расширенная комплексная плоскость со стандартной структурой многообразия и с римановой структурой, задаваемой на $\mathbb{C}$ метрическим тензором

$$g_{i,j} = \frac{\delta_{i,j}}{(1 + |z|^2)^2}$$

($\delta_{i,j}$ – символ Кронекера). Это риманово многообразие изометрично двумерной сфере постоянной секционной кривизны 4. Группа G действует на $\overline{C}$ посредством отображений

$$g(z)=\frac{az-\overline{b}}{bz+\overline{a}}, \quad |a|^2+|b|^2=1. \tag{4}$$

Риманова мера на $\mathbb{C}$ имеет вид

$$d\mu(z)=dm(z)\left(1+|z|^2\right)^{-2},$$

где $dm(z)$ – мера Лебега в $\mathbb{R}^2$. Считаем, что мера Хаара dg на G нормирована соотношением

$$\int\limits_G f(go)dg=\int\limits_C f(z)d\mu(z), \quad f\in L^1(\mathbb{C},d\mu). \tag{5}$$

Пусть $d(\cdot,\cdot)$ – функция расстояния на $\overline{C}$. Для $0<R\le\pi/2$ положим

$$B_R=\left\{z\in\overline{C}:d(0,z)<R\right\}, \quad \overline{B}_R=\left\{z\in\overline{C}:\ d(0,z)\le R\right\}.$$

Будем использовать следующие классы функций и распределений в B_R: $L^{1,loc}(B_R)$ – совокупность локально интегрируемых функций в B_R; $RA(B_R)$ – класс вещественно-аналитических функций; $\mathcal{E}'(B_R)$ – пространство распределений с компактным носителем; $\mathcal{E}'_\hbar(B_R)$ – множество радиальных распределений из $\mathcal{E}'(B_R)$.

Пусть $T\in\mathcal{E}'_\hbar(B_R)$. Введём чётную целую функцию $\boldsymbol{F}(T)$ с помощью равенства

$$\boldsymbol{F}(T)(\lambda)=\left\langle T,H_\lambda\right\rangle, \quad \lambda\in\mathbb{C}, \tag{6}$$

где

$$H_\lambda(z)=(1+|z|^2)^{-S}F\left(s+\frac{1+\lambda}{2},s+\frac{1-\lambda}{2};1;\frac{|z|^2}{|z|^2+1}\right),$$

$F(\alpha,\beta;\gamma;z)$ – аналитическое продолжение на $\mathbb{C}\setminus[1,+\infty)$ гипергеометрического ряда

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\Gamma(\alpha+k)\Gamma(\beta+k)\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma+k)}\frac{z^k}{k!}, \quad |z|<1.$$

Кроме того, положим $r(T)=\inf\left\{r>0:\ \operatorname{supp}T\subset B_R\right\}$.

Для $f\in C^\infty(B_R)$, $0<R\le\pi/4$, определим свёртку

$$(f*T)(g^{-1}o)=\left\langle T,f(g^{-1}z)\left(\frac{1+\langle go,z\rangle}{1+\langle z,go\rangle}\right)^S\right\rangle, \quad g^{-1}o\in B_{R-r(T)}, \tag{7}$$

где ветвь степени выделяется условием $1^S=1$.Указанное определение корректно и когда функция T совпадает с (3) (см. лемму 1 ниже). Определим дифференциальный оператор $\boldsymbol{L}$ следующим образом:

$$\boldsymbol{L}=L_{\overline{C}}+A_1+A_2, \tag{8}$$

где $L_{\overline{C}}$ – оператор Лапласа-Бельтрами на $\overline{C}$,

$$A_1=-4s^2|z|^2Id, \quad A_2=-4s\left(1+|z|^2\right)\left(z\frac{\partial}{\partial z}-\overline{z}\frac{\partial}{\partial\overline{z}}\right), \tag{9}$$

Id – тождественный оператор.

Основным результатом данной работы является следующая теорема.

Теорема 1. Пусть $T\in\mathcal{E}'_\hbar(B_R)$, $0<R\le\dfrac{\pi}{4}$, и $\boldsymbol{L}(f)=\left(4s^2+1-\lambda^2\right)f$ в B_R при некотором $\lambda\in\mathbb{C}$. Тогда

$$f*T=\boldsymbol{F}(T)(\lambda)f \quad \text{в} \quad B_{R-r(T)} \tag{10}$$

Прежде всего, установим корректность определения (7). Обозначим, через $SO(2)$ группу вращений $\mathbb{R}^2$.

Лемма 1. Пусть $T\in\mathcal{E}'_\hbar(B_R)$, $f\in C^\infty(B_R)$, $0<R\le\pi/4$. Тогда функция

$$\Theta(g)=\left\langle T, f(g^{-1}z)\left(\frac{1+\langle go,z\rangle}{1+\langle z,go\rangle}\right)^S\right\rangle, \quad g\in G:\ g^{-1}o\in B_{R-r(T)}$$

постоянна на правых классах смежности группы G по подгруппе $SO(2)$ и является, таким образом, функцией от $g^{-1}o$. Кроме того, если $T\in (L^{1,loc}\cap\mathcal{E}'_{\hbar})(B_R)$, то

$$\left(f*T\right)(z)=\int\limits_G f\left(go\right)T\left(g^{-1}z\right)\left(\frac{1+\langle go,z\rangle}{1+\langle z,go\rangle}\right)^S dg\,,\quad z\in B_{R-r(T)}\,. \tag{11}$$

Доказательство. Для $\tau\in SO(2)$ имеем

$$\Theta(\tau g)=\left\langle T, f(g^{-1}\tau^{-1}z)\left(\frac{1+\langle \tau go,z\rangle}{1+\langle z,\tau go\rangle}\right)^S\right\rangle=\left\langle T, f(g^{-1}\tau^{-1}z)\left(\frac{1+\langle go,\tau^{-1}z\rangle}{1+\langle \tau^{-1}z,go\rangle}\right)^S\right\rangle$$

Отсюда и из радиальности T получаем $\Theta(\tau g)=\Theta(g)$, что доказывает первое утверждение.

Пусть $T\in (L^{1,loc}\cap\mathcal{E}'_{\hbar})(B_R)$, тогда

$$\left(f*T\right)\left(g^{-1}o\right)=\int\limits_{B_R} T\left(z\right)f\left(g^{-1}z\right)\left(\frac{1+\langle go,z\rangle}{1+\langle z,go\rangle}\right)^S d\mu(z)\,. \tag{12}$$

Прямое вычисление показывает, что

$$\frac{1+\langle go,z\rangle}{1+\langle z,go\rangle}=\frac{1+\langle g^{-1}z,g^{-1}o\rangle}{1+\langle g^{-1}o,g^{-1}z\rangle}\,. \tag{13}$$

Используя (12), (13), инвариантность $d\mu$ относительно G и (5), получаем

$$\left(f*T\right)\left(g^{-1}o\right)=\int\limits_{B_R} T(z)f\left(g^{-1}z\right)\left(\frac{1+\langle g^{-1}z,g^{-1}o\rangle}{1+\langle g^{-1}o,g^{-1}z\rangle}\right)^S d\mu(z)=$$

$$=\int\limits_{B_R} f(w)T(gw)\left(\frac{1+\langle w,g^{-1}o\rangle}{1+\langle g^{-1}o,w\rangle}\right)^S d\mu(w)=\int\limits_G f(ho)T(gho)\left(\frac{1+\langle ho,g^{-1}o\rangle}{1+\langle g^{-1}o,ho\rangle}\right)^S dh\,.$$

Учитывая, что $T(gho)=T(h^{-1}g^{-1}o)$, приходим к (11).

Далее установим инвариантность L относительно «искаженных сдвигов» (11). Доказательство этого факта удобно разбить на несколько лемм.

Лемма 2. Имеет место равенство

$$L_{\overline{C}}(f_1f_2)=f_1L_{\overline{C}}f_2+f_2L_{\overline{C}}f_1+4\left(1+|z|^2\right)^2\left(\frac{\partial f_1}{\partial z}\frac{\partial f_2}{\partial\overline{z}}+\frac{\partial f_1}{\partial\overline{z}}\frac{\partial f_2}{\partial z}\right).$$

Доказательство. Оператор $L_{\overline{C}}$ имеет вид

$$L_{\overline{C}}=\left(1+|z|^2\right)^2\Delta\,, \tag{14}$$

где Δ – лапласиан в $\mathbb{R}^2$ [5]. Отсюда следует

$$L_{\overline{C}}(f_1f_2)=f_1L_{\overline{C}}f_2+f_2L_{\overline{C}}f_1+2\left(1+|z|^2\right)^2\left(\frac{\partial f_1}{\partial x}\frac{\partial f_2}{\partial x}+\frac{\partial f_1}{\partial y}\frac{\partial f_2}{\partial y}\right).$$

Учитывая, что

$$\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{\partial f}{\partial z}+\frac{\partial f}{\partial\overline{z}}\,,\qquad \frac{\partial f}{\partial y}=i\left(\frac{\partial f}{\partial z}-\frac{\partial f}{\partial\overline{z}}\right),$$

получаем требуемое.

Всюду ниже считаем, что выполнено (4). Положим

$$\boldsymbol{g}(z)=g^{-1}(z)=\frac{\overline{a}z+\overline{b}}{-bz+a},\quad u_S(z)=\left(\frac{1+\langle go,z\rangle}{1+\langle z,go\rangle}\right)^S=\left(\frac{|a|^2-a\overline{b}\overline{z}}{|a|^2-\overline{a}bz}\right)^S.$$

Лемма 3. Имеет место равенство

$$L_{\overline{C}}(u_S)(z)=-4s^2|a|^2|b|^2\left(\frac{1+|z|^2}{|a|^2-\overline{a}bz}\right)^2 u_{S-1}(z). \tag{15}$$

Доказательство. Имеем

$$\frac{\partial u_S}{\partial z}=\frac{s\overline{a}b}{|a|^2-\overline{a}bz}u_S(z),\quad \frac{\partial u_S}{\partial\overline{z}}=-\frac{sa\overline{b}}{|a|^2-\overline{a}bz}u_{S-1}(z). \tag{16}$$

Из (16) находим

$$\frac{\partial^2 u_S}{\partial z\partial\overline{z}}=\frac{s\overline{a}b}{|a|^2-\overline{a}bz}\frac{\partial u_S}{\partial\overline{z}}=-\frac{s^2|a|^2|b|^2}{(|a|^2-\overline{a}bz)^2}u_{S-1}(z).$$

Отсюда и из (14) следует (15).

Лемма 4. Пусть $\Phi(z)=f(\boldsymbol{g}\,z)\,u_S(z)$. Тогда

$$\frac{\partial\Phi}{\partial z}=\frac{\partial f}{\partial z}(\boldsymbol{g}\,z)\frac{u_S(z)}{(a-bz)^2}+s\overline{a}bf(\boldsymbol{g}\,z)\frac{u_S(z)}{|a|^2-\overline{a}bz}, \tag{17}$$

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\overline{z}}=\frac{\partial f}{\partial\overline{z}}(\boldsymbol{g}\,z)\frac{u_S(z)}{(\overline{a}-\overline{b}\overline{z})^2}+sa\overline{b}f(\boldsymbol{g}\,z)\frac{u_S(z)}{|a|^2-\overline{a}bz}. \tag{18}$$

Доказательство. Поскольку $\boldsymbol{g}$ — голоморфное отображение**,**

$$\frac{\partial}{\partial z}(f\circ\boldsymbol{g})=\frac{\partial f}{\partial z}(\boldsymbol{g}\,z)\frac{\partial\boldsymbol{g}}{\partial z}=\frac{\partial f}{\partial z}(\boldsymbol{g}\,z)\frac{1}{(a-bz)^2}, \tag{19}$$

$$\frac{\partial}{\partial\overline{z}}(f\circ\boldsymbol{g})=\frac{\partial f}{\partial\overline{z}}(\boldsymbol{g}\,z)\frac{\partial\overline{\boldsymbol{g}}}{\partial\overline{z}}=\frac{\partial f}{\partial\overline{z}}(\boldsymbol{g}\,z)\frac{1}{(\overline{a}-\overline{b}\overline{z})^2}. \tag{20}$$

Из (19), (20) и (16) получаем (17), (18).

Лемма 5. Пусть $a_1(z)=-4s^2|z|^2$, $a_2(z)=-4s(1+|z|^2)$. Тогда

$$a_1(\boldsymbol{g}\,z)=a_1(z)-\frac{4s^2|a|^2(1+|z|^2)}{\left||a|^2-a\overline{b}\overline{z}\right|^2}\left(2|b|^2(1-|z|^2)+\overline{a}bz+a\overline{b}\overline{z}\right), \tag{21}$$

$$(a-bz)^2a_2(\boldsymbol{g}\,z)\boldsymbol{g}(z)=-\frac{4sa\overline{b}(1+|z|^2)^2}{|a|^2-a\overline{b}\overline{z}}+a_2(z)\cdot z, \tag{22}$$

$$(\overline{a}-\overline{b}\overline{z})^2a_2(\boldsymbol{g}\,z)\overline{\boldsymbol{g}}(z)=\frac{4s\overline{a}b(1+|z|^2)^2}{|a|^2-\overline{a}bz}+a_2(z)\cdot\overline{z}. \tag{23}$$

Доказательство. Соотношения (21) – (23) получаются непосредственными вычислениями с использованием равенства $|a|^2+|b|^2=1$.

Следующее утверждение даёт отмеченную выше инвариантность $\boldsymbol{L}$ относительно «искаженных сдвигов».

Лемма 6. Оператор L обладает обобщенным свойством инвариантности относительно группы G:

$$\mathrm{L}\,(f(\boldsymbol{g}\,z)\,u_S(z))=(\mathrm{L}f)(\boldsymbol{g}\,z)\,u_S(z). \tag{24}$$

Доказательство. На основании леммы 2 имеем

$$L_{\overline{C}}((f\circ\boldsymbol{g})\,u_S)=(f\circ\boldsymbol{g})\,L_{\overline{C}}(u_S)+u_SL_{\overline{C}}(f\circ\boldsymbol{g})+(f\circ4\left(1+|z|^2\right)^2\left(\frac{\partial u_S}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\overline{z}}(f\circ\boldsymbol{g})+\frac{\partial}{\partial z}(f\circ\boldsymbol{g})\frac{\partial u_S}{\partial\overline{z}}\right).$$

Поскольку $\boldsymbol{g}$ является движением $\overline{C}$, то $L_{\overline{C}}(f\circ\boldsymbol{g})=(L_{\overline{C}}f)\circ\boldsymbol{g}$.

Тогда из (15) – (18) находим

$$L_{\overline{C}}((f\circ \boldsymbol{g})\ u_S) = u_S(L_{\overline{C}}f)\circ \boldsymbol{g} - 4s^2|a|^2|b|^2\left(\frac{1+|z|^2}{|a|^2-\overline{a}bz}\right)^2 u_{S-1}(z)f(\boldsymbol{g}\,z) +$$

$$+4(1+|z|^2)^2\left(\frac{s\overline{a}bu_S(z)}{(|a|^2-\overline{a}bz)(\overline{a}-\overline{b}\overline{z})^2}\frac{\partial f}{\partial \overline{z}}(\boldsymbol{g}\,z) - \frac{\partial f}{\partial z}(\boldsymbol{g}\,z)\frac{sa\overline{b}u_{S-1}(z)}{(|a|^2-\overline{a}bz)(a-bz)^2}\right). \qquad (25)$$

Используя (9) и лемму 3, получаем

$$A_1((f\circ \boldsymbol{g})\ u_S)(z) = a_1(z)u_S(z)f(\boldsymbol{g}\,z), \qquad (26)$$

$$A_2((f\circ \mathrm{g})\ u_S)(z) = a_2(z)\left(\frac{zu_S(z)}{(a-bz)^2}\frac{\partial f}{\partial z}(\mathrm{g}\,z) - \frac{\overline{z}u_S(z)}{(\overline{a}-\overline{b}\overline{z})^2}\frac{\partial f}{\partial \overline{z}}(\mathrm{g}\,z) + \right.$$

$$\left. + \left(\overline{a}bzu_S(z) + a\overline{b}\overline{z}u_{S-1}(z)\right)f(\boldsymbol{g}\,z)\frac{s}{|a|^2-\overline{a}bz}\right). \qquad (27)$$

Соотношения (25) – (27) дают

$$\mathrm{L}\ (f\circ \mathrm{g})\ u_S) = u_S(L_{\overline{C}}f)\circ \mathrm{g} + C_1(z)f(\mathrm{g}\,z) + C_2(z)\frac{\partial f}{\partial z}(\mathrm{g}\,z) + C_3(z)\frac{\partial f}{\partial \overline{z}}(\mathrm{g}\,z), \qquad (28)$$

где

$$C_1(z) = a_1(z)u_S(z) - 4s^2|a|^2|b|^2\left(\frac{1+|z|^2}{|a|^2-\overline{a}bz}\right)^2 u_{S-1}(z) + \frac{s}{|a|^2-\overline{a}bz}(\overline{a}bzu_S(z) + a\overline{b}\overline{z}u_{S-1}(z)),$$

$$C_2(z) = -\frac{4sa\overline{b}u_{S-1}(z)(1+|z|^2)^2}{(|a|^2-\overline{a}bz)(a-bz)^2} + \frac{a_2(z)zu_S(z)}{(a-bz)^2}, \quad C_3(z) = \frac{4s\overline{a}bu_S(z)(1+|z|^2)^2}{(|a|^2-\overline{a}bz)(\overline{a}-\overline{b}\overline{z})^2} - \frac{a_2(z)\overline{z}u_S(z)}{(\overline{a}-\overline{b}\overline{z})^2}.$$

С другой стороны

$$(\mathrm{L}f)(\mathrm{g}\,z)\ u_S(z) = u_S(L_{\overline{C}}f)(\mathrm{g}\,z) + u_S(z)\ a_1(\mathrm{g}\,z)f(\mathrm{g}\,z) +$$

$$+u_S(z)\ a_2(\mathrm{g}\,z)\mathrm{g}(z)\frac{\partial f}{\partial z}(\mathrm{g}\,z) - u_S(z)\ a_2(\mathrm{g}\,z)\overline{\mathrm{g}}(z)\frac{\partial f}{\partial \overline{z}}(\mathrm{g}\,z). \qquad (29)$$

Сравнивая (28) с (29), из леммы 5 видим, что имеет место соотношение (24).

Найдем радиальные собственные функции оператора L .

Лемма 7. Пусть $\lambda\in\mathbb{C}$ и радиальная функция $f:\mathbb{C}\to\mathbb{C}$ является гладким решением уравнения

$$\mathrm{L}f = (4s^2+1-\lambda^2)f. \qquad (30)$$

Тогда

$$f(z) = f(0)H_\lambda(z). \qquad (31)$$

Доказательство. Полагая $f(z)=\varphi(\rho)$, где $\rho=|z|$, имеем

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{1}{2}\frac{\varphi'(\rho)}{\rho}\overline{z}, \quad \frac{\partial f}{\partial \overline{z}} = \frac{1}{2}\frac{\varphi'(\rho)}{\rho}z, \quad (L_{\overline{C}}f)(z) = \left(1+\rho^2\right)^2\left(\varphi'(\rho) + \frac{\varphi'(\rho)}{\rho}\right).$$

Отсюда

$$(\mathrm{L}f)(z) = (1+\rho^2)^2\left(\varphi''(\rho) + \frac{\varphi'(\rho)}{\rho}\right) - 4s^2\rho^2\varphi(\rho).$$

Следовательно уравнение (30) можно переписать в виде

$$\left(1+\rho^2\right)^2(\varphi''(\rho)+\varphi'(\rho)/\rho) - \varphi(\rho)\left(4s^2\rho^2+4s^2+1-\lambda^2\right) = 0. \qquad (32)$$

Обозначим $\nu=(1-\lambda)/2$. Из (31) для функции $\psi(\rho)=(1+\rho^2)^\nu\varphi(\rho)$ получаем уравнение

$$\rho(1+\rho^2)\psi''(\rho) + \psi'(\rho)(1+\rho^2(4\nu+1)) + 4\rho(\nu^2-s^2)\psi(\rho) = 0. \qquad (33)$$

С другой стороны гипергеометрическая функция $h(\rho)=F(\alpha,\beta;\gamma;-\rho^2)$ удовлетворяет уравнению

$$\rho(1+\rho^2)h''(\rho) + h'(\rho)(2\gamma-1+\rho^2(2\alpha+2\beta+1)) + 4\alpha\beta\rho h(\rho) = 0. \qquad (34)$$

(см. [7, глава 2, формула 2.1.1(1)]). Сравнивая (33) и (34) и учитывая гладкость ψ в нуле, заключаем, что

$$f(z)=f(0)\left(1+\rho^2\right)^{\nu}F\left(-s+\nu,s+\nu;1;-\rho^2\right). \tag{35}$$

Равенство (35) и формула

$$F(\alpha,\beta;\gamma;z)=(1-z)^{-\beta}F\left(\gamma-\alpha,\beta;\gamma;\frac{z}{z-1}\right).$$

(см. [7, глава 2, формула 2.9(4)]) дают (31).

Перейдем к доказательству теоремы 1. Поскольку L является эллиптическим оператором (см. (9), (15)), то $f\in RA(B_R)$. Зафиксируем $g\in G$, такое что $g\overline{B}_{r(T)}\subset B_R$. Пусть $\varepsilon_0=\sup\{\varepsilon>0: g\overline{B}_{r(T)}\subset B_{R-\varepsilon}\}$. Для $z\in B_{r(T)+\varepsilon_0}$ положим

$$f_g(z)=\int_{SO(2)}f(g^{-1}\tau z)\left(\frac{1+\langle go,z\rangle}{1+\langle z,go\rangle}\right)^S d\tau, \tag{36}$$

где $d\tau$ — мера Хаара на $SO(2)$, нормированная соотношением

$$\int_{SO(2)}d\tau=1. \tag{37}$$

Определение f_g показывает, что

$$f_g\in RA_h(B_{r(T)+\varepsilon_0}) \text{ и } f_g(0)=f(g^{-1}o). \tag{38}$$

Кроме того,

$$f_g(z)=\int_{SO(2)}f(g^{-1}\tau z)\left(\frac{1+\langle \tau^{-1}go,z\rangle}{1+\langle z,\tau^{-1}go\rangle}\right)^S d\tau. \tag{39}$$

Из (39) и леммы 6 получаем

$$(\mathrm{L}f_g)(z)=(4s^2+1-\lambda^2)f_g(z).$$

Тогда (см. (6), (38) и лемму 7) $f_g(z)=f(g^{-1}o)H_\lambda(z)$ и $\langle T,f_g\rangle=f(g^{-1}o)\mathrm{F}(T)(\lambda)$. Теперь из (36), (37), (7) и радиальности T следует (10). Таким образом, теорема 1 доказана.

При $s=0$ свёртка (3) совпадает со свёрткой на сфере $\mathbb{S}^2$. В этом случае утверждение теоремы 1 является известным (см. [1, глава 4, §2]). В общем случае свёртку (3) можно рассматривать как аналог искаженного уравнения свёртки на $\mathbb{C}$ [5, глава 12]. Теорема 1 является одним из ключевых инструментов для получения указанных результатов.

РЕЗЮМЕ

Отримано аналог класичної теореми про середнє для викривленої згортки на сфері, при цьому було підраховано інваріантний оператор для даної викривленої згортки та знайдені власні функції цього оператора.

Ключові слова: згортка, теорема про середнє, сферичне перетворення.

SUMMARY

An analogue of the classical mean value theorem for distorted convolution on a sphere is obtained, the invariant operator for the given distorted convolution has been thus counted up and eigen functions of this operator are found.

Keywords: convolution, mean value theorem, spherical transform.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хелгасон С. Группы и геометрический анализ / С. Хелгасон // Интегральная геометрия. – М.: Мир, 1987. – 763 с.
2. Willmore T.J. Mean value theorem in harmonic Riemann spaces / T.J. Willmore. – London, 1950. – V.25. – P. 54-57.
3. Godement R. Une generalization du theoreme de la moyenne pour les fonctions harmoniques / R. Godement. – Paris, 1952. – V.234. – P. 2137-2139.
4. Volchkov V.V. Integral geometry and convolution equations/ V.V.Volchkov. – Dordrecht: Kluwer, 2003. – 454 p.
5. Volchkov V.V. Harmonic Analysis of Mean Periodic Functions on Symmetric Spaces and the Heisenberg Group / V.V. Volchkov, Vit.V. Volchkov. – London: Springer, 2009. – 671 p.
6. Постников М.М. Лекции по геометрии. Семестр 1 / М.М. Постников // Аналитическая геометрия. – М.: Наука, 1986. – 415 с.
7. Беймен Г. Высшие трансцендентные функции / Г. Беймен, А. Эрдгейи. – М.: Наука, 1973. – Т.1 – 294 с.

Поступила в редакцию 26.01.2012 г.

УДК 517.928

ЗАДАЧА КОШІ НЕЛІНІЙНОЇ СИСТЕМИ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ ІЗ ЗАПІЗНЕННЯМ

Г. В. Завізіон, І. Г. Ключник
Кіровоградський державний педагогічний університет ім. В. Винниченка, м. Кіровоград

Побудовано асимптотичний розв'язок нелінійної сингулярно збуреної системи диференціальних рівнянь із запізненням.
Ключові слова: задача Коші, сингулярно збурена система диференціальних рівнянь, асимптотичний розв'язок, змінне запізнення.

Вступ. Сингулярно збурені системи диференціальних рівнянь із запізненням вивчаються в різних напрямках. Так в [1] пропонуються методи асимптотичного інтегрування лінійних сингулярно збурених систем із запізненням, а в [2] метод кроків з [1] застосовується до лінійних інтегро-диференціальних систем рівнянь з сталим запізненням і виродженою матрицю при похідній. Питання існування розв'язку і обґрунтування методу усереднення для багаточастотних крайових задач з сталим запізненням для сингулярно збурених систем вивчалися в [3]. В [4] досліджуються питання існування інтегральних многовидів в лінійних сингулярно збурених диференціально-різнецевих рівняннях. За допомогою примежових функцій в [5] інтегруються нелінійні диференціально-різнецеві рівняння з малим запізненням. Самі проміжкові функції задовольняють автономну нелінійну систему диференціальних рівнянь або лінійну неоднорідну систему диференціальних рівнянь.

В даній статті розглядається нелінійна сингулярно збурена система диференціальних рівнянь з змінним запізненням. Будуються асимптотичні розв'язки, вигляд яких залежить від кратності коренів характеристичного рівняння і метод дає можливість в явному вигляді записати потрібну кількість наближень розв'язку. Пропонується спосіб побудови асимптотичного розв'язку задачі Коші нелінійної сингулярно збуреної системи диференціальних рівнянь із змінним запізненням у випадку простих коренів характеристичного рівняння.

Асимптотичний розв'язок. Розглянемо систему диференціальних рівнянь вигляду

$$\varepsilon \frac{dx}{dt} = f(t, x(t,\varepsilon), x(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon), \varepsilon), \tag{1}$$

з початковою умовою

$$x(0,\varepsilon) = x_0 \tag{2}$$

де $\varepsilon(0<\varepsilon\le\varepsilon_0)$ – малий параметр, $t\in[0;L], \Delta(t)$ – скалярна функція, $f(t,x,y,\varepsilon)$, $x(t,\varepsilon), y = x(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon), x_0 - n$ – вимірні вектори. Припускаємо виконання умов:

1) вектор $f(t,x,y,\varepsilon)$ має розвинення

$$f(t,x,y,\varepsilon) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i f_i(t,x,y),$$

і вектори $f(t,x,y)\,(i=0,1...)$ мають нескінченну кількість частинних похідних за змінними t,x,y і функція $\Delta(t)\ge 0, t-\varepsilon\Delta(t)\ge 0, \forall t\in[0;L]$;

2) існує ізольований корінь $\vec{x}(t)$ рівняння

$$f_0(t,\overline{x}(t),\overline{x}(t)) = 0,$$

при цьому функція $\overline{x}(t)$ нескінченно-диференційовна на відрізку $[0;L]$ і $x_0 - \overline{x}(0) = \varepsilon\beta(\varepsilon), \beta(\varepsilon)$ обмежена при $\varepsilon\to 0,$ а також $f'_{oy}(t,\overline{x}(t),\overline{x}(t)) \equiv 0;$

3) корені $\lambda_i(t)\,(i=\overline{1,n})$ характеристичного рівняння

$$\det\left\| f'_{ox}(t,\overline{x}(t),\overline{x}(t)) - \lambda\cdot E\right\| = 0$$

різні, а також виконується нерівності $\operatorname{Re}\lambda_i(t) < -\beta < 0, \forall t\in[0;L]$, де $E - n\times n$ одинична матриця; $f'_{ox}(t,\overline{x}(t),\overline{x}(t)), f'_{ox}(t,\overline{x}(t),\overline{x}(t))\,(\alpha=0,1...)$ матриці, які складені з частинних похідних від компонент вектора $f_\alpha(t,x,y)$ по компонентам відповідно векторів x і y, при $x=\overline{x}(t), y=\overline{y}(t)$.

Теорема. Якщо виконуються умови 1-3, то формальний розв'язок задачі Коші (1), (2) має вигляд

$$x(t,\varepsilon)=v(t,\varepsilon,\varepsilon)+\sum_{i=1}^{n}u_i(t,\varepsilon)\prod_i(t,\varepsilon,\varepsilon) \qquad (3)$$

де $v(t,\varepsilon,\varepsilon),u_i(t,\varepsilon)$ – n - вимірні вектори, $\prod_i(t,\varepsilon,\varepsilon)$ - скалярні функції, які мають розвинення

$$u_i(t,\varepsilon)=\sum_{s=0}^{\infty}\varepsilon^{s+1}u_{is}(t),\ \prod_i(t,\varepsilon,\varepsilon)=\sum_{s=0}^{\infty}\varepsilon^{s}\prod_{is}(t,\varepsilon),v(t,\varepsilon,\varepsilon)=v_0(t)+\varepsilon v_1(t)+\sum_{s=2}^{\infty}\varepsilon^{s}v_s(t,\varepsilon), \qquad (4)$$

$\prod_i(t,\varepsilon,\varepsilon)$ задовольняють диференціальні рівняння

$$\varepsilon\prod_{is}'(t,\varepsilon)=\lambda_i(t)\prod_{is}(t,\varepsilon)+\xi_{is}(t,\varepsilon), \qquad (5)$$

$\lambda_i(t),\xi_{is}(t,\varepsilon)$ – скалярні функції.

Доведення. Скориставшись (3), (4) розвинемо за степенями параметра ε вектор

$$f(t,v(t,\varepsilon,\varepsilon)+\sum_{i=1}^{n}u_i(t,\varepsilon)\prod_i(t,\varepsilon,\varepsilon),v(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon,\varepsilon)+\sum_{i=1}^{n}u_i(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)\prod_i(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon,\varepsilon),\varepsilon)=$$

$$=\sum_{\alpha=0}^{\infty}\varepsilon^{\alpha}(f_\alpha(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))+\sum_{s=0}^{\alpha-1}(f_{sx}'(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))(v_{\alpha-s}(t)+$$

$$+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{\alpha-1-s}u_{ij}(t)\prod_{i,\alpha-1-s-j}(t,\varepsilon))+f_{sy}'(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))(v_{\alpha-s}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)+$$

$$+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{\alpha-1-s}u_{ij}(t-\varepsilon\Delta(t))\prod_{i,\alpha-1-s-j}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon))+g_{1\alpha}(t,\varepsilon)+g_{2\alpha}(t,e)), \qquad (6)$$

де $g_{1\alpha}(t,\varepsilon)=g_{1\alpha}(t,v_l(t),v_l(t-\varepsilon\Delta(t))),\ g_{2\alpha}(t,\varepsilon)=g_{2\alpha}(t,v_l(t),v_l(t-\varepsilon\Delta(t)),p_{l1}(t,\varepsilon),p_{l1}(t-\varepsilon\Delta(t))$ – многочлени степеня α відносно вказаних аргументів, причому другий многочлен не містить одночлена нульового степеня відносно аргументів $p_{l1}(t,\varepsilon),\ p_{l1}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)(l=\overline{1,\alpha},l_1=\overline{0,\alpha-2})$; під $p_{l1}(t,\varepsilon)$ розуміють аргументи вигляду $u_{ij}(t)\prod_{i,l1-j}(t,\varepsilon)(j=\overline{0,l_1})$, а під $p_{l1}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)$ розуміємо аргумент вигляду $u_{ij}(t-\varepsilon\Delta(t))\prod_{i,l1-j}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)$. Підставляючи (3)-(6) в (1) і зрівнюючи вирази, які містять $\prod_i(t,\varepsilon,\varepsilon),\prod_i(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon,\varepsilon)$, і які їх не містять, одержимо рівняння

$$\varepsilon v'(t,\varepsilon)=f_1(t,v(t,\varepsilon)+\sum_{i=1}^{n}u_i(t,\varepsilon)\prod_i(t,\varepsilon,\varepsilon),v(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)+\sum_{i=1}^{n}u_i(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)\prod_i(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon), \qquad (7)$$

$$\varepsilon\sum_{i=1}^{n}((f_{ox}'(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t))\prod io(t,\varepsilon))+$$

$$\sum_{s=2}^{\infty}\varepsilon^{s}[\sum_{i=1}^{n}[(f_{0x}'(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))u_{i,s-1}(t)-u_{i,s-1}(t)\lambda_i(t))+$$

$$+f_{1x}'(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))u_{i,s-2}(t)+u_{i,s-2}'(t))+\sum_{j=2}^{s-1}f_{jx}'(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))u_{i,s-1-j}(t))\prod_{i0}(t,\varepsilon)+$$

$$+[f_{1y}'(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))u_{i,s-2}(t-\varepsilon\Delta(t)))+$$

$$+\sum_{j=2}^{s-1}f_{j,y}'(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))u_{i,s-1-j}(t-\varepsilon\Delta(t)))\prod_{i0}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)+\sum_{j=0}^{s-1}u_{ij}(t)\xi_{i,s-1-j}(t,\varepsilon)])+$$

$$+g_{2s}(t,\varepsilon)]]+\sum_{s=2}^{\infty}\sum_{j=1}^{s-1}\sum_{i=1}^{n}\varepsilon^{s}[\sum_{k=0}^{s-1-j}f_{kx}'\left(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))u_{i,s-1-k-j}(t)+u_{i,s-2-j}'(t)\right)\prod_{ij}(t,\varepsilon)+$$

$$+\sum_{k=0}^{s-1-j}f_{kx}'\left(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))u_{i,s-1-k-j}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)\right)\prod_{ij}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)]=0, \qquad (8)$$

де

$$f_1(t,v(t,\varepsilon)+\sum_{i=1}^{n}u_1(t,\varepsilon)\prod_i(t,\varepsilon,\varepsilon),v(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)+\sum_{i=1}^{n}u_i(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)\prod_i(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon))=$$

$$=\sum_{\alpha=0}^{\infty}\varepsilon^{\alpha}[f_\alpha(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))+\sum_{s=0}^{\alpha-1}f'_{sx}(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))v_{\alpha-s}(t)+$$

$$+\sum_{s=1}^{\alpha-1}f'_{sy}(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))v_{\alpha-s}(t-\varepsilon\Delta(t))]+\sum_{\alpha=2}^{\infty}\varepsilon^{\alpha}g_{1\alpha}(t,\varepsilon).$$

Розвинемо за степенями параметра ε наступні функції

$$v_s(t-\varepsilon\Delta(t))=\sum_{j=0}^{\infty}\varepsilon^j\bar{v}_{sj}(t),u_{is}(t-\varepsilon\Delta(t))=\sum_{j=0}^{\infty}\varepsilon^j\bar{u}_{isj}(t),$$

$$\exp(\varepsilon^{-1}\int_t^{t-\varepsilon\Delta(t)}\lambda_i(\tau)d\tau)=\exp(-\Delta(t)\lambda_i(t))(1+\sum_{j=1}^{\infty}\varepsilon^j\bar{\lambda}_{ij}(t)), \tag{9}$$

$$f_s(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))=f_s(t,v_0(t),v_0(t))+\sum_{j=1}^{\infty}\varepsilon^j(f'_{sy}(t,v_0(t),v_0(t))\bar{v}_{0j}(t)+\bar{g}_{sj1}(t)),$$

де

$$\bar{v}_{s0}(t)=v_s(t),\bar{u}_{is0}(t)=u_{is}(t),\bar{v}_{sj}(t)=(-1)^jv_s^{(j)}(t)\Delta^j(t),\bar{u}_{isj}(t)=(-1)^ju_{is}^{(j)}(t)\Delta^j(t);$$

$$\bar{\lambda}_{i1}(t)=\Delta^2(t)\lambda'(t),\bar{\lambda}_{i2}(t)=\frac{\Delta^3(t)}{2!}(\frac{1}{4}\Delta'(t)(\lambda'(t))^2-\frac{1}{3}\lambda''(t));\bar{g}_{sj1}(t)=0,$$

при $j=0,1$ і $\bar{g}_{sj1}(t)=\bar{g}_{sj}(t)$ при $j\geq 2$; $v_s^{(j)}(t)$ означає j похідну від $v_s(t);\bar{g}_{sj}(t)=\bar{g}_{sj}(\bar{v}_{01}(t)...\bar{v}_{0j}(t))$ многочлен від вказаних аргументів. Позначимо

$$\bar{f}_{sx}(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))=\frac{1}{\varepsilon}(f'_{sx}(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))-f'_{sx}(t,v_0(t),v_0(t)),$$

$$\bar{f}_{sy}(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))=\frac{1}{\varepsilon}(f'_{sy}(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))-f'_{sy}(t,v_0(t),v_0(t)))). \tag{10}$$

Підставляючи (4), (9), (10) в (7) і зрівнюючи коефіцієнти при однакових степенях ε, маємо

$$f_0(t,v_0(t),v_0(t))=0, \tag{11}$$

$$v'_0(t)=f'_{0x}(t,v_0(t),v_0(t))v_1(t)+f_1(t,v_0(t),v_0(t)), \tag{12}$$

$$v'_{\alpha-1}(t)=f_\alpha(t,v_0(t),v_0(t))+(\sum_{s=1}^{\alpha-1}f'_{sy}\bar{v}_{0,\alpha-s}(t)+\sum_{s=0}^{\alpha-1}\bar{g}_{s,\alpha-s,1}(t))+f'_{0x}(t,v_0(t),v_0(t))v_\alpha(t)+$$

$$+\sum_{s=1}^{\alpha-1}f'_{sx}(t,v_0(t),v_0(t))v_{\alpha-s}(t)+\sum_{s=0}^{\alpha-2}\bar{f}_{sx}(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t))v_{\alpha-1-s}(t)+\sum_{s=1}^{\alpha-1}\sum_{j=0}^{\alpha-1-s}\Big[f'_{sy}(t,v_0(t),v_0(t))\times$$

$$\times\bar{v}_{\alpha-s,\alpha-1-s-j}(t)\Big]+\sum_{s=1}^{\alpha-2}\sum_{j=0}^{\alpha-2-s}\bar{f}_{sy}(t,v_0(t),v_0(t-\varepsilon\Delta(t)))\bar{v}_{\alpha-s,\alpha-2-s-j}(t)+g_{1\alpha}(t,\varepsilon)). \tag{13}$$

Згідно умови 2, покладемо в (11)

$$v_0(t)=\bar{x}(t).$$

Тоді використовуючи умову 3 з рівнянь (12), (13) знаходимо $v_\alpha(t),\alpha=1,2...$ Із рівнянь (5) знайдемо, що

$$\Pi_{i0}(t,\varepsilon)=\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0},\quad \Pi_{is}(t,\varepsilon)=\exp\left(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau\right)c_{is}+\bar{\Pi}_{is}(t,\varepsilon), \tag{14}$$

де

$$\bar{\Pi}_{is}(t,\varepsilon)=\varepsilon^{-1}\int_0^t\exp(\varepsilon^{-1}\int_{t_1}^t\lambda_i(\tau)d\tau)\xi_s(t_1,\varepsilon)dt_1,s=1,2...,i=\overline{1,n}.$$

Врахувавши (3), (4) і початкову умову (2) величини $c_{is}, i=\overline{1,n}, s=0,1,...,$ однозначно знаходимо з рівнянь

$$v_0(0)+\varepsilon\sum_{i=1}^{n}u_{i0}\Pi_{i0}(0,\varepsilon)+\varepsilon v_1(0)=x_0,\quad v_s(0)+\sum_{i=1}^{n}\sum_{r=0}^{s-1}u_{ir}(0)\Pi_{i,s-1-r}(0,\varepsilon)=0, s=2,3,.... \quad (15)$$

Підставивши (14) в (8) і зробивши спрощення маємо рівняння

$$\sum_{i=1}^{n}\varepsilon\left((f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t))\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0}\right)+$$
$$+\varepsilon^2[\left(f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i1}(t)-u_{i1}(t)\lambda_i(t)+f'_{1x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)+u'_{i0}(t)\right)\times$$
$$\times\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0}+f'_{1y}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^{t-\varepsilon\Delta(t)}\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0}]+$$
$$+\sum_{s=3}^{\infty}\varepsilon^s[[f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-1}(t)-u_{i,s-1}(t)\lambda_i(t)+f'_{1x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-2}(t)+u'_{i,s-2}(t)+$$
$$+\sum_{j=2}^{s-1}f'_{jx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-1-j}(t)]\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0}+[f'_{1y}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-2}(t)$$
$$+\sum_{j=2}^{s-1}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-1-j}+\sum_{j=1}^{s-2}\sum_{l=1}^{s-2-j}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\overline{u}_{i,s-2-j,l}]\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^{t-\varepsilon\Delta(t)}\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0}+$$
$$+\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{s=l+1}^{\infty}\sum_{i=1}^{n}\varepsilon^s[[f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-l-1}(t)-u_{i,s-l-1}(t)\lambda_i(t)+f'_{1x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-l-2}(t)+$$
$$+u'_{i,s-l-2}(t)+\sum_{j=2}^{s-1}f'_{jx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-1-j}]\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{il}+f'_{1y}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-l-2}(t)+$$
$$+\sum_{j=2}^{s-1}[f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-1-l-j}(t)+\sum_{j=1}^{s-2}\sum_{r=1}^{s-2-j}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\overline{u}_{i,s-2-j-l,r}]\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^{t-\varepsilon\Delta(t)}\lambda_i(\tau)d\tau)c_{il}+$$
$$+\sum_{i=1}^{n}\varepsilon^2[u_{i0}(t)\xi_{i1}(t,\varepsilon)+g_{22}(t,\varepsilon)+\overline{f}_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-\varepsilon\Delta(t)))u_{i0}(t)\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0}+$$
$$+[f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t)]\overline{\Pi}_{i1}(t,\varepsilon)]+\sum_{k=3}^{\infty}\varepsilon^k[u_{i0}(t)\xi_{i,k-1}(t,\varepsilon)+$$
$$+\sum_{j=1}^{k-2}u_{i,j}(t)\xi_{i,k-1-j}(t,\varepsilon)+g_{2k}(t,\varepsilon)+\left(f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t)\right)\overline{\Pi}_{i,k-1}(t,\varepsilon)+$$
$$+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{j=0}^{k-2-s}\overline{f}_{sx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-\varepsilon\Delta))u_{ij}(t)\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau c_{i,k-2-s-j}+$$
$$+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{j=0}^{k-2-s}\sum_{l=0}^{k-2-s-j}\overline{f}_{sx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-\varepsilon\Delta))\overline{u}_{ijl}(t)\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^{t-\varepsilon\Delta(t)}\lambda_i(\tau)d\tau c_{i,k-2-s-j}+$$
$$+\sum_{s=2}^{k}[\sum_{j=0}^{s-1}f'_{jx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-1-j}(t)-u_{i,s-1-j}(t)\lambda_i(t)+u'_{i,s-2}]\overline{\Pi}_{i,k-s}(t,\varepsilon)+$$
$$+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{j=0}^{k-s-2}\sum_{j=1}^{k-s-j-2}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\overline{u}_{isl}(t)\overline{\Pi}_{i,k-s-2-j-l}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon))] \quad (16)$$

Підставляючи розвинення функції $\exp(\varepsilon^{-1}\int_t^{t-\varepsilon\Delta(t)}\lambda_i(\tau)d\tau)$ в степеневий ряд по ε в рівняння (16) і в одержаному рівнянні згрупуємо вирази при степенях ε, маємо рівняння для знаходження функцій $u_{is}(t)$

$$\varepsilon(f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t))+ +\varepsilon^2\Big[f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i1}(t)-u_{i1}(t)\lambda_i(t)+$$
$$+f'_{1x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)+u'_{i0}(t)+f'_{1y}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)\exp(-\Delta(t)\lambda_i(t))\Big]+$$
$$+\sum_{k=3}^{\infty}\varepsilon^k[f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,k-1}(t)-u_{i,k-1}(t)\lambda_i(t)+f'_{1x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,k-2}(t)+u'_{i,k-2}(t)+$$
$$+\sum_{j=2}^{k-1}f'_{jx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,k-1-j}(t)+f'_{1y}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,k-2}(t)+\sum_{j=2}^{k-1}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,k-1-j}(t)+$$
$$+\sum_{j=1}^{k-2}\sum_{l=1}^{k-2-j}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\bar{u}_{i,k-2-j,l}(t)\exp(-\Delta(t)\lambda_i(t))+\sum_{m=1}^{k-1}\left(\sum_{j=1}^{m-1}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,m-1-j}(t)+\right.$$
$$\left.+\sum_{j=1}^{m-2}\sum_{l=1}^{m-2-j}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\bar{u}_{i,m-2-j,l}(t)\right)\times\exp(-\Delta(t)\lambda_i(t))\bar{\lambda}_{i,k-m}(t)]=0 \tag{17}$$

З рівняння випливає, що $\xi_{is}(t,\varepsilon)$ $(s=0,1...)$ задовольняє рівняння

$$\varepsilon^2[g_{22}(t,\varepsilon)+\sum_{i=1}^{n}[u_{i0}(t)\xi_{i1}(t,\varepsilon)+\bar{f}_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-\varepsilon\Delta(t)))u_{i0}(t)\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0}+$$
$$+[f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t)]\overline{\Pi}_{i1}(t,\varepsilon)]]+\sum_{k=3}^{\infty}\varepsilon^k[g_{2k}(t,\varepsilon)+$$
$$+\sum_{i=1}^{n}[u_{i0}(t)\xi_{i,k-1}(t,\varepsilon)+\sum_{j=1}^{k-2}u_{ij}(t)\xi_{i,k-1-j}(t,\varepsilon)+\left(f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t)\right)\overline{\Pi}_{i,k-1}(t,\varepsilon)+$$
$$+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{j=0}^{k-2-s}\bar{f}_{sx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-\varepsilon\Delta(t)))u_{ij}(t)\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i,k-2-s-j}+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{j=0}^{k-2-s}\sum_{l=0}^{k-2-s-j}\bar{f}_{sx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-$$
$$-\varepsilon\Delta(t)))\bar{u}_{ijl}(t)\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^{t-\varepsilon\Delta(t)}\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i,k-2-s-j-l}+\sum_{s=2}^{k}[\sum_{j=0}^{s-1}(f'_{jx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t)))u_{i,s-1-j}(t)-$$
$$-u_{i,s-1-j}(t)\lambda_i(t)]+u'_{i,s-2}(t)]\overline{\Pi}_{i,k-s}(t,\varepsilon)+$$
$$+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{j=1}^{k-s-2}\sum_{l=0}^{k-s-j-2}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\bar{u}_{isl}(t)\overline{\Pi}_{i,k-s-2-j-l}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon)]=0\,. \tag{18}$$

Зрівнюючи коефіцієнти при однакових степенях ε в рівняннях (17) і (18), одержимо

$$C(t,\lambda_i)u_{i0}(t)=0, \tag{19}$$
$$C(t,\lambda_i)u_{i1}(t)=-u'_{i0}(t)+F_i(t)u_{i0}(t), \tag{20}$$
$$C(t,\lambda_i)u_{i,k-1}(t)=-u'_{i,k-2}(t)+F_i(t)u_{i,k-2}(t)+F_{i1k}(t), i=\overline{1,n}, k=3,4..., \tag{21}$$
$$\sum_{i=1}^{n}u_{i0}(t)\xi_{i1}(t,\varepsilon)=-\sum_{i=1}^{n}((f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t))\overline{\Pi}_{i1}(t,\varepsilon)+F_{22}(t,\varepsilon), \tag{22}$$
$$\sum_{i=1}^{n}u_{i0}(t)\xi_{i,k-1}(t,\varepsilon)=-\sum_{i=1}^{n}((f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i0}(t)-u_{i0}(t)\lambda_i(t))\overline{\Pi}_{i,k-1}(t,\varepsilon)+F_{2k}(t,\varepsilon), \tag{23}$$

де

$$C(t,\lambda(t))=f'_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))-\lambda(t)E,$$
$$F_i(t)=-f'_{1x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))-f'_{1y}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\exp(-\Delta(t)\lambda_i(t)),$$
$$F_{i1k}(t)=-\sum_{j=2}^{k-1}f'_{jx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,k-1-j}(t)-[\sum_{j=2}^{k-1}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,k-1-j}(t)+$$

$$+\sum_{j=1}^{k-2}\sum_{l=1}^{k-2-j} f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\bar{u}_{i,k-2-j,l}(t)]\exp(-\Delta(t)\lambda_i(t))-\sum_{m=1}^{k-1}[\sum_{j=1}^{m-1} f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,m-1-j}+$$

$$+\sum_{j=1}^{m-2}\sum_{l=1}^{m-2-j} f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\bar{u}_{i,m-2-j,l}(t)]\exp(-\Delta(t)\lambda_i(t))\bar{\lambda}_{i,k-m}(t),$$

$$F_{22}(t,\varepsilon)=-g_{22}(t,\varepsilon)-\sum_{i=1}^{n}\bar{f}_{0x}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-\varepsilon\Delta(t))u_{i0}(t)\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i0},$$

$$F_{2k}(t,\varepsilon)=-g_{2k}(t,\varepsilon)-\sum_{i=1}^{n}[\sum_{j=1}^{k-2}u_{ij}(t)\xi_{i,k-1-j}(t,\varepsilon)+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{l=0}^{k-2-s}\bar{f}_{sx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-\varepsilon\Delta(t)))u_{ij}(t)\times$$

$$\times\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^t\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i,k-2-s-j}+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{j=0}^{k-2-s}\sum_{l=0}^{k-2-s-j}\bar{f}_{sx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t-\varepsilon\Delta(t)))\bar{u}_{ijl}(t)\times$$

$$\times\exp(\varepsilon^{-1}\int_0^{t-\varepsilon\Delta(t)}\lambda_i(\tau)d\tau)c_{i,k-2-s-j-l}+\sum_{s=0}^{k}[\sum_{j=0}^{s-1}\left(f'_{jx}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))u_{i,s-1-j}(t)-u_{i,s-1-j}(t)\lambda_i(t)\right)+$$

$$+u'_{i,s-2}(t)]\overline{\Pi}_{i,k-s}(t,\varepsilon)+\sum_{s=0}^{k-2}\sum_{j=1}^{k-s-2}\sum_{l=0}^{k-s-j-2}f'_{jy}(t,\bar{x}(t),\bar{x}(t))\bar{u}_{isl}(t)\overline{\Pi}_{i,k-s-2-j-l}(t-\varepsilon\Delta(t),\varepsilon]=0$$

Розглянемо метод розв'язування рівнянь (19)-(21). В зв'язку з умовою 3 покладемо в (19):

$$u_{i0}(t)=\alpha_{i0}(t)\varphi_i(t), i=\overline{1,n}, \tag{24}$$

де $\varphi_i(t)$ власні вектора матриці $C(t,\lambda_i),\alpha_{i0}(t)$ - довільні функції. Умова існування рівняння (20) прийме вигляд

$$(\varphi_i(t),\psi_i(t))\alpha'_{i0}(t)+(\varphi'_i(t)+F_i(t)\varphi_i(t),\psi_i(t))\alpha_{i0}(t)=0, \tag{25}$$

де $\psi_i(t)$ власні вектора матриці $C^*(t,\lambda_i)$, спряженої до матриці $C(t,\lambda_i)$. При виконані умови в [1], виберемо вектора $\varphi_i(t),\psi_i(t)$ так, щоб виконувалася рівність $(\varphi_i(t),\psi_i(t))=1,\forall t\in[0;L]$, що дає можливість однозначного знаходження $\alpha_{i0}(t),u_{i0}(t)$ відповідно з рівнянь (25), (24). Припустимо, що $u_{is}(t)$ знайдені при $s<k-2$, і що

$$u_{is}(t)=\alpha_{i,k-2}(t)\varphi_i(t)+C^+(t,\lambda_i)(u'_{i,k-3}(t)+F_i(t)u_{i,k-3}(t)+F_{i1,k-1}(t)),\ i=\overline{1,n},k=3,4.... \tag{26}$$

Враховуючи (26) і умову існування розв'язку рівняння (21), функції $\alpha_{i,k-2}(t)$ знаходимо з рівняння

$$(\varphi_i(t),\psi_i(t))\alpha'_{i,k-2}(t)+((\varphi'_i(t)+F_i(t)\varphi_i,\psi_i(t))\alpha_{i,k-2}(t)+$$

$$+(\frac{d}{dt}(C^+(t,\lambda_i)(u'_{i,k-3}(t)+F_i(t)u_{i,k-3}(t)+F_{i1,k-1}(t))+F_{i1,k}(t),\psi_i(t))=0,$$

де $C^+(t,\lambda)$ – узагальнено обернена матриця до матриці $C(t,\lambda), i=\overline{1,n}, k=3,4...$.

Рівняння (22), (23) перепишемо у вигляді

$$\sum_{i=1}^{n}u_{i0}(t)\xi_{i,k-1}(t,\varepsilon)=-\sum_{i=1}^{n}C(t,\lambda_i)u_{i0}(t)\overline{\Pi}_{i,k-1}(t,\varepsilon)+F_{2k}(t,\varepsilon),k=2,3... \tag{27}$$

Враховуючи рівняння (19), з рівняння (27) знайдемо

$$\xi_{k-1}(t,\varepsilon)=-U_0^{-1}(t)F_{2k}(t,\varepsilon)),\ k=2,3...,$$

де $\xi_{k-1}(t,\varepsilon)-n$ вимірний вектор з координатами $\xi_{i,k-1}(t,\varepsilon),\ U_0(t)-n\times n$ матриця, стовпцями, якої є вектора $u_{i0}(t)\ \ (i=\overline{1,n})$. Теорема доведена.

РЕЗЮМЕ

Построено асимптотическое решение нелинейной сингулярно возмущённой системы дифференциальных уравнений из запаздыванием.

Ключевые слова: задача Коши, сингулярно возмущённая система дифференциальных уравнений, асимптотическое решение, переменное запаздывание.

SUMMARY

We construct asymptotic solution of a nonlinear of singularly perturbed system of differential equations with a delay.

Key words: the problem of Cauchy, singularly perturbed system of differential equations, asymptotic solution, variable delay.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Фещенко С. Ф., Шкиль Н. И., Пидченко Ю. П., Сотниченко Н. А. Асимптотические методы в теории линейных дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. – Киев: Наук. думка, 1981. – 196с.
2. Завизион Г. В. Линейная система интегро-дифференциальных уравнений с запаздыванием // Известие вузов.- 2003. – Т. 494, № 7. – С. 64-69.
3. Бігун Я. Й. Усереднення коливних систем із запізненням та інтегральними крайовими умовами // Укр. мат. журн. – 2004. – Т. 56, № 2. – С. 257-263.
4. Perestyuk M.O., Cherevko I.M. Decomposition of linear singularly perturbed functional differential equations // Nonlinear Oscillations. – 2011. – Т. 4, № 3. – P.345-353.
5. Васильева А. Б., Бутузов В. Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. – М.: Наука, 1973. – 272с.

Надійшло до редакції 18.04.2011 р.

МЕХАНІКА

УДК 539.3

НАПРЯЖЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ОРТОТРОПНОГО ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕДА С ПОКРЫТЫМИ ДИАФРАГМОЙ ТОРЦАМИ

Е. В. Алтухов, А. В. Винник

Рассмотрена трехмерная задача об упругом равновесии ортотропного параллелепипеда с покрытыми диафрагмой плоскими гранями. Методом однородных решений трехмерная задача приведена к двумерной. Получено аналитическое решение исходной задачи в случае изменяющейся по высоте параллелепипеда нагрузки, и проведено численные исследования напряженного состояния.

Ключевые слова: ортотропный параллелепипед, диафрагма, однородные решения, напряженное состояние.

Введение. Развитие теории анизотропных пластин и методов решения конкретных задач нашло отражение в обзорных статьях [1 – 9] и монографиях [10 – 17]. В работах [3 – 6, 8] отмечается актуальность разработки аналитических методов исследования напряженного состояния анизотропных тел на основе уравнений трехмерной теории упругости. Одним из эффективных аналитических подходов приведения трехмерных задач к двумерным является метод однородных решений [18 – 24].

На основе результатов [20] в данной статье получено точное решение задачи о напряженном состоянии в ортотропном параллелепипеде.

Постановка задачи и построение однородных решений. Рассматривается прямоугольный ортотропный параллелепипед, занимающий в декартовой системе координат $Ox_1x_2x_3$ область

$$V = \{|x_1| \le a,\ |x_2| \le b,\ |x_3| \le h\}$$

На плоских гранях параллелепипеда $(x_3 = \pm h)$ и на боковых поверхностях $(x_1 = \pm a,\ x_2 = \pm b)$ имеют место граничные условия

$$\sigma_{33}(x_1, x_2, \pm h) = 0,\quad u_i(x_1, x_2, \pm h) = 0 \quad i = 1, 2; \tag{1}$$

$$\sigma_{22}(x_1, \pm b, x_3) = 0,\quad u_j(x_1, \pm b, x_3) = 0 \quad j = 1, 3; \tag{2}$$

$$\sigma_{11}(\pm a, x_2, x_3) = \sigma_{12}(\pm a, x_2, x_3) = 0,\quad \sigma_{13}(\pm a, x_2, x_3) = Q \cdot f(x_2, x_3), \tag{3}$$

где Q – произвольная постоянная.

Для решения задачи о напряженном состоянии рассматриваемого параллелепипеда необходимо проинтегрировать уравнения равновесия в перемещениях, которые в данном случае имеют вид [13, 14, 20]:

$$\begin{gathered}\left(L_{11} + A_{55}\partial_3^2\right)u_1 + L_{12}u_2 + L_{13}\partial_3 u_3 = 0,\ \ L_{21}u_1 + \left(L_{22} + A_{44}\partial_3^2\right)u_2 + L_{23}\partial_3 u_3 = 0,\\ L_{31}\partial_3 u_1 + L_{32}\partial_3 u_2 + \left(L_{33} + A_{33}\partial_3^2\right)u_3 = 0.\end{gathered} \tag{4}$$

Здесь

$$L_{11} = A_{11}\partial_1^2 + A_{66}\partial_2^2,\ \ L_{12} = L_{21} = (A_{12} + A_{66})\partial_1\partial_2,\ \ L_{13} = L_{31} = (A_{13} + A_{55})\partial_1,$$

$$L_{22} = A_{66}\partial_1^2 + A_{22}\partial_2^2,\ \ L_{23} = L_{32} = (A_{23} + A_{44})\partial_2,\ \ L_{33} = A_{55}\partial_1^2 + A_{44}\partial_2^2,\ \ \partial_i = \partial/\partial x_i;$$

A_{ij} – модули упругости.

Задача сводится к поиску решений системы уравнений равновесия (4), удовлетворяющих граничным условиям (1) – (3).

В случае кососимметричного деформирования относительно срединной плоскости пластины $(x_3 = 0)$ компоненты вектора перемещения представляются в виде [18, 20]

$$u_i = \sum_{k=0}^{\infty} u_{ik}(x_1, x_2)\sin(\delta_k x_3),\ \ u_3 = \sum_{k=0}^{\infty} u_{3k}(x_1, x_2)\cos(\delta_k x_3),\ \ (i = 1, 2),\ \ \delta_k = \frac{k\pi}{h}. \tag{5}$$

При этом граничные условия (1) будут удовлетворены, а из уравнений равновесия (4) следуют системы дифференциальных уравнений для определения неизвестных функций u_{ik} $\left(i = \overline{1,3}\right)$:

$$L_{33}u_{30}=0 \text{ при } k=0, \tag{6}$$

$$\sum_{n=1}^{3} D_{in}^{(k)} u_{nk}=0 \quad \left(i=\overline{1,3}\right) \text{ при } k\geq 1, \tag{7}$$

где

$$D_{11}^{(k)}=L_{11}-\delta_k^2 A_{55};\ D_{12}^{(k)}=L_{12};\ D_{13}^{(k)}=-\delta_k L_{13};\ D_{21}^{(k)}=L_{12};\ D_{22}^{(k)}=L_{22}-\delta_k^2 A_{44};$$
$$D_{23}^{(k)}=-\delta_k L_{23};\ D_{31}^{(k)}=\delta_k L_{13};\ D_{32}^{(k)}=\delta_k L_{23};\ D_{33}^{(k)}=L_{33}-\delta_k^2 A_{33}.$$

Случай $k=0$ соответствует постоянной по толщине нагрузки. Тогда в представлениях (5) будут присутствовать только слагаемые с индексом ноль, а уравнения равновесия (4) примут вид (6). В случае нагрузки, изменяющейся по толщине, в разложениях (5) будут учитываться все слагаемые, а из системы (4) получатся представления (6), (7). Уравнение (6) получается из системы уравнений (7) заменой k на ноль. Поэтому дальнейшие исследования проводятся с учетом системы (7).

Для построения решений системы уравнений (7) в случае кососимметричного деформирования относительно плоскости пластины $x_2=0$ функции $u_{ik}(x_1,x_2)$ $(i=\overline{1,3})$ из выражений (5) представляются в виде

$$u_{jk}(x_1,x_2)=\sum_{r=0}^{\infty} u_{jkr}(x_1)\sin(\xi_r x_2),\ u_{2k}(x_1,x_2)=\sum_{r=0}^{\infty} u_{2kr}(x_1)\cos(\xi_r x_2),\ (j=1,3),\ \xi_r=\frac{r\pi}{b}. \tag{8}$$

При этом граничные условия (2) будут удовлетворены, а из (7) следует

$$\begin{gathered}
\mathrm{A}_{11}u_{1kr}''-\left(A_{66}\xi_r^2+A_{55}\delta_k^2\right)u_{1kr}-(A_{12}+A_{66})\xi_r u_{2kr}'-(A_{13}+A_{55})\delta_k u_{3kr}'=0,\\
(A_{66}+A_{12})\xi_r u_{1kr}'+A_{66}u_{2kr}''-\left(A_{22}\xi_r^2+A_{44}\delta_k^2\right)u_{2kr}-(A_{23}+A_{44})\xi_r\delta_k u_{3kr}=0,\\
(A_{13}+A_{55})\delta_k u_{1kr}'-(A_{23}+A_{44})\xi_r\delta_k u_{2kr}+A_{55}u_{3kr}''-\left(A_{44}\xi_r^2+A_{33}\delta_k^2\right)u_{3kr}=0.
\end{gathered} \tag{9}$$

Тогда остальные характеристики напряженно-деформированного состояния примут вид

$$\begin{gathered}
\sigma_{ii(k)}=(A_{i1}u_{1kr}'-A_{i2}\xi_r u_{2kr}-A_{i3}\delta_k u_{3kr})\sin(\xi_r x_2)\sin(\delta_k x_3),\\
\sigma_{23(k)}=A_{44}(\delta_k u_{2kr}+\xi_r u_{3kr})\cos(\xi_r x_2)\cos(\delta_k x_3),\\
\sigma_{13(k)}=A_{55}(\delta_k u_{1kr}+u_{3kr}')\sin(\xi_r x_2)\cos(\delta_k x_3),\\
\sigma_{12(k)}=A_{66}(\xi_r u_{1kr}+u_{2kr}')\cos(\xi_r x_2)\sin(\delta_k x_3),\ \left(i=\overline{1,3}\right).
\end{gathered} \tag{10}$$

Для построения решений системы уравнений (9), удовлетворяющих граничному условию (3), функции $u_{1kr}(x_1)$, $u_{2kr}(x_1)$, $u_{3kr}(x_1)$ из (8) представляются в виде

$$u_{1kr}(x_1)=H_{kr}e^{\lambda_{kr}x_1},\quad u_{2kr}(x_1)=Q_{kr}e^{\lambda_{kr}x_1},\quad u_{3kr}(x_1)=S_{kr}e^{\lambda_{kr}x_1}, \tag{11}$$

где λ_{kr}, H_{kr}, Q_{kr}, S_{kr} – неизвестные величины, подлежащие определению. При $k=0$ неизвестными остаются только величины λ_{0r}, S_{0r}, а $H_{0r}=Q_{0r}=0$.

Из уравнений (9) с учетом (11) следует

$$\begin{gathered}
H_{kr}\left(\mathrm{A}_{11}\lambda_{kr}^2-A_{66}\xi_r^2-A_{55}\delta_k^2\right)-Q_{kr}(A_{12}+A_{66})\lambda_{kr}\xi_r-S_{kr}(A_{13}+A_{55})\lambda_{kr}\delta_k=0,\\
H_{kr}(A_{66}+A_{12})\lambda_{kr}\xi_r+Q_{kr}\left(A_{66}\lambda_{kr}^2-A_{22}\xi_r^2-A_{44}\delta_k^2\right)-S_{kr}(A_{23}+A_{44})\xi_r\delta_k=0,\\
H_{kr}(A_{55}+A_{13})\lambda_{kr}\delta_k-Q_{kr}(A_{44}+A_{23})\xi_r\delta_k+S_{kr}\left(A_{55}\lambda_{kr}^2-A_{44}\xi_r^2-A_{33}\delta_k^2\right)=0.
\end{gathered} \tag{12}$$

Из условия равенства нулю определителя системы (12) получим характеристическое уравнение

$$\lambda_{kr}^6+\left(d_1\xi_r^2+d_2\delta_k^2\right)\lambda_{kr}^4+\left(d_3\xi_r^4+d_4\xi_r^2\delta_k^2+d_5\delta_k^4\right)\lambda_{kr}^2+\left(d_6\xi_r^6+d_7\xi_r^4\delta_k^2+d_8\xi_r^2\delta_k^4+d_9\delta_k^6\right)=0. \tag{13}$$

Здесь

$$d_1=-\Delta_1[A_{11}\Delta_6-A_{12}A_{55}\Delta_2],\ d_2=-\Delta_1[A_{11}\Delta_7-A_{13}A_{66}\Delta_3],\ d_3=\Delta_1[A_{22}\Delta_5-A_{12}A_{44}\Delta_2],$$
$$d_4=\Delta_1\big[2(\Delta_2-A_{66})(\Delta_3-A_{55})(\Delta_4-A_{44})-A_{12}A_{33}\Delta_2-A_{13}A_{22}\Delta_3-A_{11}A_{23}\Delta_4+$$

$$+\left(A_{11}A_{22}A_{33}+2A_{44}A_{55}A_{66}\right)\right],\ d_5=\Delta_1\left[A_{33}\Delta_5-A_{13}A_{44}\Delta_3\right],\ d_6=-\Delta_1\left(A_{22}A_{44}A_{66}\right)^{-1},$$

$$d_7=-\Delta_1\left[A_{22}\Delta_7-A_{23}A_{66}\Delta_4\right],\ d_8=-\Delta_1\left[A_{33}\Delta_6-A_{23}A_{55}\Delta_4\right],\ d_9=-\Delta_1A_{33}A_{44}A_{55},$$

$$\Delta_1=\left(A_{11}A_{55}A_{66}\right)^{-1},\ \Delta_2=\left(A_{12}+2A_{66}\right),\ \Delta_3=\left(A_{13}+2A_{55}\right),\ \Delta_4=\left(A_{23}+2A_{44}\right),$$

$$\Delta_5=\left(A_{11}A_{44}+A_{55}A_{66}\right),\ \Delta_6=\left(A_{22}A_{55}+A_{44}A_{66}\right),\ \Delta_7=\left(A_{33}A_{66}+A_{44}A_{55}\right).$$

Исследование характеристического уравнения (13) проведено в работе [22]. Там же приведены возможные значения корней уравнения (13) и соответствующие им представления компонент вектора перемещения.

Подставляя выражения $\sigma_{11(k)}$, $\sigma_{12(k)}$ $\sigma_{13(k)}$ из (10) в граничные условия (3) и представляя $f(x_2,x_3)$ в виде двойного ряда Фурье через системы ортогональных функций $\{\cos(\varphi_q x_2)$, $\sin(\varphi_q x_2)$, $\varphi_q=\pi(2p-1)/(2b)$, $q=1,2,...\}$ и $\{\cos(\psi_p x_3)$, $\sin(\psi_p x_3)$, $\psi_p=\pi(2p-1)/(2h)$, $p=1,2,...\}$, приходим к системе линейных алгебраических уравнений относительно S_{jpq} $\left(j=\overline{1,3}\right)$ $\left(\{p,q\}=1,2,...\right)$

$$A_{11}u_{1kr,1}+A_{12}\xi_r u_{2kr}+A_{13}\delta_k u_{3k}=0,\ -\xi_r u_{1kr}+u_{2kr,1}=0,$$

$$-\delta_k u_{1kr}+u_{3kr,1}=Q\theta_{pq},\ \theta_{pq}=\frac{1}{bh}\int_{-b}^{b}\int_{-h}^{h}f\left(x_2,x_3\right)\sin\left(\varphi_q x_2\right)\cos\left(\psi_p x_3\right)dx_2dx_3\ . \tag{14}$$

В системе уравнений (14) значения $x_1=a$. Неизвестные S_{jpq} явным образом находятся из системы (14). В результате получено точное аналитическое решение задачи (1)–(3).

Если корни характеристического уравнения (13) действительные, то характеристики напряженно-деформированного состояния с учетом выражений (5), (8) и представлений для функций $u_{1kr}(x_1)$, $u_{2kr}(x_1)$, $u_{3kr}(x_1)$ из [22] примут вид

$$u_1=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{3}\left(H_{jkr}^{+}\operatorname{sh}\left(\alpha_j x_1\right)+H_{jkr}^{-}\operatorname{ch}\left(\alpha_j x_1\right)\right)\sin\left(\xi_r x_2\right)\sin\left(\delta_k x_3\right),$$

$$u_2=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{3}\left(Q_{jkr}^{+}\operatorname{ch}\left(\alpha_j x_1\right)+Q_{jkr}^{-}\operatorname{sh}\left(\alpha_j x_1\right)\right)\cos\left(\xi_r x_2\right)\sin\left(\delta_k x_3\right),$$

$$u_3=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{3}\left(S_{jkr}^{+}\operatorname{ch}\left(\alpha_j x_1\right)+S_{jkr}^{-}\operatorname{sh}\left(\alpha_j x_1\right)\right)\sin\left(\xi_r x_2\right)\cos\left(\delta_k x_3\right);$$

$$\sigma_{ii}^{\pm}=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{3}\left(A_{i1}\alpha_j H_{jkr}^{\pm}-A_{i2}\xi_r Q_{jkr}^{\pm}-A_{i3}\delta_k S_{jkr}^{\pm}\right)\begin{Bmatrix}\operatorname{ch}\left(\alpha_j x_1\right)\\ \operatorname{sh}\left(\alpha_j x_1\right)\end{Bmatrix}\sin\left(\xi_r x_2\right)\sin\left(\delta_k x_3\right),\ \left(i=\overline{1,3}\right),$$

$$\sigma_{23}^{\pm}=A_{44}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{3}\left(\delta_k Q_{jkr}^{\pm}+\xi_r S_{jkr}^{\pm}\right)\begin{Bmatrix}\operatorname{ch}\left(\alpha_j x_1\right)\\ \operatorname{sh}\left(\alpha_j x_1\right)\end{Bmatrix}\cos\left(\xi_r x_2\right)\cos\left(\delta_k x_3\right),$$

$$\sigma_{13}^{\pm}=A_{55}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{3}\left(\delta_k H_{jkr}^{\pm}+\alpha_j S_{jkr}^{\pm}\right)\begin{Bmatrix}\operatorname{sh}\left(\alpha_j x_1\right)\\ \operatorname{ch}\left(\alpha_j x_1\right)\end{Bmatrix}\sin\left(\xi_r x_2\right)\cos\left(\delta_k x_3\right),$$

$$\sigma_{12}^{\pm}=A_{66}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{3}\left(\xi_r H_{jkr}^{\pm}+\alpha_j Q_{jkr}^{\pm}\right)\begin{Bmatrix}\operatorname{sh}\left(\alpha_j x_1\right)\\ \operatorname{ch}\left(\alpha_j x_1\right)\end{Bmatrix}\cos\left(\xi_r x_2\right)\sin\left(\delta_k x_3\right). \tag{15}$$

Зависимости между неизвестными величинами $H_{mkr}^{\pm}$, $Q_{mkr}^{\pm}$, $S_{mkr}^{\pm}$ $\left(m=\overline{1,3}\right)$ в этом случае имеют вид

$$Q_{mkr}^{\pm}=P_{1kr}^{\pm}P_{3kr}^{\pm}S_{mkr}^{\pm},\ H_{mkr}^{\pm}=P_{2kr}^{\pm}P_{3kr}^{\pm}S_{mkr}^{\pm},\ P_{1kr}^{\pm}=a_{12}a_{33}+a_{13}a_{23},\ P_{2kr}^{\pm}=a_{22}a_{33}-a_{23}^{2},$$

$$P_{3kr}^{\pm}=1/\left(a_{13}a_{22}+a_{12}a_{23}\right),\ a_{12}=\left(A_{12}+A_{66}\right)\lambda_{kr}\xi_r,\ a_{13}=\left(A_{13}+A_{55}\right)\lambda_{kr}\delta_k,$$

$$a_{23} = \left(A_{23} + A_{44}\right)\xi_r\delta_k, \ a_{22} = \left(A_{66}\lambda_{kr}^2 - A_{22}\xi_r^2 - A_{44}\delta_k^2\right), \ a_{33} = \left(A_{55}\lambda_{kr}^2 - A_{44}\xi_r^2 - A_{33}\delta_k^2\right).$$

Тогда из системы (14) следует

$$\sum_{j=1}^{3} S_{jpt}^{\pm} B_{jpt}^{\pm} = \frac{Q}{A_{55}}\theta_{pt}, \ \sum_{j=1}^{3} S_{jpt}^{\pm} C_{jpt}^{\pm} = 0, \ \sum_{j=1}^{3} S_{jpt}^{\pm} D_{jpt}^{\pm} = 0, \tag{16}$$

где

$$B_{jpt}^{\pm} = \left(\delta_p P_{2pt}^{\pm} P_{3pt}^{\pm} + \alpha_j\right)\begin{Bmatrix}\mathrm{sh}(\alpha_j a)\\ \mathrm{ch}(\alpha_j a)\end{Bmatrix}, \ C_{jpt}^{\pm} = \left(\xi_t P_{2pt}^{\pm} + \alpha_j P_{1pt}^{\pm}\right) P_{3pt}^{\pm}\begin{Bmatrix}\mathrm{sh}(\alpha_j a)\\ \mathrm{ch}(\alpha_j a)\end{Bmatrix},$$

$$D_{jpt}^{\pm} = \left(A_{11}\alpha_j P_{2pt}^{\pm} P_{3pt}^{\pm} - A_{12}\xi_t P_{1pt}^{\pm} P_{3pt}^{\pm} - A_{13}\delta_p\right)\begin{Bmatrix}\mathrm{ch}(\alpha_j a)\\ \mathrm{sh}(\alpha_j a)\end{Bmatrix}.$$

Решение системы (16) имеет вид

$$S_{jpt}^{+} = \Delta_j / \Delta, \tag{17}$$

где Δ − определитель системы (16), а Δ_j получается из Δ заменой j-ого столбца на столбец свободных членов.

Результаты численных исследований. Численные исследования напряженного состояния проведены для параллелепипеда, изготовленного из материалов [25] M_1 (арагонит) с характеристиками $E_1/E = 14{,}370$, $E_2/E = 7{,}555$, $E_3/E = 8{,}199$, $G_{12}/E = 2{,}135$, $G_{23}/E = 2{,}060$, $G_{31}/E = 1{,}280$, $\nu_{12} = 0{,}231$, $\nu_{23} = 0{,}195$, $\nu_{31} = -0{,}035$ и M_2 (сегнетовая соль) – $E_1/E = 1{,}908$, $E_2/E = 2{,}824$, $E_3/E = 3{,}009$, $G_{12}/E = 0{,}498$, $G_{23}/E = 0{,}625$, $G_{31}/E = 0{,}152$, $\nu_{12} = 0{,}458$, $\nu_{23} = 0{,}302$, $\nu_{31} = 0{,}629$. Значения модулей упругости и модулей сдвига отнесены к величине $E = 10^4$ *МПа*.

Предположим, что на сторонах параллелепипеда заданы касательные нагрузки

$$\sigma_{13}\left(\pm a, x_2, x_3\right) = \sin\left(\pi x_2 / b\right)\cos\left(\pi n x_3 / h\right), \ n \in \mathbb{Z}. \tag{18}$$

Тогда характеристики напряженно-деформированного состояния будут иметь вид (15), где величины $H_{mkr}^{\pm}$, $Q_{mkr}^{\pm}$, $S_{mkr}^{\pm}$ определяются по формулам (16), (17) со значениями параметров $p = n$, $t = 1$.

На рис. 1, 2 изображены графики изменения напряжений σ_{11}, σ_{22}, σ_{12} и σ_{33}, σ_{13}, σ_{23} в области пересечения плоскостей $x_2 = 0{,}167$ и $x_3 = 0{,}167$ параллелепипеда, изготовленного из материалов M_1 (кривые 1) и M_2 (кривые 2), с размерами оснований $a = b = 0{,}5$. При этом учитывалось, что в граничных нагрузках (18) $n = 1$. Параметр h всюду полагался равным 0,5. Как видно из рисунков, анизотропия мате-

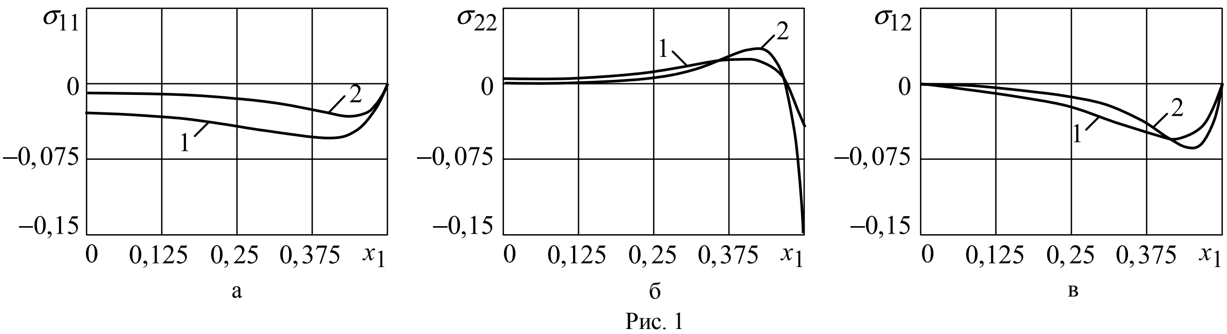


Рис. 1

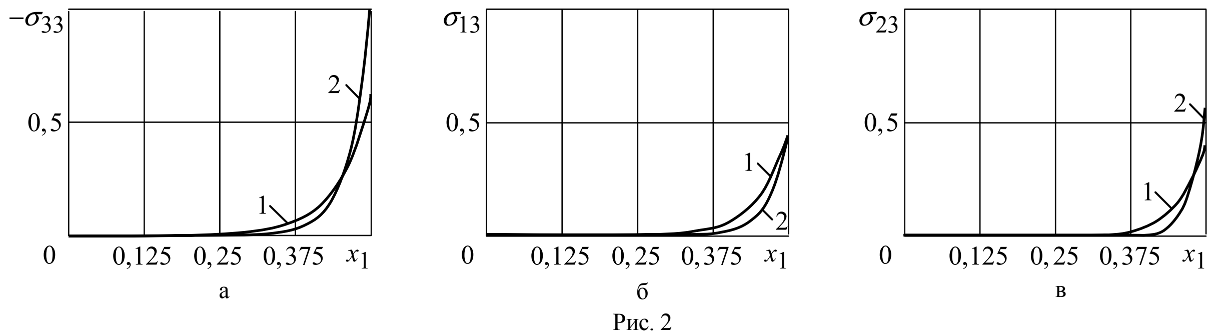
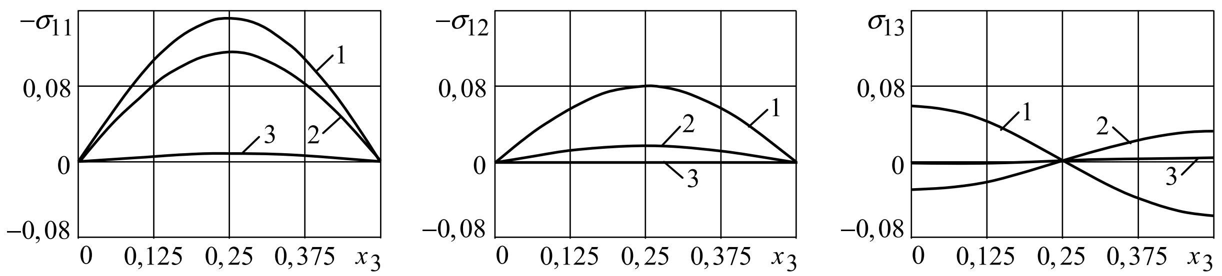


Рис. 2

риала оказывает заметное влияние на значения нормальных напряжений σ_{11}, σ_{22}, σ_{33}. Например, напряжение σ_{22} для материала M_2 вблизи границы $x_1 = 0,5$ в 3,4 раза больше, чем для материала M_1.

На рис. 3 приведены графики распределения напряжений σ_{11}, σ_{12} и σ_{13} в области пересечения плоскостей параллелепипеда $x_1 = 3a/4$ и $x_2 = b/4$ (кривые 1 – $a = b = 0,5$, кривые 2 – $a = b = 2$, кри-

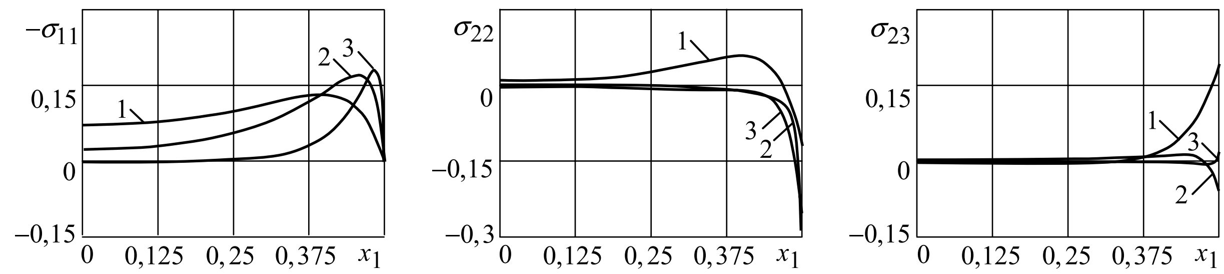


а б в

Рис. 3

вые 3 – $a = b = 8$). Расчеты проводились для значения параметра $n = 1$. Здесь и далее пластина изготовлены из материала M_1. Как следует из этих результатов, с увеличением параметров a и b напряжения убывают и стремятся к нулю. При этом напряжение σ_{13} может менять свой знак на противоположный. Изменения параметров a и b наибольшее влияние оказывают на распределение напряжения σ_{12}. Так с увеличением значений a и b в четыре раза происходит уменьшение максимального значения напряжения σ_{12} почти в 5 раз.

На рис. 4 демонстрируется влияние параметра n (кривые 1 – $n = 1$, кривые 2 – $n = 3$, кривые 3 – $n = 9$) в граничных условиях (18) на распределение напряжений σ_{11}, σ_{22} и σ_{23} в области пересечения плоскостей $x_2 = 0,167$ и $x_3 = 0,125$ параллелепипеда с размерами оснований $a = b = 0,5$.



а б в

Рис. 4

Данные рис. 4 свидетельствуют о том, что изменение нагрузки (параметра n) оказывает заметное влияние на распределение напряжения σ_{11} вблизи границы ($0,375 < x_1 < 0,5$), а для напряжений σ_{22}, σ_{23} – на границе. В указанных областях напряжения достигают максимального по модулю значения.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто тривимірну задачу про пружну рівновагу орторопного прямокутного паралелепіпеда з плоскими гранями, що вкриті діафрагмою. Методом однорідних розв’язків тримірна задача зведена до двомірної. Отримано аналітичний розв’язок початкової задачі у випадку дії по висоті паралелепіпеда зусиль, що змінюються, і проведено чисельні дослідження напруженого стану.

Ключові слова: ортотропний паралелепіпед, діафрагма, однорідні розв’язки, напружений стан.

SUMMARY

A three-dimensional problem of the elastic equilibrium of orthotropic rectangular parallelepiped with plane edges, which covered a diaphragm, is considered. By the method of homogeneous solutions a three-dimensional problem is reduced to a two-dimensional one. The analytical solution of the original problem is obtained in case variable efforts are set on the height of parallelepiped and numerical researches of the stress state are carried out.

Keywords: orthotropic parallelepiped, diaphragm, homogeneous solutions, stress state.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Агаловян Л.А. Асимптотика решений классических и неклассических краевых задач статики и динамики тонких тел / Л.А. Агаловян // Прикладная механика. – 2002. – Т. 38, № 7. – С. 3-24.
2. Аннин Б.Д. Анизотропия упругих свойств материалов / Б.Д.Аннин, Н.И. Остросаблин // Прикладная математика и техническая физика. – 2008. – Т. 49, № 6. – С. 131-151.
3. Космодамианский А.С. Концентрация внутренней энергии в многосвязных телах / А.С. Космодамианский // Прикладная механика. – 2002. – Т. 38, № 4. – С. 21-48.
4. Космодамианский А.С. Пространственные задачи теории упругости для многосвязных пластин: Обзор / А.С. Космодамианский // Прикладная механика. – 1983. – Т. 19, № 12. – С. 3-21.
5. Немиш Ю.Н. Развитие аналитических методов в трехмерных задачах статики анизотропных тел (обзор) / Ю.Н. Немиш // Прикладная механика. – 2000. – Т. 36, № 2. – С. 3-38.
6. Немиш Ю.Н. Напряженно-деформированное состояние нетонких оболочек и пластин. Трехмерная теория (обзор) / Ю.Н. Немиш, И.Ю. Хома // Прикладная механика. – 1991. – Т. 27, № 11. – С. 3-25.
7. Фридман М.М. Математическая теория упругости анизотропных сред / М.М. Фридман // Прикладная математика и механика. – 1950. – Т. 14, № 3. – С. 321-340.
8. Шалдырван В.А. Некоторые результаты и проблемы трехмерной теории пластин (обзор) / В.А. Шалдырван // Прикладная механика. – 2007. – Т. 43, № 2. – С. 45-69.
9. Nowacki W. Beitrag zur Theorie der ortotropen platen / W. Nowacki // Acta Technica Academiae Scientiarum Hungaricae. – 1954. –Vol. 8, No 1-2. – S. 103-108.
10. Агаловян Л.А. Асимптотическая теория анизотропных пластин и оболочек / Л.А. Агаловян. – М.: Наука, 1997. – 414 с.
11. Амбарцумян С.А. Теория анизотропных пластин: Прочность, устойчивость и колебания / С.А. Амбарцумян. – М.: Наука, 1987. – 360 с.
12. Курпа Л.В. Метод R-функций для решения линейных задач изгиба и колебаний пологих оболочек / Л.В. Курпа. – Харьков, 2009. – 408 с.
13. Лехницкий С.Г. Анизотропные пластинки / С.Г. Лехницкий. – М.: ГИТТЛ, 1957. – 464 с.
14. Лехницкий С.Г. Теория упругости анизотропного тела / С.Г. Лехницкий. – М.: Наука, 1977. – 416 с.
15. Рвачев В.Л. R-функции в задач теории пластин / В.Л. Рвачев, Л.В. Курпа. – К.: Наук. думка, 1987. – 176 с.
16. Савин Г.Н. Распределение напряжений около отверстий / Г.Н. Савин. – К.: Наук. думка, 1968. – 887 с.
17. Саркисян В.С. Некоторые задачи теории упругости анизотропного тела / В.С. Саркисян. – Ереван: ЕГУ, 1970. – 444 с.
18. Алтухов Е.В. Напряженное состояние анизотропных пластин с торцами, покрытыми диафрагмой / Е.В. Алтухов, А.В. Винник // Труды ин-та прикладной математики и механики НАН Украины. – 2010. – Т. 20. – С. 3-13.
19. Алтухов Е.В. Напряженное состояние ортотропной прямоугольной пластины / Е.В. Алтухов, А.В. Винник // Вісн. Донец. нац. ун-ту. Сер. А: Природн. науки. – 2010. – № 2. – С. 29-37.
20. Алтухов Е.В. Однородные решения трехмерных задач равновесия ортотропных пластин с граничными условиями на торцах типа диафрагмы / Е.В. Алтухов, Н.М. Некородев, Р.Н. Нескородев // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2008. – Вип. 6. – С. 139-145.
21. Алтухов Е.В. Смешанная краевая задача для ортотропной прямоугольной пластины / Е.В. Алтухов, А.В. Винник // Теоретическая и прикладная механика. – 2011. – № 2. – С. 121-128.
22. Винник А.В. Аналитическое решение трехмерной задачи о равновесии ортотропного параллелепипеда / А.В. Винник // Вісн. Донец. нац. ун-ту. Сер. А: Природн. науки. – 2011. – № 2. – С. 51-57.
23. Шевченко В.П. Однородные решения задачи о равновесии анизотропных пластин с одной плоскостью упругой симметрии / В.П. Шевченко, Е.В. Алтухов, Р.Н. Нескородев // Доповіді НАН України – 2008. – № 2. – С. 73-79.
24. Altukhov E.V. Solving three-dimensional static problems for orthotropic plates with sliding edge conditions / E.V. Altukhov, R.N. Neskorodev // International Applied Mechanics. – 2008. – Vol. 44, No 8. – P. 927-937.
25. Хантингтон Г. Упругие постоянные кристаллов / Г. Хантингтон // Успехи физических наук. – 1961. – Вып. 3. – С. 461-520.

Поступила в редакцию 19.01.2012 г.

УДК 539.3

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОБОБЩЕННОЙ ТЕОРИИ В ЗАДАЧАХ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ИЗОТРОПНЫХ ПЛАСТИН С ТЕПЛОИЗОЛИРОВАННЫМ РАЗРЕЗОМ

Н. С. Бондаренко, А. С. Гольцев

Задача теплопроводности для изотропных пластин с теплоизолированным разрезом решена с использованием обобщённой теории, основанной на разложении температуры в ряд Фурье по полиномам Лежандра. Учитывается конвективный теплообмен с внешней средой по закону Ньютона. Проведены расчёты возмущённого температурного поля в окрестности разреза. Исследовано влияние теплообмена на величину погрешности расчёта температуры, найденной из уравнений, полученных операторным методом в предположении линейного распределения температуры по толщине. Сделаны обобщающие выводы.

Ключевые слова: изотропная пластина, теплоизолированный разрез, обобщённая теория, полиномы Лежандра, преобразование Фурье.

Введение. В данной статье найдено решение задачи теплопроводности для изотропной пластины, содержащей теплоизолированный разрез. При этом использована обобщённая теория, в рамках которой сведение трёхмерного уравнения теплопроводности к системе двумерных уравнений осуществляется за счёт разложения температуры в ряд Фурье по полиномам Лежандра [1, 2]. Такой подход позволяет рассматривать не только тонкие пластины, но и пластины средней и большой толщины. Из работ, в которых искомые функции представляются в виде рядов Фурье по полиномам Лежандра, можно отметить следующие статьи [3-5] и монографии [6, 7]. Задачи теплопроводности и термоупругости для тел с трещинами являются весьма актуальными. В плоском случае эти задачи достаточно хорошо изучены [8].

Целью данной работы является развитие обобщённой теории применительно к задачам теплопроводности для пластин с разрезами. Необходимо также оценить уточнение, обусловленное использованием приближения порядка N уравнения теплопроводности вместо уравнений, полученных операторным методом и предполагающих линейное распределение температуры по толщине [9].

Постановка задачи. Рассмотрим изотропную пластину толщины $2h$ в прямоугольной декартовой системе координат x, y, z. На лицевых поверхностях пластины происходит конвективный теплообмен по закону Ньютона с внешней средой постоянной температуры $\theta^{\pm}$ $(z = \pm h)$. Пластина имеет теплоизолированный разрез L.

В рамках приближения порядка N температура T^* представляется в виде ряда Фурье по полиномам Лежандра P_k [1]:

$$T^* = \sum_{k=0}^{N} T_k^* P_k\left(\frac{z}{h}\right), \qquad T_k^* = \frac{2k+1}{2h}\int_{-h}^{h} T^* P_k\left(\frac{z}{h}\right) dz, \tag{1}$$

где коэффициенты разложения T_k^* удовлетворяют следующим дифференциальным уравнениям [10]:

$$\Delta T_k^* + \sum_{m=0}^{N} A_{km}\frac{T_m^*}{h^2} = -\frac{\theta_k}{h^2} \qquad \left(k = \overline{0,N}\right), \qquad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \tag{2}$$

Структура матрицы $A_N = \|A_{km}\|$ и правых частей θ_k описана в работе [10].

Из вида уравнений (2) следует, что учёт температуры окружающей среды добавляет только постоянные составляющие в компоненты температуры T_k^*. Эти постоянные необходимо учитывать лишь при практических расчётах. Поэтому принимаем $\theta^+ = \theta^- = 0$.

В случае теплоизолированного разреза теплота не проходит через линию разреза. Поэтому граничные условия на линии разреза L имеют вид [8]:

$$\left(\frac{\partial T_k^*}{\partial n}\right)^{\pm} = 0 \qquad \left(k = \overline{0,N}\right). \tag{3}$$

Знаками «+», «–» обозначены граничные значения функций в соответствии с выбранным направлением нормали $\vec{n}$.

Температурное поле в пластине с разрезом представим в виде суммы двух компонент

$$T_k^* = T_k^o + T_k \qquad \left(k = \overline{0,N}\right), \tag{4}$$

где T_k^o – компоненты температуры в сплошной пластине (основное температурное поле, которое считается известным); T_k – компоненты возмущённого температурного поля, вызванного наличием разреза.

Перейдём в безразмерную систему координат x_1, x_2, x_3, определённую с точностью до полутолщины пластины h, тогда для определения возмущённого температурного поля имеем систему, которая следует из (2):

$$\Delta T_k + \sum_{m=0}^{N} A_{km} T_m = 0 \qquad \left(k = \overline{0,N}\right). \tag{5}$$

Из краевых условий на линии разреза L (3) и представлений (4) следуют граничные условия для компонент возмущённого температурного поля

$$\left(\frac{\partial T_k}{\partial n}\right)^{\pm} = -\left(\frac{\partial T_k^o}{\partial n}\right)^{\pm} \qquad \left(k = \overline{0,N}\right). \tag{6}$$

Таким образом, приближение порядка N уравнения теплопроводности (5) с граничными условиями (6) и требованием убывания возмущённого температурного поля составляют граничную задачу теплопроводности для пластины с теплоизолированным разрезом.

Построение решения задачи. Применяя двумерное интегральное преобразование Фурье к системе (5) с учётом разрывного характера искомых функций [11], получим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) порядка $N+1$ для трансформант компонент возмущённого температурного поля $\widetilde{T}_k$

$$-p^2 \widetilde{T}_k + \sum_{m=0}^{N} A_{km} \widetilde{T}_m = D(T_k) \qquad \left(k = \overline{0,N}\right), \tag{7}$$

где

$$p^2 = \xi_1^2 + \xi_2^2, \qquad D(T_k) = \frac{i}{2\pi} \int_L \left(\vec{\xi}, \vec{n}\right) [T_k] e^{i\left(\vec{\xi}, \vec{x}'\right)} dL,$$

$\vec{n} = (n_1, n_2)$, n_1, n_2 – направляющие косинусы нормали $\vec{n}$ к линии L; $[T_k] = T_k^+ - T_k^-$ – скачок компоненты возмущённого температурного поля T_k при переходе через линию L; $\vec{\xi} = (\xi_1, \xi_2)$ – координаты текущей точки в пространстве трансформант; $\vec{x}' = (x_1', x_2')$ – координаты точки на линии L.

Решение СЛАУ (7) находим по правилу Крамера:

$$\widetilde{T}_k\left(\vec{\xi}\right) = \frac{\Delta_k\left(\vec{\xi}\right)}{\Delta\left(p^2\right)} \qquad \left(k = \overline{0,N}\right), \tag{8}$$

где $\Delta(\mu) = \det(A_N - \mu E)$ – характеристический многочлен матрицы A_N; $\Delta_k\left(\vec{\xi}\right)$ – определитель, получающийся заменой k-го столбца матрицы $A_N - p^2 E$ столбцом свободных членов системы (7):

$$\Delta_k\left(\vec{\xi}\right) = \sum_{m=0}^{N} \mathrm{M}_{mk}\left(p^2\right) D(T_m) \qquad \left(k = \overline{0,N}\right), \tag{9}$$

где $\mathrm{M}_{mk}(\mu)$ – алгебраическое дополнение элемента m-ой строки и k-го столбца матрицы $A_N - \mu E$. Заметим, что $\mathrm{M}_{mk}(\mu)$ представляет собой многочлен степени N относительно μ при $m = k$ и многочлен степени $N-1$ при $m \neq k$.

В работе [10] было доказано, что все характеристические корни матрицы A_N действительные и отрицательные и кратность собственных значений матрицы A_N не превышает 2. В дальнейшем будем предполагать, что матрица A_N имеет лишь простые характеристические корни.

Трансформанты компонент возмущённого температурного поля (8) с учётом (9) примут вид

$$\widetilde{T}_k = \frac{1}{2\pi} \int_L \sum_{m=0}^{N} \widetilde{B}_{km} [T_m] \, e^{i\left(\vec{\xi}, \vec{x}'\right)} dL \qquad \left(k = \overline{0,N}\right), \tag{10}$$

где

$$\tilde{B}_{km} = i\widetilde{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right)\left(\vec{\xi},\vec{n}\right)\pm, \quad \widetilde{\mathrm{M}}_{mk} = \mathrm{M}_{mk}\left(p^2\right)\Big/\Delta\left(p^2\right) \quad \left(k,m=\overline{0,N}\right). \tag{11}$$

С учётом свойств собственных значений матрицы A_N СЛАУ (7) может быть представлен в виде

$$\Delta\left(p^2\right) = (-1)^{N+1}\prod_{j=0}^{N}\left(p^2+\rho_j^2\right),$$

где ρ_j^2 – характеристические корни матрицы A_N, взятые со знаком «–».

Применяя формулу обращения для двумерного преобразования Фурье к трансформантам ядер (11), получим:

$$B_{km}\left(\overline{x}_1,\overline{x}_2\right) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\tilde{B}_{km}\left(\xi_1,\xi_2\right)e^{-i\left(\xi_1\overline{x}_1+\xi_2\overline{x}_2\right)}d\xi_1 d\xi_2 \qquad \left(k,m=\overline{0,N}\right), \tag{12}$$

где обозначено $\overline{x}_1 = x_1 - x_1'$, $\overline{x}_2 = x_2 - x_2'$.

С учётом соотношений (11) ядра (12) примут вид:

$$B_{km} = \frac{i}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\widetilde{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right)\left(\vec{\xi},\vec{n}\right)e^{-i\left(\xi_1\overline{x}_1+\xi_2\overline{x}_2\right)}d\xi_1 d\xi_2 \qquad \left(k,m=\overline{0,N}\right). \tag{13}$$

Выделяя в подынтегральной функции (13) чётные и нечётные части, найдём

$$B_{km} = \frac{2}{\pi}n_1\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{\infty}\widetilde{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right)\xi_1\sin\xi_1\overline{x}_1\cos\xi_2\overline{x}_2 d\xi_1 d\xi_2 +$$

$$+\frac{2}{\pi}n_2\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{\infty}\widetilde{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right)\xi_2\cos\xi_1\overline{x}_1\sin\xi_2\overline{x}_2 d\xi_1 d\xi_2 = \frac{2}{\pi}\left(n_1\Psi_1+n_2\Psi_2\right). \tag{14}$$

Вычислим интеграл Ψ_1, для чего перейдём в полярную систему координат по формулам

$$\overline{x}_1 = r\cos\varphi, \qquad \overline{x}_2 = r\sin\varphi, \qquad \xi_1 = \rho\cos\theta, \qquad \xi_2 = \rho\sin\theta,$$

тогда Ψ_1 примет вид:

$$\Psi_1 = \int\limits_0^{\pi/2}d\theta\int\limits_0^{\infty}\overline{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right)\cos\theta\sin\left(r\rho\cos\varphi\cos\theta\right)\cos\left(r\rho\sin\varphi\sin\theta\right)d\rho, \quad \overline{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right) = \frac{\mathrm{M}_{mk}\left(\rho^2\right)\rho^2}{\Delta\left(\rho^2\right)}$$

Применяя разложение Якоби-Ангера [12], получим

$$\Psi_1 = \frac{\pi}{2}\cos\varphi\int\limits_0^{\infty}\overline{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right)J_1\left(r\rho\right)d\rho,$$

где $J_1(z)$ — функция Бесселя первого рода.

Аналогично находим Ψ_2:

$$\Psi_2 = \frac{\pi}{2}\sin\varphi\int\limits_0^{\infty}\overline{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right)J_1\left(r\rho\right)d\rho.$$

Подставляя Ψ_1 и Ψ_2 в формулу (14), найдём

$$B_{km} = n_0\int\limits_0^{\infty}\overline{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right)J_1\left(r\rho\right)d\rho \qquad \left(k,m=\overline{0,N}\right), \qquad n_0 = n_1\cos\varphi + n_2\sin\varphi. \tag{15}$$

Раскладывая дробь, входящую в подынтегральное выражение (15), на сумму простейших дробей, получим

$$\overline{\mathrm{M}}_{mk}\left(\rho^2\right) = -\delta_{km} + \sum_{j=0}^{N}\frac{C_{kmj}}{\rho^2+\rho_j^2} \qquad \left(k,m=\overline{0,N}\right), \tag{16}$$

где δ_{km} — символ Кронекера;

$$C_{kmj} = \left\{ \mu \mathrm{M}_{mk}(\mu) \left(\frac{d\Delta(\mu)}{d\mu} \right)^{-1} \right\} \Bigg|_{\mu = -\rho_j^2} \qquad \left(k, m, j = \overline{0, N}\right).$$

Таким образом, соотношения (15) с учётом разложений (16) примут вид

$$B_{km} = -\delta_{km} n_0 \int_0^\infty J_1(r\rho) d\rho + n_0 \sum_{j=0}^N C_{kmj} \int_0^\infty \frac{J_1(r\rho)}{\rho^2 + \rho_j^2} d\rho \qquad \left(k, m = \overline{0, N}\right). \tag{17}$$

Интегралы во втором слагаемом (17) выражаются через специальную G-функцию [12]:

$$\int_0^\infty \frac{J_1(r\rho)}{\rho^2 + \rho_j^2} d\rho = -\frac{r}{2} G_{1,0}(\rho_j r) \qquad \left(j = \overline{0, N}\right).$$

Окончательное выражение для ядер B_{km} записывается следующим образом:

$$B_{km}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = -n_0 \left(\frac{\delta_{km}}{r} + \frac{r}{2} \sum_{j=0}^N C_{kmj} G_{1,0}(\rho_j r) \right) \qquad \left(k, m = \overline{0, N}\right), \qquad r = \sqrt{\bar{x}_1^2 + \bar{x}_2^2}\ . \tag{18}$$

Тогда компоненты возмущённого температурного поля находятся по формулам, которые следуют из (10)

$$T_k(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \int_L \sum_{m=0}^N B_{km}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) [T_m] dL \qquad \left(k = \overline{0, N}\right), \tag{19}$$

В качестве примера рассмотрим прямолинейный теплоизолированный разрез длины $2l$ в безразмерной системе координат x_i $\left(i = \overline{1, 3}\right)$, расположенный на оси Ox_1 симметрично относительно начала координат. В интегральных представлениях для компонент возмущённой температуры (19) сделаем замену переменных $x_1' = ls$, $x_1 = lx$, тогда

$$T_k(lx, x_2) = \frac{l}{2\pi} \int_{-1}^1 \sum_{m=0}^N B_{km}(l(x - s), x_2) [T_m] ds \qquad \left(k = \overline{0, N}\right), \tag{20}$$

и согласно формулам (18)

$$B_{km}(l(x - s), x_2) = -\frac{x_2}{r^2} \delta_{km} - \frac{1}{2} x_2 \sum_{j=0}^N C_{kmj} G_{1,0}(\rho_j r), \qquad r = \sqrt{l^2 (x - s)^2 + x_2^2}\ .$$

Найдём частные производные по x_2 от компонент температуры (20):

$$\frac{\partial T_k(lx, x_2)}{\partial x_2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 \sum_{m=0}^N K_{km}(x - s, x_2) [T_m] ds \qquad \left(k = \overline{0, N}\right). \tag{21}$$

С учётом выражения производной от специальной G-функции [12], ядра интегральных представлений (21) равны

$$K_{km}(x - s, x_2) = l \frac{x_2^2 - l^2 (x - s)^2}{r^4} \delta_{km} - \frac{l}{2} \sum_{j=0}^N C_{kmj} G_{1,0}(\rho_j r) + \frac{l x_2^2}{r^2} \sum_{j=0}^N C_{kmj} G_{1,1}(\rho_j r).$$

Подставляя интегральные представления (21) в граничные условия (6), получим систему интегральных уравнений для определения скачков компонент температуры $[T_m]$:

$$\frac{1}{2\pi} \sum_{m=0}^N \int_{-1}^1 L_{km}(x - s) [T_m] ds = F_k(x) \qquad \left(k = \overline{0, N}\right), \tag{22}$$

где

$$L_{km}(x - s) = -\frac{\delta_{km}}{(x - s)^2} - \frac{l^2}{2} \sum_{j=0}^N C_{kmj} G_{1,0}(\rho_j l |x - s|), \quad F_k(x) = -l \frac{\partial T_k^o(lx, x_2)}{\partial x_2} \Bigg|_{x_2 = 0} \qquad \left(k, m = \overline{0, N}\right).$$

Применяя к интегралам, входящим в (22), формулу интегрирования по частям и учитывая свойство скачков компонент температуры

$$\left[T_m\right]\Big|_{\pm 1} = 0 \qquad \left(m = \overline{0, N}\right), \tag{23}$$

которое следует из непрерывности температуры на концах разреза, приходим к системе сингулярных интегральных уравнений (СИУ)

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-1}^{1}\frac{\Phi_k(s)}{s-x}ds + \frac{1}{2\pi}\int_{-1}^{1}\sum_{m=0}^{N} D_{km}(x-s)\Phi_m(s)ds = -F_k(x) \qquad \left(k = \overline{0, N}\right), \tag{24}$$

где

$$\Phi_m(s) = \frac{d}{ds}\left[T_m\right], \qquad D_{km}(x-s) = -\frac{l^2}{2}\sum_{j=0}^{N} C_{kmj}\int_0^s G_{1,0}\left(\rho_j l|x-t|\right)dt \qquad \left(k, m = \overline{0, N}\right).$$

Неизвестные функции $\Phi_m(s)$ на основании (23) должны удовлетворять следующим условиям:

$$\int_{-1}^{1}\Phi_m(s)ds = 0 \qquad \left(m = \overline{0, N}\right). \tag{25}$$

Система (24) представляет собой систему СИУ типа Коши первого рода, которую можно решить методом Мультоппа [13]. После решения системы (24), (25) возмущённое температурное поле в любой точке пластины может быть найдено с помощью интегральных представлений (20) и формулы разложения температуры в ряд Фурье по полиномам Лежандра (1).

Анализ результатов. В качестве примера рассчитано возмущённое температурное поле в пластине с теплоизолированным разрезом единичной длины $(l = 1)$. Рассмотрен случай верхнего одностороннего теплообмена ($Bi^{+} = Bi$, $Bi^{-} = 0$, где $Bi^{\pm}$ — критерий Био на лицевых поверхностях пластины $x_3 = \pm 1$). Основное температурное поле предполагалось таким, что через линию разреза проходит однородный тепловой поток

$$\frac{\partial T_0^o}{\partial x_2} = 1°C, \qquad \frac{\partial T_k^o}{\partial x_2} = 0 \qquad \left(k = \overline{1, N}\right).$$

На рис. 1, 2 показаны изотермы температуры в разных приближениях на верхней (рис. 1) и на нижней (рис. 2) лицевых поверхностях пластины при $Bi = 1$. Кривые 1, 2, 3, 4 на рис. 1, 2 соответствуют температурам 0,1; 0,15; 0,2; 0,25 $°C$. На этих же рисунках представлены скачки температуры на линии разреза при $x_3 = \pm 1$ (ось скачков температуры направлена вниз).

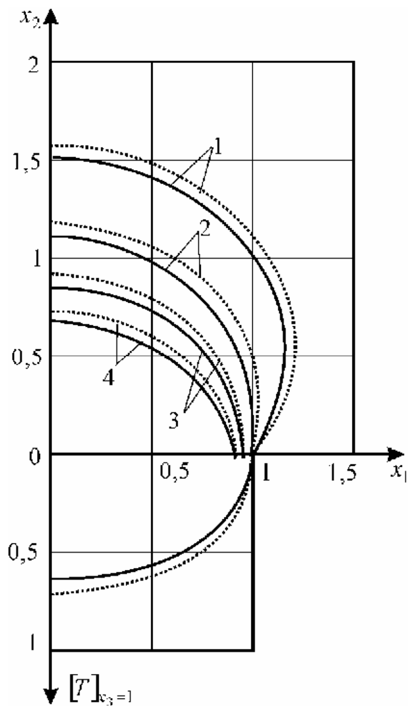


Рис. 1. Изотермы температуры при $x_3 = 1$

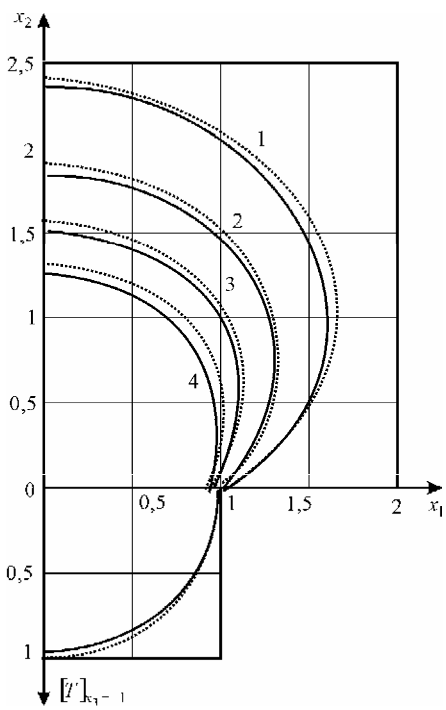


Рис. 2. Изотермы температуры при $x_3 = -1$

Пунктирными линиями на рис. 1, 2 показаны изотермы температуры, найденной с помощью уравнений теплопроводности, полученных с помощью операторного метода и предполагающих линейное распределение температуры по толщине [9]. Сплошные линии на рис. 1, 2 отвечают температурам в третьем и пятом приближении на базе обобщённой теории (кривые совпадают). Кривые изотерм симметричны относительно координатных осей, однако в нижней полуплоскости знак температуры меняется на противоположный. Картины изотерм наглядно демонстрируют локальность возмущённого температурного поля. Проведённые расчёты позволяют сделать вывод, что использование пятого приближения трёхмерного уравнения теплопроводности вместо третьего не вносит уточнения в расчёт возмущённого температурного поля, поэтому в разложении температуры по полиномам Лежандра достаточно ограничиться четырьмя членами.

По результатам расчёта температуры определена относительная погрешность δ для значений температуры, найденных по уравнениям, полученных с помощью операторного метода [9]. Рассмотрен также случай симметричного теплообмена $\left(Bi^+ = Bi^- = Bi\right)$. Для точек с максимальным значением относительной погрешности исследована зависимость этой погрешности от величины теплообмена в широком диапазоне изменения параметра Bi. Результаты этих исследований приведены в табл. 1, где δ^+ и δ^- — относительные погрешности для точек верхней и нижней лицевых поверхностей пластины при верхнем одностороннем теплообмене; δ_{simm} — относительная погрешность для точек лицевых поверхностей при симметричном теплообмене.

Таблица

Bi^+	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}	0,1	1	5
δ^+, %	$1{,}64\cdot10^{-3}$	$1{,}63\cdot10^{-2}$	$1{,}61\cdot10^{-1}$	1,48	9,59	17,66
δ^-, %	$1{,}69\cdot10^{-3}$	$1{,}68\cdot10^{-2}$	$1{,}64\cdot10^{-1}$	1,45	8,25	16,28
δ_{simm}, %	$3{,}32\cdot10^{-3}$	$3{,}3\cdot10^{-2}$	$3{,}2\cdot10^{-1}$	2,83	17,99	45,77

Для случая умеренного теплообмена $\left(0{,}01 \le Bi \le 1\right)$ построены графики зависимости рассматриваемых относительных погрешностей от параметра теплообмена Bi (рис. 3).

Выводы. Полученные результаты позволяют заключить, что относительная погрешность определения температуры по уравнениям, полученным с помощью операторного метода, с ростом параметра теплообмена Bi на порядок, также увеличивается на порядок и может достигнуть значительной величины при интенсивном теплообмене.

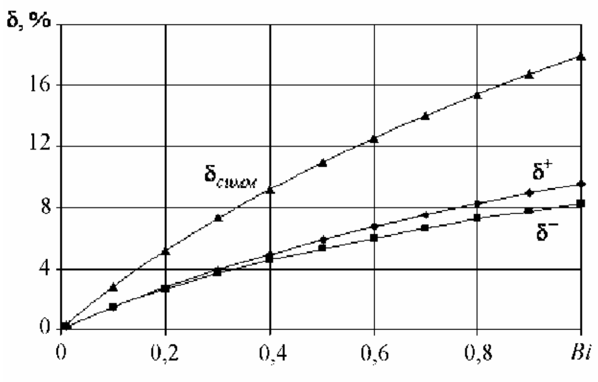


Рис. 3

При одностороннем теплообмене данная погрешность больше на той лицевой поверхности, через которую происходит теплообмен.

При симметричном теплообмене рассматриваемая погрешность на лицевых поверхностях пластины в два раза выше, чем при одностороннем теплообмене.

Таким образом, использование обобщённой теории в задачах теплопроводности для пластинчатых элементов конструкций с дефектами является оправданным, поскольку точность расчёта температуры в этом случае существенно возрастает.

РЕЗЮМЕ

Задача теплопровідності для ізотропних пластин із теплоізольованим розрізом розв’язана з використанням узагальненої теорії, що ґрунтується на розвиненні температури в ряд Фур’є за поліномами Лежандра. Враховується конвективний теплообмін із зовнішнім середовищем за законом Ньютона. Проведені розрахунки збуреного температурного поля в околі розрізу. Досліджено вплив теплообміну на величину похибки розрахунку температури, знайденої з рівнянь, одержаних операторним методом у припущенні лінійного розподілу температури за товщиною. Зроблені узагальнюючі висновки.

Ключові слова: ізотропна пластина, теплоізольований розріз, узагальнена теорія, поліноми Лежандра, перетворення Фур’є.

SUMMARY

Heat conduction problem for isotropic plates with heat-insulated cut is solved using the generalized theory based on the expansion of a temperature in a Fourier series by Legendre polynomials. The convective heat exchange with the environment by Newton's law is taken into account. The calculations of the perturbed temperature field in the vicinity of the cut are carried out. The influence of heat exchange on the value of the error of calculating the temperature which found from the equations obtained by the operator method assuming a linear temperature distribution across the thickness is investigated. The general conclusions are made.

Keywords: isotropic plate, heat-insulated cut, generalized theory, Legendre polynomials, Fourier transform.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пелех Б.Л. Контактные задачи теории упругих анизотропных оболочек / Б.Л. Пелех, М.А. Сухорольский. − К.: Наук. думка, 1980. − 216 с.
2. Немиш Ю.Н. Напряженно-деформированное состояние нетонких оболочек и пластин. Обобщенная теория (обзор) / Ю.Н. Немиш, И.Ю. Хома // Прикладная механика. – 1993. – Т. 29, № 11. – С. 3-34.
3. Волчков Ю.М. Решение контактных задач на основе уточненной теории пластин и оболочек / Ю.М. Волчков, Д.В. Важева // Прикладная механика и техническая физика. – 2008. – Т. 49, № 5. – С. 169-176.
4. Волчков Ю.М. Сведение трехмерной задачи теории упругости к двумерной на основе аппроксимации напряжений и смещений полиномами Лежандра / Ю.М. Волчков, Л.А. Дергилева // Прикладная механика и техническая физика. – 2007. – Т. 48, № 3. – С. 179-190.
5. Марчук М.В. Варіант геометрично нелінійної теорії пружних оболонок з урахуванням поперечних зсувів, стиснення та виконанням крайових умов на лицевих поверхнях / М.В. Марчук, Р.І. Тучапський // Прикл. проблеми механіки і математики. – 2009. – Вип. 7. – С. 157-166.
6. Никабадзе М.У. Варианты математических теорий многослойных конструкций с несколькими базовыми поверхностями / М.У. Никабадзе. – М.: МГУ, 2008. – 127 с.
7. Никабадзе М.У. Применение систем полиномов Лежандра и Чебышева при моделировании упругих тонких тел с одним малым размером / М.У. Никабадзе. – М.: МГУ, 2008. – 287 с.
8. Кит Г.С. Плоские задачи термоупругости для тел с трещинами / Г.С. Кит, М.Г. Кривцун. – К.: Наук. думка, 1983. – 280 с.
9. Подстригач Я.С. Неустановившиеся температурные поля и напряжения в тонких пластинках / Я.С. Подстригач, Ю.М. Коляно. – К.: Наук. думка, 1972. – 308 с.
10. Bondarenko N.S. Solution of the heat conduction problem for anisotropic plates under concentrated thermal loading using legendre polynomials / N.S. Bondarenko, A.S. Gol'tsev // Journal of Mathematical Sciences. – 2011. – Vol. 174, No. 3. – P. 400-414.
11. Шевченко В.П. Задачи термоупругости тонких оболочек с разрезами / В.П. Шевченко, А.С. Гольцев. – К.: УМК ВО, 1988. – 84 с.
12. Хижняк В.К. Смешанные задачи теории пластин и оболочек/ В.К. Хижняк, В.П. Шевченко. – Донецк: ДонГУ, 1980. – 128 с.
13. Каландия А.И. Математические методы двумерной упругости / А.И. Каландия. – М.: Наука, 1973. – 304 с.

Поступила в редакцию 07.10.2011 г.

УДК 539.3

КОНЦЕНТРАЦИЯ ТЕРМОНАПРЯЖЕНИЙ НА ЗАЩЕМЛЕННОЙ ПОВЕРХНОСТИ ЦИЛИНДРИЛИНДРИЧЕСКОГО ТЕЛА

Т. А. Васильев

Рассмотрена осесимметричная стационарная смешанная задача термоупругости для цилиндрического тела. Проведен асимптотический анализ бесконечной системы линейных алгебраических уравнений. Установлена главная часть асимптотического представления ее решения. Бесконечная система сведена к конечной. В рядах для напряжений выделена сингулярная часть. Проведен анализ напряженного состояния в цилиндрическом теле.

Ключевые слова: цилиндрическое тело, термоупругое деформирование, смешанная задача, сингулярность напряжения.

Введение. Деформирование неравномерно нагретого сплошного цилиндра рассматривалось с помощью методов суперпозиции [1] и однородных решений [2]. В работах [3, 4] исследовалось термонапряженное состояние цилиндра, на боковых поверхностях которого задавалось распределение температур, а на торцах – однородные условия. В статье [5] рассматривалась осесимметричная задача термоупругого деформирования короткого цилиндра. В указанных работах боковая поверхность цилиндра была свободна от напряжений. Однако тело может являться составной частью конструкции, и его расширение ограничивается соседними элементами. Тогда следует рассматривать задачу термоупругого деформирования тела, контактирующего с остальной частью конструкции. Такая проблема моделируется смешанной граничной задачей [6]. Решение смешанной задачи термоупругости требует проведения асимптотического анализа решения бесконечных систем линейных алгебраических уравнений.

Данная работа посвящена исследованию концентрации напряжений, возникающей вблизи жестко защемленной поверхности короткого цилиндра при его осесимметричном тепловом расширении, приводящем к изгибу. Качество решения достигается за счет применения методов асимптотического анализа.

Постановка и решение задачи. Рассмотрим изотропный цилиндр радиуса $\tilde{R}$ и высоты $2\tilde{H}$. Начало цилиндрической системы координат поместим в центре цилиндра, а ось $O\tilde{z}$ направим по оси цилиндра. Введем в рассмотрение безразмерные характеристики (тильда стоит над размерными величинами) $r=\tilde{r}/\tilde{R}$, $z=\tilde{z}/\tilde{H}=\tilde{z}/h\tilde{R}$, $h=\tilde{H}/\tilde{R}$, $u=\tilde{u}/\tilde{R}$, $w=\tilde{w}/\tilde{R}$, $\sigma_{ij}=\tilde{\sigma}_{ij}/2\tilde{G}$, $\theta=\alpha_T\tilde{\theta}/T_0$ [4]. В теле задано распределение температуры

$$\theta(r,z)=\sum_k B_k I_0(\delta_k^* r)\sin(\delta_k z)/I_0(\delta_k^*), \quad B_k=2\int_0^1 \tau_0(z)\sin(\delta_k z)\,dz, \quad \delta_k=\pi k, \quad k\in\mathbb{Z},$$

определяемое из решения краевой задачи теплопроводности

$$\nabla^2\theta=0, \quad \theta(r,\pm 1)=0, \quad \theta(1,z)=\tau_0(z).$$

Для определения термонапряженного состояния в цилиндре под действием неравномерного распределения температуры $\theta(r,z)$ необходимо решить граничную задачу

$$\begin{gathered} u_{r,zz}/h^2+(\mu+1)\left(u_{r,r}+u_r/r\right)_{,r}+\mu u_{z,rz}/h=2k(1+\nu)\theta_{,r}, \ \mu=1/(1-2\nu), \\ (\mu+1)u_{z,zz}/h^2+\mu\left(u_{r,r}+u_r/r\right)_{,z}/h+u_{z,rr}+u_{r,r}/r=2\mu(1+\nu)\alpha_T\theta_{,z}/h; \end{gathered} \tag{1}$$

$$\sigma_{rz}(r,\pm 1)=\sigma_{zz}(r,\pm 1)=0, \ u_r(1,z)=u_z(1,z)=0. \tag{2}$$

Для решения задачи (1), (2) используем предложенный в работе [4] метод. С этой целью решение задачи представим в виде

$$u_i=u_i^*+u_i^0,$$

где u_i^* – частное решение уравнений равновесия, обусловленное температурным потенциалом Φ; u_i^0 – общее решение однородной системы (1). Величины u_i^* определяются соотношениями [7]

$$u_r^*=\Phi_{,r}, \quad u_z^*=-\Phi_{,z}/h.$$

Термоупругий потенциал $\Phi(r,z)$ имеет вид [4]

$$\Phi(r,z)=(1+\nu)\sum_k B_k I_0(\delta_k^* r)\sin(\delta_k z)/\delta_k^{*2} I_0(\delta_k^*).$$

В результате перемещения имеют вид:

$$\begin{aligned} u_r &= \Phi_{,r} + 2arz + 2\operatorname{Re}\sum_p A_p n_p(z) P_0^-(\gamma_p^* r) I_0(\gamma_p^* r)/I_0(\gamma_p^*), \\ u_z &= -\Phi_{,z}/h - ar^2/h + 4ahk_1\left(1-\nu z^2/2\right) - b/h + 2\operatorname{Re}\sum_p A_p q_p(z) I_0(\gamma_p^* r)/I_0(\gamma_p^*). \end{aligned} \qquad (3)$$

После подстановки соотношений (3) в граничные условия (2) и использования метода Бубнова-Галеркина [4] получим систему линейных уравнений относительно неизвестных A_p

$$\begin{aligned} a + \operatorname{Re}\sum_p n_{mp} P_0^+\left(\gamma_p^*\right) A_p &= -\sum_k (-1)^{k+1} B_k (1+\nu)\varepsilon_m^2 \delta_k h^2 P_0^-(\delta_k^*)/6\left(\delta_k^2-\varepsilon_m^2\right); \\ \omega_m a + 2\operatorname{Re}\sum_p q_{mp} A_p &= -\sum_k (-1)^{k+1} B_k (1+\nu)\varepsilon_m^2 \delta_k h/6\left(\delta_k^2-\varepsilon_m^2\right), \quad m=\overline{1,\infty}. \end{aligned} \qquad (4)$$

Здесь

$$\omega_m = 1/h - 4hk_1 + 2h\nu\left(1-2/\varepsilon_m^2\right), \quad q_{mp} = a_{mp}\varepsilon_m^2\left[(\mu+1)\varepsilon_m^2 - (3\mu+1)\gamma_p^2\right] = q(\varepsilon_m;\gamma_p),$$

$$n_{mp} = ha_{mp}\varepsilon_m^2\left[(\mu-1)\gamma_p^2 + (\mu+1)\varepsilon_m^2\right] = n(\varepsilon_m;\gamma_p), \quad a_{mp} = \cos^2\gamma_p \Big/ \left(\gamma_p^2-\varepsilon_m^2\right)^2,$$

$$\varepsilon_m = \pi(m+1/2), \quad P_0^-\left(\gamma_p^* r\right) = \gamma_p^* I_1(\gamma_p^* r)/I_0(\gamma_p^* r),$$

γ_p – корни уравнения $\sin 2\gamma = 2\gamma$, $\gamma_p^* = \gamma_p/h$, остальные обозначения введены в работе [4].

Решение системы (4) получено методом редукции, позволяющим с приемлемой точностью получить значения неизвестных. Вблизи граничных поверхностей значение напряжений определяется суммой всего ряда. В связи с этим возникает необходимость проведения асимптотического анализа системы (4). Для неизвестных системы (4) зададим асимптотическое представление [2]

$$A_p \approx Ah^{1/2}\lambda_p(\beta+1/2) I_0\left(\gamma_p^*\right), \quad \lambda_p(\beta) = \gamma_p^{\beta-1} e^{-\gamma_p^*} \Big/ \sin^2\gamma_p \qquad (5)$$

и придем к однородной системе уравнений относительно $A_1^* = \operatorname{Re} A$, $A_2^* = \operatorname{Im} A$

$$A_1^*(\mu\beta+1)\operatorname{tg}(\pi\beta/2) + A_2^*(\mu\beta+\mu+1) = 0, \qquad A_1^*(\mu\beta-\mu-1)\operatorname{ctg}(\pi\beta/2) - A_2^*(\mu\beta-1) = 0. \quad (6)$$

Из условия равенства нулю определителя системы (6) получаем известное [2] уравнение $(3-4\nu)\sin^2(\pi\beta/2) + \beta^2 - 4(1-\nu)^2 = 0$ для показателя β. В результате система (4) может быть сведена к конечной путем замены неизвестных соотношениями (5).

В табл. 1 приведены значения $\operatorname{Re} A_p$ и $\operatorname{Im} A_p$ для двух распределений температуры вдоль боковой поверхности. При этом значения параметров $h = 0,5$, $\nu = 0,25$.

Таблица 1

$\tau_0(z)$	z		$z(1-z^2)$	
p	$\operatorname{Re} A_p$	$\operatorname{Im} A_p$	$\operatorname{Re} A_p$	$\operatorname{Im} A_p$
1	–0,077012255	–0,04582502	–0,03989828	–0,02696534
2	0,567265987	2,16741204	0,47999331	1,63510132
3	0,181407154	1,83562219	–0,32337731	0,52859569
4	0,006559032	1,62260413	–0,36040971	0,20077994
5	–0,091909222	1,47502267	–0,33207044	0,06941120
6	–0,153942674	1,36621583	–0,29973510	0,00665443
7	–0,195962384	1,28231919	–0,27154627	–0,02638150
8	–0,225923538	1,21543264	–0,24801019	–0,04464590
9	–0,248128235	1,16073358	–0,22842219	–0,05487019
10	–0,265121191	1,11501718	–0,21200146	–0,06044283

Анализ данных таблицы показывает, что значения A_p с ростом номера стремятся к константе.

Для нахождения напряжений получаем соотношения

$$\sigma_{rr}=-\Phi_{,r}/r+S(r,z)+2(1+\nu)az/(1-\nu)+2\operatorname{Re}\sum_{p=1}^{P-1}\left(A_p-A\right)\gamma_p^{*1/2}\left[l_p(z)-P_0^-\left(\gamma_p^*r\right)n_p(z)/r\right]I_0\left(\gamma_p^*r\right)\lambda_p(\beta)+$$

$$+2\operatorname{Re}A\sum_{p=1}^{+\infty}\left\{\mu\cos\gamma_p\sin\gamma_p zI_0\left(\gamma_p^*r\right)-I_1\left(\gamma_p^*r\right)n_p(z)/r\right\}\gamma_p^{*3/2}\lambda_p(\beta), \qquad \sigma_{zz}=-S(r,z)+$$

$$+2\operatorname{Re}A\sum_{p=1}^{+\infty}\mu\gamma_p^{*3/2}\cos\gamma_p\sin\gamma_p zI_0\left(\gamma_p^*r\right)\lambda_p(\beta)+2\operatorname{Re}\sum_{p=1}^{P-1}\left(A_p-A\right)t_p(z)\gamma_p^{*1/2}I_0\left(\gamma_p^*r\right)\lambda_p(\beta),$$

$$\sigma_{rz}=S_1(r,z)+2\operatorname{Re}\sum_{p=1}^{P-1}\left(A_p-A\right)r_p(z)\gamma_p^{*3/2}I_1\left(\gamma_p^*r\right)\lambda_p(\beta), \quad \sigma_{\theta\theta}=-\Phi_{,rr}+S_2(r,z)+2(1+\nu)az/(1-\nu)+$$

$$+2\operatorname{Re}A\sum_{p=1}^{+\infty}n_p(z)I_1\left(\gamma_p^*r\right)\lambda_p(\beta+3/2)/rh\sqrt{h}+2\operatorname{Re}\sum_{p=1}^{P-1}\left(A_p-A\right)\left(s_p(z)+n_p(z)P_0^-\left(\gamma_p^*r\right)/r\right)I_0\left(\gamma_p^*r\right)\lambda_p(\beta+1/2)/\sqrt{h}$$

$$S(r,z)=-\operatorname{Re}\psi(\beta,r,z)-4\mu\int_1^{+\infty}\left\{\chi(x,z)\xi_0(\beta+1,x,r)+\operatorname{Re}\zeta(\beta+1,x,r,z)\right\}dx+(1-z)\mu\operatorname{Re}\phi(\beta+1,r,z)+$$

$$+\operatorname{Re}4\mu i^{\beta+1/2}\int_1^{+\infty}\left[\chi(ix,z)\eta_0(\beta+1,x,r)+(1-z)\kappa(\beta+1,x,r,z)\right]dx+\operatorname{Re}4\mu A/A_2^*\int_0^{\pi/2}e^{i\varphi}\chi\left(e^{i\varphi},z\right)\xi_0\left(\beta+1,e^{i\varphi},r\right)d\varphi+$$

$$+\operatorname{Re}\varpi(\beta,r,z)-2(1-z)\operatorname{Re}\mu i^{\beta}\omega(\beta+1,r,z),\ S_1(r,z)=\operatorname{Im}\psi(\beta,r,z)+(1-z)\mu\operatorname{Im}\phi(\beta+1,r,z)-\operatorname{Im}\varpi(\beta,r,z)-$$

$$-4\mu\int_1^{+\infty}\left[\chi_1(x,z)\xi_1(\beta+1,x,r)-\operatorname{Im}\zeta(\beta+1,x,r,z)\right]dx+\operatorname{Re}4\mu A/A_2^*\int_0^{\pi/2}e^{i\theta}\chi_1\left(e^{i\theta},z\right)\xi_1\left(\beta+1,e^{i\theta},r\right)d\theta+$$

$$+\operatorname{Re}4\mu i^{\beta+3/2}\int_1^{+\infty}\left[\chi_1(ix,z)\eta_1(\beta+1,x,r)-(1-z)\kappa(\beta+1,x,r,z)\right]dx+(1-z)\operatorname{Re}\mu i^{\beta+1/2}(1+i)\omega(\beta+1,r,z),$$

$$S_2(r,z)=\operatorname{Re}4(\mu-1)A/A_2^*\int_0^{\pi/2}e^{i\theta}\chi_2(e^{i\theta},z)\xi_0\left(\beta,e^{i\theta},r\right)d\theta-4(\mu-1)\int_1^{+\infty}\chi_2(x,z)\xi_0(\beta,x,r)dx-$$

$$-(\mu-1)\operatorname{Im}\phi(\beta,r,z)-\operatorname{Re}4(\mu-1)i^{\beta+3/2}\int_1^{+\infty}\left[\chi_2(ix,z)\eta_0(\beta,x,r)-i\kappa(\beta,x,r,z)\right]dx+$$

$$+\operatorname{Re}(\mu-1)i^{\beta+1/2}(1-i)\omega(\beta,r,z), \quad \varsigma=(1-z)+i(1-r)/h,$$

$$\xi_{0,1}(\beta+1,x,r)=A_2^*x^{\beta+3/2}I_{0,1}(xr/h)e^{-x/h}/\pi h^{3/2}(\sin 2x-2x),\ \chi_2(x,z)=\cos x\sin xz,$$

$$\zeta(\beta+1,x,r,z)=A_2^*x^{\beta}(1+z)e^{ix\varsigma}/4\pi h\sqrt{2\pi r},\ \chi(x,z)=\sin x\sin xz+z\cos x\cos xz$$

$$\eta_{0,1}(\beta+1,x,r)=Ax^{\beta+3/2}J_{0,1}(xr/h)e^{-ix/h}/\pi h^{3/2}(\sinh 2x-2x),\ \chi_1(x,z)=\sin x\cos xz-z\chi_2(x,z),$$

$$\phi(\beta)=-Ai^{\beta+1/2}(i+1)\int_0^1 x^{\beta}e^{-\varsigma x}dx/\pi^{3/2}hr^{1/2},\ \psi(\beta)=\mu(1+z)A_2^*\int_0^1 x^{\beta}e^{ix\varsigma}dx/\pi h\sqrt{2\pi r},$$

$$\omega(\beta,r,z)=A\Gamma(\beta+1)\varsigma^{-(\beta+1)}/\pi h\sqrt{\pi r},\ \varpi(\beta,r,z)=\mu(1+z)A_2^*\Gamma(\beta+1)\bar{\varsigma}^{-(\beta+1)}/\pi h\sqrt{2\pi r}.$$

Анализ численных результатов. Проведем анализ термонапряженного состояния в случае, когда температура распределена по боковой поверхности по закону $\tau_0(z)=z(1-z^2)$. На рис. 1 представлено распределение напряжений σ_{rr}, на рис. 2 – $\sigma_{\theta\theta}$ на боковой поверхности.

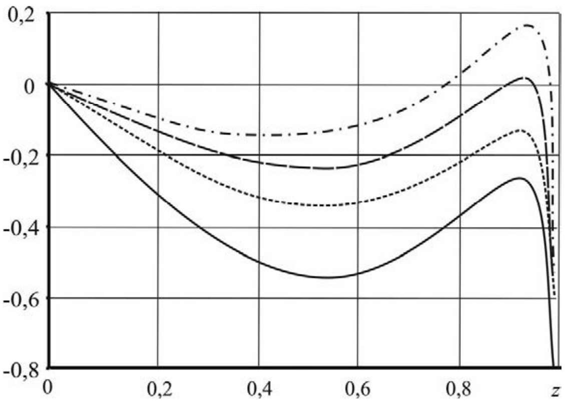


Рис. 1

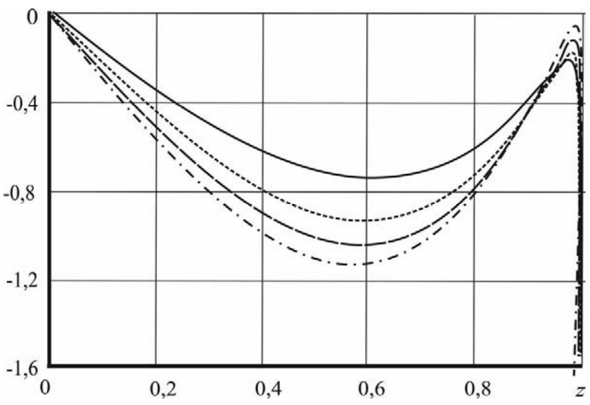


Рис. 2

Сплошная кривая на рисунках соответствует короткому цилиндру ($h = 2$, $\nu = 0,25$), точечная – кубообразному цилиндру ($h = 1$, $\nu = 0,25$), пунктирная – толстой плите ($h = 0,5$, $\nu = 0,25$) и штрихпунктирная – тонкой плите ($h = 0,1$, $\nu = 0,25$). На рис. 3 представлено распределение напряжения σ_{rr} внутри толстой плиты ($h = 0,5$, $\nu = 0,25$), когда температура распределена по боковой поверхности по закону $\tau_0(z) = z$.

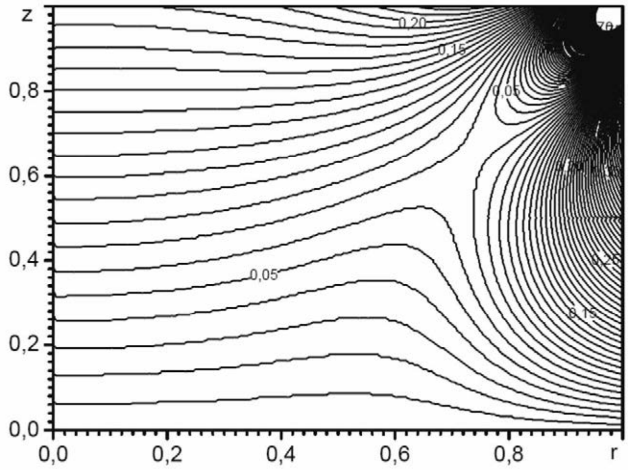


Рис. 3

Данные рисунков свидетельствуют о том, что сжимающие напряжения имеют минимум. При этом с ростом относительной высоты h напряжение σ_{rr} в целом по боковой поверхности убывает. В тонкой плите возникает зона положительных напряжений σ_{rr}, которая вблизи угловой линии сменяется сжимающими напряжениями. Напряжение $\sigma_{\theta\theta}$ возрастет с ростом относительной высоты h, но вблизи угловой линии наблюдается обратный эффект. Вблизи линии излома наблюдается область концентрации отрицательных напряжений σ_{rr}. На боковой поверхности напряжения σ_{rr} остаются отрицательными. В то время как на торцах напряжения положительны. Внутри цилиндра напряжения плавно меняются от отрицательных значений на боковой поверхности к положительным на торце.

Выводы. В данной работе было установлено, что с ростом относительной высоты h напряжение σ_{rr} в целом по боковой поверхности убывает так, что в тонкой плите возникает зона растягивающих напряжений, которая вблизи угловой линии сменяется сжимающими напряжениями. В то же время напряжение $\sigma_{\theta\theta}$ возрастет с ростом относительной высоты h, но в малой области вблизи угловой линии наблюдается обратный эффект.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто осесиметричну стаціонарну змішану задачу термопружності для циліндриного тіла. Проведено асимптотичний аналіз нескінченних систем лінійних алгебраїчних рівнянь і встановлено головну частину асимтотичного представлення його розв'язку. Нескінчена система лінійних алгебраїчних рівнянь зведена до скінченої, а в рядах для напружень виокремлена синуглярна частина. Проведено аналіз напруженного стану, що виникає в циліндричному тілі.

Ключові слова: циліндричне тіло, термопружне деформування, змішана задача, сингулярність напруження.

SUMMARY

Axissymmetric mixed stationary thermoelastic problem for cylindrical body was considered. Asymptotic analysis of infinite system of linear algebraic equations was provided. The main term in the asymptotic expression for solution of system of linear algebraic equations was obtained. Infinite system was reduced to a finite one and singular part of stresses was determined. The analysis of stress state in cylindrical body was investigated.

Keywords: cylindrical body, thermoelastic deformation, mixed boundary value problem, stress singularity.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Прокопов В.К. Применение однородных решений к осесимметричной задаче термоупругости для цилиндров конечной длины / В.К. Прокопов, М.Е. Бабешко, В.К. Стрюк // Прикладная механика. – 1977. – Т. 13, № 12. – С. 3-8.
2. Гринченко В.Т. Задачи термоупругости для областей, ограниченных перпендикулярными граничными поверхностями / В.Т. Гринченко, А.Ф. Улитко // Тепловые напряжения в элементах конструкций. – 1969. – № 8. – С. 110-125.
3. Алтухов Е.В. Осесимметричные задачи термоупругости для сред, обладающих поперечной анизотропией / Е.В. Алтухов, А.С. Космодамианский, В.А. Шалдырван // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1978. – № 4. – С. 316-319.
4. Космодамианский А.С. Толстые многосвязные пластины / А.С. Космодамианский, В.А. Шалдырван. – К.: Наук. думка, 1980. – 240 с.
5. Мелешко В.В. Осесиметричні температурні напруження у пружному ізотропному циліндрі скінченої довжини / В.В. Мелешко, Ю.В. Токовий, Дж.Р. Барбер // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2010. – Т. 53, № 1. – С. 120-137.
6. Шалдырван В.А. Аналитические методы в смешанных задачах теории упругости / В.А. Шалдырван, Т.А. Васильев // Актуальные аспекты физико-механических исследований. Механика. – К.: Наук. думка, 2007. – С. 329-347.
7. Лурье А.И. Пространственные задачи теории упругости / А.И. Лурье – М.: ГИТТЛ, 1955. – 492 с.

Поступила в редакцию 18.01.2012 г.

УДК 532.5

УГЛОВОЕ ОБТЕКАНИЕ ДВУХ МОДЕЛЕЙ МОСТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

А. А. Воскобойник
Институт гидромеханики НАН Украины, г. Киев

Экспериментально исследованы особенности генерации крупномасштабных вихревых структур, формирующих подковообразную вихревую систему, при следном обтекании моделей двух мостовых переходов. Определены масштабы и месторасположение вихревых структур, а также кинематические и динамические характеристики поля скоростей вблизи модели трехрядного свайного ростверка, расположенного за призматической опорой, при их угловом и осесимметричном обтекании. Визуальные исследования позволили установить области формирования локального и глобального размывов перед мостовыми опорами, изучить их эволюцию и области максимальных касательных напряжений. Показано, что при угловом обтекании моделей, значения скоростей вблизи трехрядного свайного ростверка увеличились, по сравнению с их осесимметричным обтеканием.

Ключевые слова: групповая мостовая опора, угловое обтекание, поле скорости, когерентные вихревые структуры.

Введение. Мостовые конструкции представляют собой местные преграды для речного потока. Использование комплексных или групповых опор при строительстве мостовых переходов приводит к локальному размыву отдельных опор и глобальному размыву грунта вокруг мостовой конструкции в целом. Глобальный размыв обусловлен действием подковообразных вихревых структур, охватывающих всю сложную мостовую конструкцию. Механизм генерации и формирования таких подковообразных вихрей идентичен тому, который присущ для одиночных опор, но при обтекании комплексных опор присутствует взаимодействие между вихревыми потоками, генерируемыми вблизи каждого элемента мостовой конструкции. Вихревое взаимодействие зависит от ряда гидродинамических и гидрологических параметров и существенно изменяется от формы и конструкции групповой опоры, что накладывает определенные ограничения на численные и экспериментальные оценки особенностей генерации и развития вихревых структур вблизи опор и их действия на прилегающий грунт [1 – 3].

Известно, что вокруг мостовой опоры существует довольно широкий диапазон турбулентных масштабов, которые управляют процессом переноса грунта. Таким образом, чтобы понять механизм размыва, в первую очередь, необходимо качественно описать структуру когерентных вихрей, формирующих подковообразную систему, в различных режимах течения и количественно охарактеризовать эту особенность потока вблизи основания опоры.

Отрыв набегающего пограничного слоя и формирование отрывной (застойной) линии на поверхности дна вокруг опоры является следствием неблагоприятного градиента давления, обусловленного наличием опоры. Установлено [4 – 6], что продольные неблагоприятные градиенты давления являются основными причинами формирования подковообразных вихрей вокруг фронтальной части основания опоры. Подковообразные вихри являются следствием реорганизации завихренности пограничного слоя вниз по потоку от отрывной линии. Первичная подковообразная вихревая структура имеет то же направление вращения, что и завихренность в набегающем пограничном слое. Подковообразный вихрь вытягивается вокруг опоры и изгибается вокруг ее передней части вблизи дна, частично из-за поперечных градиентов давления. Следовательно, боковые вихревые линии становятся ориентированными в продольном направлении, огибая опору, и имеют завихренность, противоположно направленную по обеим боковым сторонам обтекаемой опоры. Крупномасштабные подковообразные вихри переносят более высокоскоростную жидкость вдоль фронтальной части опоры по направлению ко дну, формируя ниспадающее течение. Как результат взаимодействия между ниспадающим течением, дном и подковообразным вихрем сопротивление вокруг фронтальной части опоры увеличивается. В случае набегающего турбулентного течения местоположение, масштаб и интенсивность подковообразных вихрей сильно изменяется во времени. Они генерируют высокую турбулентность и пульсации давления и образуют значительные касательные напряжения на дне, приводя к размыву грунта вблизи обтекаемых опор [7].

Эволюция подковообразной вихревой системы вокруг основания обтекаемого тела и неустойчивый след позади него является общими явлениями, которые имеют место в большинстве измерений динамики подобных течений, хотя ряд отличий сопряженных течений существенно изменяются в зависимости от параметров потока и формы плохообтекаемых тел [1, 5]. Экспериментальные исследования [1, 5] показывают, что структура подковообразной вихревой системы сильно зависит от числа Рейнольдса и характеристик пограничного слоя, который формируется перед обтекаемой преградой. Структура подковообразной вихревой системы для режима ламинарного обтекания состоит из трех основных вихрей, которые вращаются в одном направлении. Вихрь, который развивается, зарождается на позиции, которая находится на наибольшем расстоянии от поверхности обтекаемой опоры. Первичный вихрь располагается в средней позиции, в то время как угловой вихрь находится ближе всего к опоре. Развивающийся вихрь порождается пограничным слоем, который отрывается от обтекаемой поверхности дна, из-за интенсивного неблагоприятного градиента давления, генерируемого наличием опоры на обтекаемой поверхности. Этот вихрь постепенно переносится вниз по потоку и, в конце концов, становится новым первичным вихрем. В это время первичный вихрь конвектирует по направлению к угловому вихрю и постепенно сливается с ним. Как показывают исследования [8], процесс этот является периодическим.

Из-за сложности комплексных конструкций, включающих в себя обтекание ансамбля препятствий, установленных на сопрягаемой поверхности, их исследования не многочисленны. Так, например, в работах [8, 9] выполнены экспериментальные измерения течения вокруг системы кубов, которые были установлены на плоскую поверхность. Установлено, что для малых расстояний между кубами сдвиговый слой, оторвавшийся от первого куба, присоединяется на сторонах второго препятствия и регистрируется периодический сход вихрей только в следе нижнего за потоком куба. Таким образом, два куба действуют, как одно плохообтекаемое тело. В работе [8] наблюдали осцилляции вихревого потока в промежутке между кубами и явление следовой синхронизации для трехмерной тандемной геометрии. В работе [9] авторы показали характерные особенности поля осредненной скорости в диапазоне синхронизации и механизм схода следа на разных фазах цикла схода. Для больших разделений появляется второй подковообразный вихрь перед фронтальной частью второго куба и каждый из кубов обтекается, как независимое препятствие [10].

Учитывая выше приведенное, актуальным остается исследование взаимодействия вихревых структур и струйных течений при следном обтекании многосвайной конструкции. Этой проблематике посвящены представленные экспериментальные исследования обтекания групповой модели призматической опоры и трехрядного свайного ростверка, расположенных под углом 5° к набегающему потоку, и изучение особенностей формирования и динамики подковообразных вихревых структур, образующихся при обтекании этой конструкции двух мостовых переходов. (Опоры существующего железнодорожного моста на р.Днепр в г. Киеве и свайного ростверка строящегося автомобильно-железнодорожного моста).

Экспериментальная установка и методика измерений. Проведение экспериментальных исследований было осуществлено в гидродинамическом лотке длиной 14 м, шириной 0,8 м и глубиной до 0,8 м со свободной поверхностью воды. Детальное описание экспериментальной установки, программы и методики исследований вихревого течения при сопряженном обтекании трехрядного цилиндрического ростверка на плоской поверхности приведено в работе [11]. Поэтому в данном исследовании приведено лишь краткое описание основных элементов экспериментального стенда и методики опытов, которые относятся к инструментальным измерениям полей скорости вихревого течения вблизи моделей обтекаемых опор. Итак, вода в гидродинамический лоток подавалась с помощью насосов через отстойную камеру, диффузор, хонейкомбы и решетки, спрямляющие поток. На дне измерительного участка, расположенного посредине лотка, были установлены две модели мостовых опор, смонтированных по оси плоской пластины длиной 2 м (рис. 1). Модель призматической опоры располагалась выше по потоку, чем модель мостовой опоры в виде трехрядного свайного ростверка. Расстояние между моделями составляло около 0,4 м. Длина призматической опоры составляла 0,3 м, ширина – 0,1 м, а высота – 0,24 м. Длина ростверка была почти 0,6 м, ширина – 0,1 м, а высота – 0,2 м и он состоял из 31 цилиндрической сваи диаметром $d = 0{,}027$ м, которые располагались в три ряда в шахматном порядке. Глубина потока в опытах была постоянной и равнялась 0,2 м, а его скорость (U_∞) составляла 0,1 м/с.

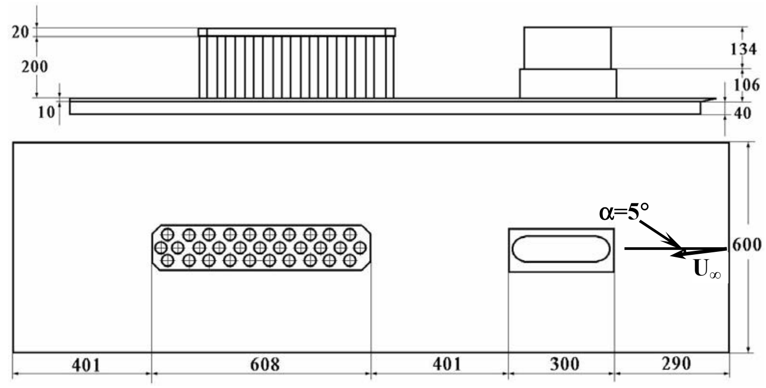


Рис. 1. Схема двух мостовых опор и их размещение на пластине при

Числа Рейнольдса и Фруда составляли $Re_x = xU_\infty/\nu = 10^5$, $Re_d = dU_\infty/\nu = 2{,}7 \cdot 10^3$ и $\mathrm{Fr} = U_\infty / \sqrt{gH} = 0{,}067$, соответственно, где x – продольное расстояние в направлении потока от начала плоской пластины до первой центральной сваи ростверка, ν – коэффициент кинематической вязкости воды, g – ускорение свободного падения и H – глубина потока.

Качественная оценка пространственных и временных характеристик вихревого движения вблизи трехрядного ростверка и степени его взаимодействия с обтекаемой поверхностью, согласно разработанной программе и методике опытов [11], проводились во время визуальных исследований. В местах, где наблюдаются характерные когерентные вихревые структуры в виде подковообразных вихрей и следных вихревых структур, проводились инструментальные измерения поля скорости.

Кинематические характеристики сопряженного течения измерялись с помощью специально разработанных и изготовленных миниатюрных термисторных датчиков скорости и пьезорезистивных датчиков скоростного напора. Термисторные датчики скорости (диаметр чувствительной поверхности 0,008 м) монтировались с помощью специальных державок в корреляционный блок (с фиксированным расстоянием между двумя датчиками). Контроль скорости потока осуществлялся с помощью манометрического датчика типа трубки Пито двойного напора, где в качестве чувствительного элемента применялся пьезорезистивный датчик полного давления. Электрические сигналы, генерируемые датчиками под действием соответствующих нагрузок, поступали на усиливающую и контрольно измерительную аппаратуру, а затем на средства регистрации информации и персональные компьютеры через соответствующие аналогово-цифровые преобразователи. На персональных компьютерах и на специализированных двухканальных анализаторах спектров фирмы Брюль и Къер экспериментальные данные обрабатывались и анализировались с помощью стандартных и специально разработанных программ с использованием теории вероятности и математической статистики.

Все средства измерения, контроля и регистрации информации перед применением, во время проведения опытов и после выполнения их тестировались и калибрировались согласно паспортным данным и методике проведения опытов. Датчики аттестовались и поверялись с помощью абсолютных и относительных методов на специальных стендах и на соответствующем оборудовании. Погрешность измерений интегральных и осредненных значений скорости не превышала 4% (при надежности $P = 0,95$), пульсационных ее составляющих – до 6 %.

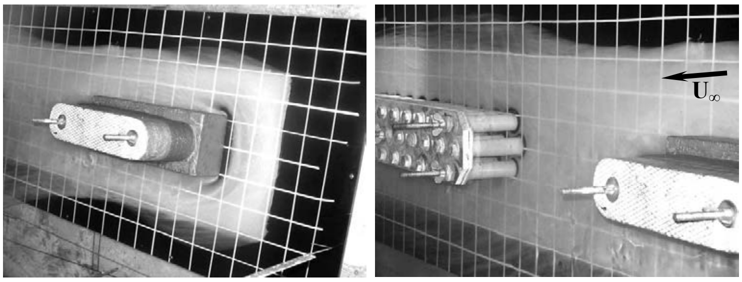
Результаты измерений. Визуальные наблюдения. Визуальные наблюдения углового (под углом 5°) обтекания двух моделей мостовых опор, расположенных в следе друг за другом, проводились при скорости набегающего потока равной $U_\infty = 0,1$ м/с. Время наблюдения составляло около (15 – 20) минут. Эволюцию размыва контрастного покрытия, в виде пленок высохшего сгущенного молока, качественно характеризующую касательные напряжения на обтекаемой поверхности, обусловленные действием вихревых структур и ниспадающим течением, можно описать следующим образом:

$t = (0 - 1)$ – начинается смыв пленки сгущенного молока в передней части призматической опоры, образуя за ней отрывные вихри. Значительное количество смытого сгущенного молока уносится потоком к, стоящей в следе, модели опоры трехрядного свайного ростверка. Размыва контрастного покрытия в окрестности модели ростверка пока не наблюдается, т.е. пленка сгущенного молока еще сохраняется;

$t = (1 - 3)$ – перед моделью свайного ростверка начинается размыв контрастного покрытия вблизи первой и второй боковых опор (с наветренной стороны конструкции). Около остальных опор ростверка размыва нет, так как идет значительный нанос смытого сгущенного молока от призматической опоры, расположенной выше по потоку;

$t = (3 - 4)$ – продолжается размыв контрастного покрытия перед призматической опорой и вблизи передних , а также около боковых опор в кормовой части ростверка, с наветренной стороны, см. рис. 2, а;

$t = (4 - 6)$ – за призматической опорой формируются следные вихри, образующие симметричную вихревую дорожку Кармана. Смываемое сгущенное молоко, объединенное в вихревые структуры, уносится вниз по потоку к свайному ростверку. Продолжаются размывы контрастного покрытия около передних свай и в кормовой части, с наветренной стороны ростверка, см. рис. 2, б;



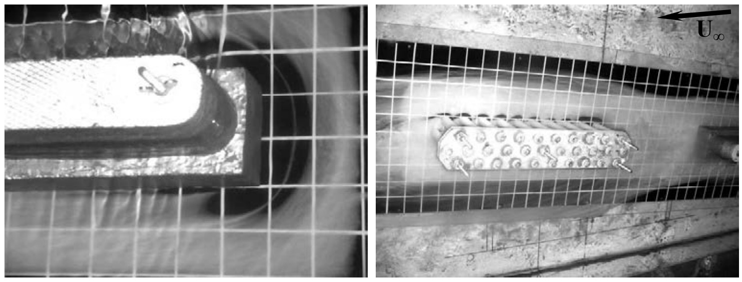
а б

Рис. 2. Эволюция размыва контрастного покрытия при угловом обтекании двух мостовых переходов: а) t – (3 – 4) минута и б) t – (4 – 6) минута

$t = (6 - 9)$ – перед моделью трехрядного свайного ростверка наибольшие размывы контрастного покрытия (до 0.5d) наблюдаются около передних свай, а также в кормовой части вблизи последних боковых цилиндрических опор (с наветренной стороны ростверка). С подветренной части модели ростверка размывы сгущенного молока незначительные;

$t = (9 - 12)$ – в передней части призматической опоры наблюдаются большие размывы контрастного покрытия в виде следов системы подковообразных вихрей. След первого вихря располагается у самой опоры, его ширина порядка (3 – 4)·10^{-2}м или $(0,26 - 0,35)b$. След второй вихревой система находится на расстоянии (5 – 6)·10^{-2}м или $(0,44 - 0,53)b$ от опоры, ее ширина около (1 – 2)·10^{-2}м или $(0,09 - 0,18)b$. Расстояние между этими размывами (0.5 – 1)·10^{-2}м или $(0,04 - 0,09)b$. Оба подковообразных вихря огибают опору под углом (20° – 50°) с подветренной стороны и, под углом (10° – 40°) с наветренной стороны модели ростверка, см. рис. 3, а;

$t = (12 - 15)$ – значительные размывы контрастного покрытия наблюдаются в передней части призматической опоры. В кормовой части опоры сгущенное молоко еще сохраняется. Вблизи опоры в виде ростверка более всего размыто покрытие около передних цилиндрических свай, а также с наветренной стороны у боковых свай в кормовой части опоры. Неразмытым покрытие остается за самой мостовой моделью и, с подветренной стороны у боковых свай в средней части опоры, см. рис. 3, б;



а б

Рис. 3. Эволюция размыва контрастного покрытия при угловом обтекании двух мостовых переходов: а) t – (9 – 12) минута, б) t – (12 – 15) минута

$t = (15 - 20)$ – процесс размыва контрастного покрытия в окрестности двух мостовых опор принял установившийся характер – новые области размыва покрытия не наблюдаются.

Визуальные исследования показали, что при угловом обтекании двух мостовых моделей, наибольшие размывы контрастного покрытия зафиксированы – для призматической опоры, в передней части опоры и в передней боковой части опоры. В кормовой части призматической опоры размывы незначительные. Для модели трехрядного свайного ростверка зафиксированы размывы в передней части опоры и в кормовой части опоры с наветренной стороны.

Инструментальные измерения. Все инструментальные измерения проводились только вблизи модели трехрядного свайного ростверка. Измерения были проведены перед первой и второй центральными сваями, а также перед второй боковой сваей модели ростверка. Экспериментальные измерения проводились при скорости набегающего потока $U_\infty = 0{,}1$ м/с, глубине потока $h = 0{,}2$ м, угле атаки $\alpha = 5^\circ$.

При угловом обтекании перед первой центральной опорой скорости увеличились, по сравнению с осесимметричным обтеканием двух мостовых конструкций. Результаты исследований показали, что перед самой опорой в местоположении ($x = -0{,}08d$; $y = 0{,}08d$; $z = 0$) средняя скорость увеличилась на (7 – 12)%, а на удалении от нее по направлению к призматической опоре – более чем в 2 раза. Так, например, при осевом следном обтекании моделей двух мостовых переходов скорость в районе $x = -(10 - 12)\cdot 10^{-3}$ м или $x = -(0{,}37 - 0{,}44)d$; $y = (6 - 8)\cdot 10^{-3}$ м или $(0{,}22 - 0{,}30)d$; $z = 0$ составляет около $0{,}3U_\infty$, а при угловом обтекании - $0{,}75U_\infty$. Кроме того, расположение и масштаб первой вихревой структуры из подковообразной системы, наиболее удаленной от конструкции ростверка, с координатами $x = -10\cdot 10^{-3}$ м или $-0{,}37d$; $y = 4\cdot 10^{-3}$ м или $0{,}15d$; $z = 0$, практически не изменился. В то же время скорости этого вихря, как осредненные, так и пульсационные возросли. Вторая вихревая структура подковообразной системы при угловом обтекании переместилась вдоль поверхности опоры почти в 2 раза выше над плоской пластиной. Координаты этого вихря составляют: $x = 4\cdot 10^{-3}$ м или $0{,}15d$; $y = 6\cdot 10^{-3}$ м или $0{,}22d$; $z = 0$, а масштаб его уменьшился до $4\cdot 10^{-3}$м или $0{,}15d$, как в продольном, так и в вертикальном направлениях.

Изменения средних скоростей в ядре и на периферии вихревых структур, формирующих подковообразную систему и расположенных вблизи места сопряжения первой центральной опоры свайного ростверка и плоскости пластины, показаны на рис. 4. Здесь кривая 1 и кривая 2 представляет собой изменения во времени осредненных скоростей, которые измерены в ядре и на периферии, соответственно, второй вих-

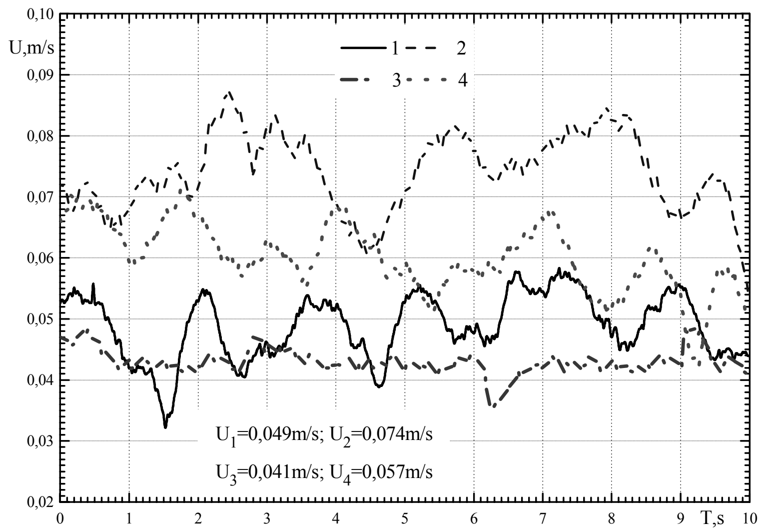


Рис. 4. Средние скорости в ядре и на периферии вихревых структур перед первой центральной опорой свайного ростверка при угловом и осесимметричном обтекании

ревой структуры при угловом обтекании групповой конструкции. Кривая 1 измерена в точке с координатами ($x=-0{,}15d$; $y=0{,}22d$; $z=0$), а кривая 2 – в точке ($x=-0{,}3d$; $y=0{,}28d$; $z=0$). Кривая 3 и кривая 4 измерены также в ядре и на периферии ближайшей к опоре вихревой структуры подковообразной системы, для которых координаты были следующими $x=-0{,}15d$; $y=0{,}15d$; $z=0$ (ядро вихря) и $x=-0{,}3d$; $y=0{,}22d$; $z=0$ – его периферия. Исследования показывают, что при угловом обтекании моделей мостовых переходов увеличиваются средние скорости как в ядре вихря, ближайшем к опоре, так и на его периферии в среднем на 20 % и 30 %, соответственно. При этом в ядре этого вихря интенсивно растут низкочастотные колебания скорости, обусловленные взаимодействием локальных и глобальных подковообразных систем со следными вихрями.

Как показали результаты экспериментальных исследований, перед второй центральной опорой значения средних скоростей также возросли, особенно ближе к середине между центральными опорами, и достигли $(0{,}9-0{,}95)U_\infty$. Линии равных скоростей имеют незамкнутый периодически осциллирующий характер и только возле самого дна замыкаются в вихревую систему, которая имеет приплюснутый ко дну вид. Центр этой вихревой структуры имеет координаты $x=-5\cdot10^{-3}$ м или $-0{,}19d$; $y=3\cdot10^{-3}$ м или $0{,}11d$; $z=0$ и скорость в ядре этого вихря составляет около $0{,}7U_\infty$. Масштаб этой вихревой структуры следующий: $\lambda_x=8\cdot10^{-3}$ м или $0{,}3d$ и $\lambda_y=5\cdot10^{-3}$ м или $0{,}19d$.

Перед второй боковой опорой с подветренной стороны трехсвайного ростверка скорости возросли до $(0{,}8-0{,}85)U_\infty$ ближе к серединному сечению между первой и второй боковыми опорами, а возле самой второй боковой опоры средняя скорость составляет порядка $0{,}75U_\infty$. Линии равных скоростей в месте сопряжения боковой опоры с пластиной образуют две замкнутые области с центрами $x=-11\cdot10^{-3}$ м или $-0{,}41d$ от второй боковой опоры; $y=4\cdot10^{-3}$ м или $0{,}15d$; $z=38\cdot10^{-3}$ м или $1{,}41d$ и $x=-5\cdot10^{-3}$ м или $-0{,}19d$; $y=3\cdot10^{-3}$ м или $0{,}11d$; $z=38\cdot10^{-3}$ м или $1{,}41d$. Радиусы этих вихрей составляют около $2\cdot10^{-3}$м или $0{,}8d$ в горизонтальном направлении и около $3\cdot10^{-3}$м или $0{,}11d$ – в вертикальном. В то же время для осесимметричного обтекания групповой конструкции мостовых опор перед второй боковой опорой ростверка была обнаружена только одна крупномасштабная вихревая структура подковообразной системы, которая имела масштаб $7\cdot10^{-3}$м, как в горизонтальном, так и в вертикальном направлениях. Центр этой вихревой структуры находится на удалении порядка $x=-(9-11)\cdot10^{-3}$ м или $x=-(0{,}33-0{,}41)d$ от боковой опоры и на расстоянии $y=(5-6)\cdot10^{-3}$ м или $(0{,}21-0{,}22)d$ от поверхности плоской пластины. Таким образом, при угловом обтекании крупномасштабная вихревая структура перед второй боковой опорой свайного ростверка, генерируемая при осесимметричном обтекании групповой конструкции, разделилась на две меньшие по масштабу вихревые структуры, формирующие локальную подковообразную вихревую систему. Эта пара вихрей располагается перед второй боковой опорой почти на одной высоте от обтекаемой поверхности плоской пластины.

Для вихревой структуры, находящейся ближе ко второй боковой опоре при угловом обтекании групповой конструкции, и для вихревой структуры, огибающей вторую боковую опору при осесимметричном обтекании моделей двух мостовых переходов, изменения средних скоростей во времени показаны на рис. 5. Кривые 1 и 2 получены для углового обтекания групповой конструкции, соответственно, в ядре и на периферии вихря, а кривые 3 и 4 измерены для осесимметричного следного обтекания моделей мостовых опор. Координаты точек измерения: кривая 1 – ($x=3d$; $y=0{,}11d$; $z=1{,}41d$), кривая 3 – ($x=2{,}8d$; $y=0{,}21d$; $z=1{,}41d$), а

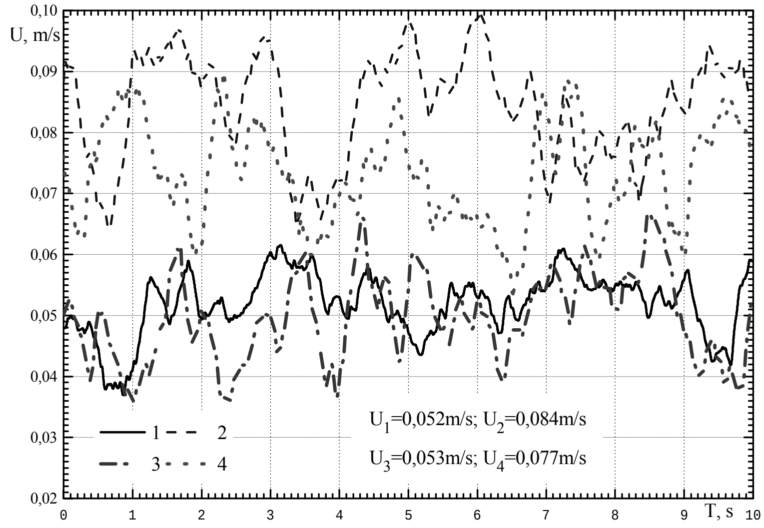


Рис. 5. Средние скорости в ядре и на периферии вихревых структур перед второй боковой опорой свайного ростверка при угловом и осесимметричном обтекании

кривые 2 и 4 – ($x = 2{,}85d$; $y = 0{,}19d$; $z = 1{,}41d$) и ($x = 2{,}7d$; $y = 0{,}24d$; $z = 1{,}41d$), соответственно. Как следует из представленных результатов, средние скорости в ядре вихревых систем при изменении режима обтекания, практически, не изменились (напомним, что при угловом обтекании точка измерений находилась на подветренной стороне ростверка). На наветренной стороне значения средних и пульсационных скоростей в окрестности боковых опор увеличиваются. На периферии вихревых структур локальных подковообразных систем в окрестности второй боковой опоры средняя скорость при угловом обтекании выросла почти на 10 % (см. кривую 2 и 4 на рис. 5).

Выводы Результаты экспериментальных исследований углового обтекания двух моделей мостовых переходов дали возможность сделать следующие выводы:

Обнаружено, что размыв контрастного покрытия, в первую очередь возникает перед призматической опорой, находящейся выше по потоку от модели ростверка, затем размыв начинается вблизи передних свай трехрядного ростверка, с наветренной стороны модели. По истечении (15 – 20) минут наибольшие участки размывов зафиксированы:

- перед призматической опорой в виде двух размытых следов от действия двух крупномасштабных вихревых структур, огибающих опору под азимутальным углом, приблизительно 35° с подветренной стороны и под углом около 25° с наветренной стороны;
- вблизи модели трехрядного ростверка, перед передними цилиндрическими сваями, а также в кормовой части, особенно, с наветренной стороны. В подветренной части ростверка наблюдаются незначительные размывы у передних боковых свай, а также в кормовой части модели.

Установлено, что перед первой центральной опорой ростверка значения скоростей (по сравнению с осесимметричным обтеканием) увеличились, перед самой опорой почти на 10%, а на удалении, ближе к призматической опоре более, чем в 2 раза. Перед этой опорой зафиксированы две вихревые структуры как при осесимметричном обтекании, так и при угловом обтекании. Размеры и масштаб первой вихревый структуры (наиболее удаленной от опоры) с изменением угла почти не изменился. Вторая вихревая структура при угловом обтекании переместилась вверх вдоль опоры, а масштаб этой структуры уменьшился. Значения средних скоростей, как в ядре этой вихревой структуры, так и на его периферии увеличились, в среднем на 20 % и 30 %, соответственно. При этом в ядре второй вихревой структуры подковообразной вихревой системы интенсивно растут низкочастотные колебания скорости, обусловленные взаимодействием локальных и глобальных подковообразных систем со следными вихрями.

Зафиксировано, что перед второй центральной опорой значения средних скоростей также возросли, особенно ближе к середине между центральными опорами, и достигли $(0{,}9 - 0{,}95)U_\infty$. Зарегистрирована вихревая система, которая имеет приплюснутый ко дну вид. Центр этой вихревой структуры имеет координаты $x = -0{,}19d$; $y = 0{,}11d$ и скорость в ядре этого вихря составляет около $0{,}7U_\infty$. Масштаб вихревой структуры следующий: $\lambda_x = 8 \cdot 10^{-3}$ м и $\lambda_y = 5 \cdot 10^{-3}$ м.

Установлено, что при угловом обтекании перед второй боковой опорой, с подветренной стороны ростверка, значения средних скоростей возросли до $(0{,}8 - 0{,}85)U_\infty$, а возле самой второй боковой опоры – до $0{,}75U_\infty$. Перед этой опорой зафиксированы две квазиустойчивые вихревые системы (при осесимметричном обтекании в этом месте была зарегистрирована одна, но более крупная вихревая система). Средние скорости в ядре вихревых систем при изменении режима обтекания, практически, не изменились. На периферии вихревых структур в окрестности второй боковой опоры средняя скорость при угловом обтекании выросла почти на 10 %. С наветренной стороны ростверка значения средних и пульсационных скоростей в окрестности боковых опор увеличиваются.

РЕЗЮМЕ

Експериментально досліджені особливості генерації великомасштабних вихрових структур, формуючих підковоподібну вихрову систему, при слідному обтіканні моделей мостових переходів. Визначені масштаби та місце розташування вихрових структур, а також кінематичні та динамічні характеристики поля швидкостей поблизу моделі трирядного пального ростверку, розташованого за призматичною опорою, коли вони обтікаються під кутом та вісесиметрично. Візуальні дослідження дозволили встановити області формування місцевого та глобального розмивів перед мостовими опорами, вивчити їхню еволюцію та області максимальних дотичних напруг. Показано, що при кутовому обтіканні моделей, значення швидкостей поблизу трирядного пального ростверку збільшились, в порівнянні з випадком, коли вони обтікаються вісесиметрично.

Ключові слова: групова мостова опора, кутове обтікання, поле швидкостей, когерентні вихрові структури.

SUMMARY

The features of generation of the large-scale vortex structures, which form the horseshoe vortex system, are investigated experimentally in the wake flow around two bridge models. Scales and locations of the vortex structures, as well as kinematical and dynamical characteristics of the velocity fields are determined near-the model of three-row pile grillage, which is located behind the prismatic pier in the angular and axisymmetric flow. Visual study allows one to find the areas of forming of the local and global scours in front of the bridge piers, and study their evolution and areas of maximal wall shear stresses. It is shown that the values of velocities near the three-row pile grillage increased in the angular flow around of models compared to their axisymmetric flow values.

Keywords: group bridge pier, angular flow, velocity field, coherent vortex structures.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ettema R. Similitude of large-scale turbulence in experiments on local scour at cylinders / R. Ettema, G. Kirkil, M. Muste // J. Hydr. Eng. – 2006. – Vol. 132, No 1. – P. 33-40.
2. Dargahi B. Controlling mechanism of local scouring / B. Dargahi // J. Hydr. Eng. – 1990. – Vol. 116, No 10. – P. 1197-1214.
3. Akilli H. Vortex formation from a cylinder in shallow water / H. Akilli, D. Rockwell // Phys. Fluids. – 2002. – Vol. 14. – P. 2957–2967.
4. Chen G. The effects of cylinder shape on the primary horseshoe vortex of juncture flow / G. Chen, X.D. Du, Q.D. Wei // 9th Symposium on Flow Visualization. – 2000. – Pap. 54. – 9 p.
5. Melville B.W. Pier and abutment scour: Integrated approach / B.W. Melville // J. Hydr. Eng. – 1997. – Vol. 123, No 2. – P. 125-136.
6. Numerical and experimental investigation of flow and scour around a circular pile / A. Roulund, B.M. Sumer, J. Fredsoe, J. Michelsen // J. Fluid Mech. – 2005. – Vol. 534. – P. 351–401.
7. Sahin B. Horseshoe vortex studies in the passage of a model plate-fin-and-tube heat exchanger / B. Sahin, N.F. Ozturk, C. Gurlek // Int. J. Heat and Fluid Flow. – 2008. – Vol. 29. – P. 340-351.
8. Kirkil G. Coherent structures in the flow field around a circular cylinder with scour hole / G. Kirkil, S.G. Constantinescu, R. Ettema // // J. Hydr. Eng. – 2008. – Vol. 134, No 5. – P. 572-587.
9. Martinuzzi R. Vortex shedding from two surface-mounted cubes in tandem / R. Martinuzzi, B. Havel // Int. J. Heat Fluid Flow. – 2004. – Vol. 25. – P. 364-372.
10. Горбань В.О. Вивчення взаємодії квадратних циліндрів, розташованих тандемом / В.О. Горбань, І.М. Горбань // Прикладна гідромеханіка. – 2008. – Т. 10, № 1. – С. 36-47.
11. Воскобійник А.В. Спряжене обтікання трирядного пального ростверку на пласкій поверхні. Частина 1. Формування підковоподібних вихорів / А.В. Воскобійник, В.А. Воскобійник, О.А. Воскобойник // Прикладна гідромеханіка. – 2008. – Т. 10, № 3. – С. 28-39.

Поступила в редакцию 07.06.2011 г.

УДК 532.5.517:532.574

ЦИРКУЛЯЦІЙНА ТЕЧІЯ У ПОПЕРЕЧНО ОБТІЧНІЙ НАПІВЦИЛІНДРИЧНІЙ ТРАНШЕЇ

В. А. Воскобійник, А. В. Воскобійник
Інститут гідромеханіки НАН України, м. Київ

Експериментально досліджені поля швидкості дали змогу зафіксувати у напівциліндричній траншеї великомасштабний вихор та серію дрібномасштабних вихорів. Встановлено, що при збільшенні швидкості обтікання число дрібномасштабних вихрових структур збільшується, а розмір великомасштабного вихору зменшується та він притискається потоком ближче до придонної частини каверни.

Ключові слова: напівциліндрична траншея, поле швидкості, ізотахи, когерентні вихрові структури

Вступ. В прикладній гідромеханіці на багатьох тілах, які обтікаються потоком рідини, зустрічаються локальні заглиблення різних форм та розмірів. Ці заглиблення можуть бути конструктивного характеру, наприклад вихлопні труби, дверні ручки, люки або відкриті вікна в автомобілях, вантажні люки та колодязі шасі на літаках, торпедні люки у підводних човнах та западини на корпусах кораблів. Заглиблення, можуть бути також випадкового походження – на поверхні космічних апаратів, що входять в атмосферу піддаються дії метеоритів, на корпусах надводних та підводних суден у разі удару з дном або з іншим плаваючим засобом. При обтіканні заглиблень, з їх передньої кромки, за відповідних умов (число Рейнольда, глибина і форма западини) заглиблення, відбувається відрив примежового шару, утвореного на поверхні тіла перед заглибленням. За точкою відриву формується шар змішування між рухомою рідиною над заглибленням та нерухомою у ньому (у початковий момент часу). Складаючись із вихрових систем, він взаємодіє з кормовою частиною заглиблення і частково виноситься потоком за його межі. Інша частина шару змішування, іноді відносно велика, пересувається углиб заглиблення, утворюючи циркуляційну зону, що складається з одного або декількох великомасштабних вихорів, залежно від співвідношення висоти заглиблення до його ширини та режиму обтікання [1 – 3]. Потік рідини циркуляційної зони, при наближенні до передньої стінки заглиблення, частково пересувається у вигляді пристінного струменя до відривної області заглиблення, взаємодіючи з початковою ділянкою шару змішування. Решта частини циркуляційної рідини, обмінюючись енергією з нижньою поверхнею шару змішування, спрямовується до кормової стінки заглиблення, замикаючи, таким чином, циркуляційну зону у вигляді великомасштабної циркуляційної вихрової системи [4 – 6]. В області взаємодії шару змішування та вихрових систем, які утворюються у ньому, з кормовою стінкою заглиблення виникають значні рівні пульсацій швидкості та тиску, температури та завихореності, що мають як лінійний, так і нелінійний характер (у переважній більшості випадків) [7 – 9].

Один з актуальних напрямків у сучасній аерогідродинаміці пов'язаний з керуванням потоками за допомогою виступів або заглиблень різноманітної геометрії та масштабів [1, 4, 7, 10]. Геометрія задньої кромки формує відповідні умови приєднання потоку до поверхні та відповідальна за високу інтенсивність пульсуючої течії. Наявність неоднорідності поверхні, яка обтікається потоком рідини, у вигляді опуклості або увігнутості (заглиблення) призводить до змін характеристик набігаючого потоку, а також його дію на саму поверхню. Це призводить до зміни опору таких поверхонь, тепло- та масопереносу, аерогідродинамічних та акустичних шумів та вібрацій обтічних конструкцій, а також ряду інших характеристик літальних апаратів та плаваючих об'єктів [3, 10].

Не дивлячись на інтенсивний розвиток чисельних методів, ключову роль у дослідженні складних турбулентних вихрових течій грає експеримент. Найчастіше нові теоретичні положення та гіпотези будуються саме на основі отриманої в експериментах інформації. У зв'язку з цим, у представленій роботі наводяться результати експериментальних досліджень впливу локальної напівциліндричної каверни, котра обтікається поперечним потоком відносно її поздовжньої вісі, на інтегральні характеристики примежового шару над плоскою пластиною для різних режимів обтікання.

Експериментальна установка та методика вимірювань. Експерименти із вивчення особливостей формування когерентних вихрових структур та можливості керування ними виконані в аеродинамічній трубі відкритого типу. На рис. 1 представлено аеродинамічний стенд та контрольно вимірювальна апаратура: 1 – робоча ділянка; 2 – лемніскатне сопло; 3 – пластина із канавкою; 4 – координатний пристрій з мікрометричною головкою; 5 – державка з термоанемометричним

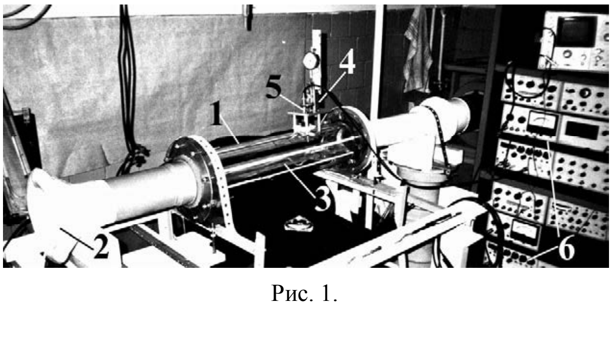


Рис. 1.

датчиком; 6 – контрольно вимірювальна апаратура [8, 11]. У ході дослідження проведені термоанемометричні вимірювання поля швидкості над обтічною пласкою пластиною з напівциліндричним заглибленням, яке розташоване поперек до напряму потоку (рис. 2), а також усередині нього.

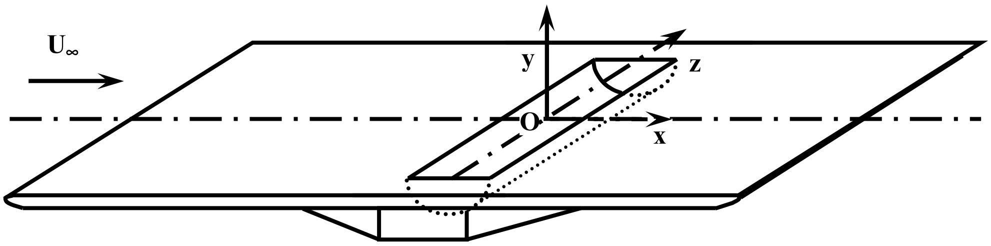


Рис. 2. Схема розташування напівциліндричного заглиблення на поверхні плоскої пластини та система координат, яка використовується

Робоча ділянка труби мала циліндричну форму з внутрішнім діаметром 0,102 м та була зроблена з прозорої труби для проведення візуальних дослідів. Повітря з лабораторного приміщення поступало до труби через конфузорний вхід у вигляді лемніскати Бернулі для зменшення збурення потоку та створення прийнятного ступеня турбулентності в аеродинамічній трубі (рис.1). На виході з робочої ділянки труби стояв центробіжний насос, який всмоктував повітря через аеродинамічну трубу. Між робочою ділянкою і насосом знаходився проміжний гумовий циліндр для зменшення вібраційних перешкод від насоса. Під час монтажу аеродинамічного стенду усі вузли та системи встановлювалися на вібродемпфуючих та віброізолюючих кріпленнях, амортизаторах, прокладках, у тому числі і багатошарових. При цьому використовувалися як активні (динамічні), так і пасивні методи зменшення акустичних та вібраційних завад. Рівні звукового тиску та вібрацій в робочій ділянці труби контролювались під час проведення дослідів. При створенні стенду віброакустичні шуми були виміряні й прийнята низка заходів по їх зменшенню та усуненню.

В осьовому перерізі вимірювальної ділянки аеродинамічної труби в її горизонтальній площині, уздовж поздовжньої осі монтувалася плоска гідравлічно гладка пластина (висота шорсткості її поверхні не перевищувала товщини витіснення примежового шару). Пластина була зроблена з листового органічного скла завтовшки $4{\cdot}10^{-3}$ м. Вона мала ширину рівну внутрішньому діаметру труби та довжину 0,635 м. Носова та кормова частини пластини були загострені, для забезпечення їх безвідривного обтікання.

На поверхні пластини, у спеціально зробленій ніші, встановлювався поліуретановий напівциліндр. Він закріплювався у втопленому положенні усередині прямокутного паралелепіпеда (короба), виготовленого з органічного скла. У свою чергу, короб приклеювався до нижньої (неробочої) сторони пластини. Поздовжня вісь напівциліндричного заглиблення розташовувалася на відстані 0,5 м від переднього краю пластини перпендикулярно швидкості набігаючого потоку U_∞. Радіус заглиблення складав $R = 9{,}25 \cdot 10^{-3}$ м, а глибина та довжина – $11{,}5 \cdot 10^{-3}$ м та $81 \cdot 10^{-3}$ м, відповідно. Торцеві стінки заглиблення були плоскими і перпендикулярними до поздовжньої вісі заглиблення.

У верхній частині прозорої вимірювальної ділянки аеродинамічної труби (рис. 1) встановлювався координатний пристрій, в якому, за допомогою відповідних державок та вузлів кріплення, фіксувалися термоанемометричні дротяні датчики. Координатний пристрій, обладнаний мікрометричними головками, забезпечував лінійні переміщення термоанемометричних датчиків з похибкою $1 \cdot 10^{-5}$ м. Електричні сигнали від датчиків поступали на комплект термоанемометричної апаратури, а далі на контрольно-вимірювальну апаратуру (вольтметри, осцилографи, частотоміри) та реєструючу апаратуру (чотирьохканальний вимірювальний магнітофон). Зареєстровані електричні сигнали через аналогово цифрові перетворювачі подавались на персональні комп’ютери де оброблялись та аналізувались за розробленими програмами та методиками.

Дротяні термоанемометри калібрувались та тестувались перед проведенням дослідів, під час дослідів, а також після закінчення робіт. Це давало можливість отримувати калібрувальні залежності параметрів, які реєструються датчиками, що було використано під час обробки та аналізу експериментальних результатів. Похибка вимірювань осереднених та інтегральних значень кінематичних характеристик не перевищувала 10 % з надійністю 95 % або 2σ.

Дослідження починалися з проведення візуалізації потоку як у заглибленні, так і в його околі [8, 11]. Картини візуалізації та динаміка вихрового руху усередині каверни і поблизу неї реєструвалися швидкісними кінокамерами, цифровими фотоапаратами та відеокамерами з подальшою обробкою і аналізом фото- та відеоматеріалу на персональних комп'ютерах, оснащених спеціально розробленим програмним забезпеченням. Далі у характерних областях, де вихровий рух середовища простежується виразно, проводилися інструментальні вимірювання з визначенням кількісних параметрів вихрової течії.

Результати вимірювань. У ході експериментальних досліджень полів усереднених і пульсаційних швидкостей, як в поздовжньому, так і поперечному напрямку були отримані векторні поля середніх швидкостей. В результаті побудовані ізотахи або лінії рівних швидкостей, що визначають кінематичні характеристики поля течії над досліджуваною пластиною з заглибленням для різних швидкостей обтікання. На ізолініях, представлених на рис. 3 – 5, цифрами позначена середня швидкість відносно швидкості набігаю-

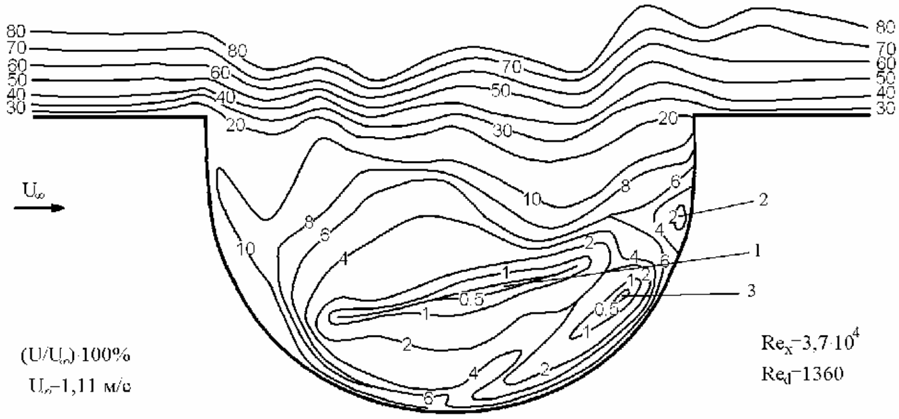


Рис. 3. Лінії рівних середніх швидкостей у напівциліндричній каверні, розташованій поперек набігаючого потоку, для швидкості потоку 1.11 м/с

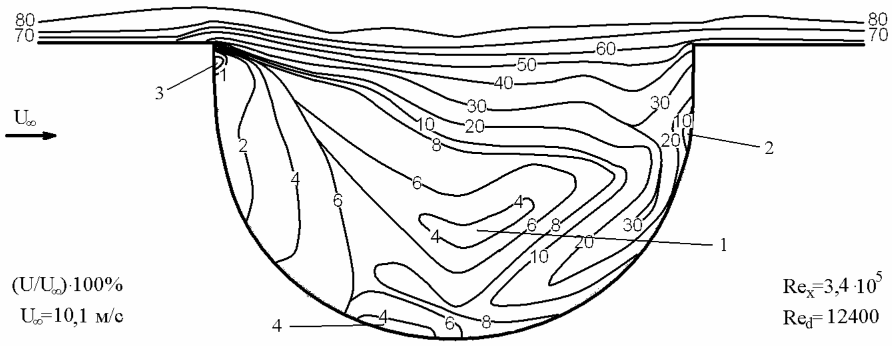


Рис. 4. Лінії рівних середніх швидкостей у напівциліндричній каверні, розташованій поперек набігаючого потоку, для швидкості потоку 10.1 м/с

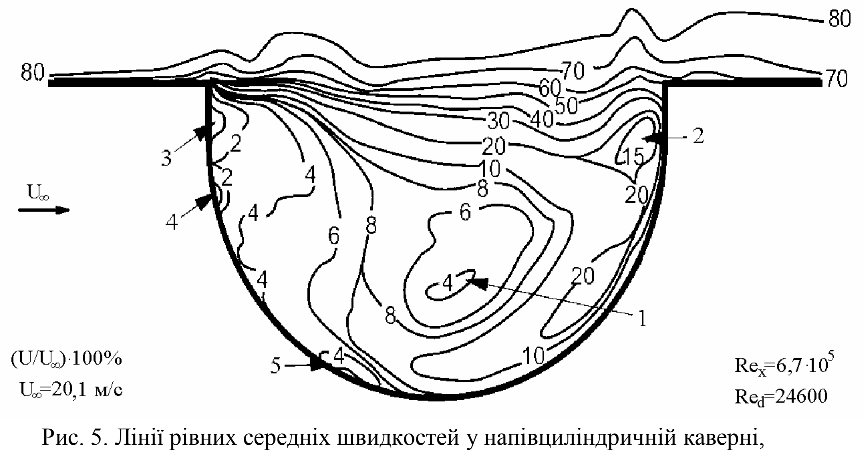


Рис. 5. Лінії рівних середніх швидкостей у напівциліндричній каверні, розташованій поперек набігаючого потоку, для швидкості потоку 20.1 м/с

чого потоку у відсотках, а цифри із стрілками вказують на характерні зони у заглибленні, які трактуються, як місця існування квазістійких вихрових систем. Окрім того, на цих рисунках приведені значення швидкості обтікання і чисел Рейнольдса, визначених за зовнішніми змінними (U_∞ та ν) для місцерозташування заглиблення по довжині пластини і по діаметру заглиблення, а саме як Re_x та Re_d.

Ізотахи для найменшої з досліджуваних швидкостей обтікання $U_\infty = 1{,}11$ м/с показані на рис. 3 для $Re_x = 3{,}7 \cdot 10^4$ та $Re_d = 1360$. Над обтічною пластиною і заглибленням виразно видно області гальмування та прискорення набігаючого потоку, які охоплюють не тільки примежовий шар над пластиною і шар змішування, а також циркуляційну область в самому заглибленні. Перш ніж примежовий шар відірветься від переднього краю заглиблення, він у пристінній області пригальмовується. Гальмування добре видно за підйомом, наприклад, ізолінії швидкості рівної $0{,}2U_\infty$ перед точкою відриву. При відриві примежового шару утворюється шар змішування, котрий розширюється в поперечному напрямку при просуванні вниз за потоком. Нижня межа шару змішування, також як і верхня його частина, мають хвилеподібну форму, яка майже за три періоди перекриває ширину канавки. Довжина хвилі нижньої межі шару змішування в два рази менша у передній частині заглиблення, ніж у кормовій, що корелює з даними для профілів поздовжньої середньої і пульсаційної швидкості, представлених у роботах [12, 13]. В області взаємодії шару змішування з кормовою стінкою заглиблення утворюються два напрямки руху потоку. Перша частина спрямовується вгору до краю заглиблення, а друга – уздовж стінки переноситься до дна заглиблення. Перша частина, зустрічаючись з потоком, розташованим вище відносно шару змішування ($y = 0$), призводить до гальмування і деякого підйому останнього, що видно на рис. 3 (переріз з координатою $x \approx 0{,}4d$). Друга частина шару змішування (нижня), яка спрямувалася до дна заглиблення, піднімається вгору уздовж передньої стінки заглиблення, доходячи до зони відриву примежового шару і, зустрівшись з примежовим шаром, що відірвався, об'єднується із знов сформованим шаром змішування та спрямовується до кормової стінки заглиблення. Ця частина шару змішування утворює циркуляційну зону, усередині якої формується первинний великомасштабний вихор, позначений на рис. 3 індексом 1. У ядрі цього вихору середні швидкості не перевищують значення $0{,}005U_\infty$. Первинний вихор займає майже половину об'єму заглиблення і розташовується декілька похило по відношенню до поздовжньої осі пластини або напряму швидкості обтікання.

На кормовій стінці заглиблення формується характерна зона, позначена цифрою 2. Поблизу цієї зони має місце сідлова точка або точка, де з'являється роздвоєння ізолінії, наприклад, крива $0{,}06U_\infty$ (рис. 3). З наближенням до зони 2 середня швидкість зменшується, вказуючи на місцерозташування дрібномасштабної вихрової структури, найймовірніше, пари вихорів, що протилежно обертаються. Цифрою 3 відмічена чергова замкнена область низькошвидкісної течії у заглибленні, що характеризує зону зародження вторинного вихору.

Таким чином, при малій швидкості обтікання $U_\infty = 1{,}11$ м/с у напівциліндричному заглибленні виявлені три відносно стійкі області низькошвидкісної циркуляційної течії, які сформовані, головним чином, у придонній та кормовій частинах заглиблення. Зареєстрована високошвидкісна циркуляційна течія, спрямована від кормової стінки заглиблення та вздовж придонної поверхні до точки відриву примежового шару. Замикається ця циркуляційна течія об'єднанням із знов сформованою нижньою межею шару змішування, який, здійснюючи хвилеподібний рух, взаємодіє, у свою чергу, з кормовою стінкою заглиблення.

При збільшенні швидкості обтікання пластини з поперечно розташованою напівциліндричною каверною характерні риси структури течії в цілому залишилися схожими з результатами для U_∞=1.11 м/с, але з'явилися і деякі відмінності. Так, швидкість потоку, що досягає верхнього краю кормової стінки, зросла з $0{,}2U_\infty$ до $0{,}6U_\infty$ (рис. 3 та рис. 4), тобто, кінетична енергія взаємодії набігаючого потоку з кормовим краєм заглиблення значно збільшилася, оскільки вона пропорційна u^2 . Циркуляційну область також починає формувати зворотній потік з вищою швидкістю. При низькошвидкісному обтіканні заглиблення в його кормовій частині найбільші швидкості були порядку 6 % від U_∞ (рис. 3), а при $U_\infty = 10{,}1$ м/с місцеві середні швидкості в цій же кормовій частині складали більше 30 % від U_∞ . Тобто, енергообмін між набігаючим потоком та циркуляційною течією в заглибленні в останньому випадку став, поза сумнівом, вищим. З наближенням до дна заглиблення відносна швидкість циркуляційної течії значно зменшилась і, не досягши самої нижньої точки напівциліндричного заглиблення, цей циркуляційний потік почав віддалятися від обтічної поверхні дна та спрямувався до нижньої межі шару змішування. Необхідно відзначити, що при $U_\infty = 1{,}11$ м/с циркуляційна течія досягла зони відриву примежового шару з переднього краю заглиблення (рис. 3), а при $U_\infty = 10{,}1$ м/с циркуляційна течія об'єдналася з шаром змішування значно нижче за напрямом потоку (у перерізі $x \approx -0{,}3d$). Поблизу цього місцерозташування по координаті x, в примежовому шарі спостерігається пригальмовування потоку, а потім його прискорення (рис. 4), корелюючи з даними роботи [13]. Ядро низькошвидкісної області має форму підкови або букви V (рис. 4), утворюючи первинний вихор в заглибленні, позначений цифрою 1. Цей V-подібний квазістійкий великомасштабний вихор, що обмежує циркуляційну зону, займає майже третину об'єму заглиблення, розташовується трохи нижче за його центральну область і має форму вихору, який як би прогнутий майже посередині набігаючим потоком.

У кормовій частині заглиблення (рис. 4) декілька вище, ніж на рис. 3, формується так званий кормовий вихор, а можливо, як раніше було відмічено, і пара вихорів, що протилежно обертаються, які позначені цифрою 2. Ця вихрова область має швидкість більшу, ніж на рис. 3. При збільшенні швидкості обтікання найбільші зміни структура течії в заглибленні отримала у передній відривній частині канавки. На відміну від рис. 3 на рис. 4 за точкою відриву примежового шару виразно простежується область загальмованої течії з яскраво вираженою характерною циркуляційною зоною знижених середніх швидкостей. Відразу за точкою відриву спостерігається квазістійкий дрібномасштабний вихор (індекс 3, рис. 4). У нижній частині заглиблення, в його придонній області, формується ще одна циркуляційна або вихрова область знижених середніх швидкостей, створюючих її ядро. Ця область, позначена цифрою 4, зосереджена поблизу місцерозташування, де високошвидкісна циркуляційна течія відривається від придонної поверхні заглиблення і спрямовується на об'єднання з шаром змішування, про що раніше вже вказувалося.

При подальшому збільшенні швидкості обтікання до $20{,}1$ м/с характер структури потоку як у заглибленні, так і над пластиною не зазнав кардинальних змін, але став складнішим. Це проілюстровано на рис. 5, але деякі відмінності від рис. 4, а тим більше від рис. 3 мають місце. По-перше, в кормовій частині заглиблення зареєстрована характерна вихрова область, позначена цифрою 2, розташована ще вище, ніж на рис. 4 та на рис. 3. По-друге, високошвидкісна циркуляційна течія відірвалася від дна заглиблення декілька нижче за потоком, майже прямо у нижньої точки заглиблення. Ця циркуляційна течія спрямувалася до шару змішування по крутішій траєкторії на відміну від даних рис. 4. По-третє, великомасштабний циркуляційний вихор став компактнішим і прийняв еліпсовидну форму з нахилом, близьким до нахилу кормової частини V-подібного вихору на рис. 4. По-четверте, у відривній області заглиблення з'явилися вже дві дрібномасштабні вихрові системи (індекси 3 і 4, рис. 5) та вони стали енергоємнішими, тобто, кругова швидкість їх підвищилася. Також слід зазначити, що для $U_\infty = 20{,}1$ м/с підвищилася і відносна швидкість циркуляційної течії, що відокремлює первинний циркуляційний вихор (позначений цифрою 1) від загальмованої відривної області заглиблення. По-п'яте, область злиття циркуляційної течії з нижньою межею шару змішування перемістилася ближче до центру заглиблення. Тут, в примежовому шарі, що відірвався, з'явився високий позитивний градієнт середньої швидкості від загальмованої до прискореної течії. Примежовий шар реагує на ці зони взаємодії циркуляційної течії та шару змішування декілька вище за потоком, створюючи зони гальмування та прискорення течії (рис. 4 та рис. 5).

Висновки. Результати експериментальних досліджень полів середніх швидкостей, усередині напівциліндричної траншеї, яка обтікається поперечним потоком, для різних режимів обтікання, дозволяють зробити наступні висновки:

Встановлено, що зі збільшенням швидкості обтікання усередині канавки формується складна вихрова течія, яка призводить до зміни структури примежового шару над пластиною. Над обтічною поверхнею утворюються зони гальмування та прискорення течії, що особливо явно простежується у пристінній області примежового шару.

Виявлено, що усередині напівциліндричної каверни виникає циркуляційна течія, що генерується взаємодією зсувного шару, утвореного у результаті відриву примежового шару з переднього краю каверни, з кормовою стінкою каверни. Циркуляційна течія породжує квазістійку великомасштабну вихрову структуру. У пристінній області взаємодія зсувного шару та великомасштабного вихору з обтічною поверхнею генерує дрібномасштабні вихори.

Зафіксовано, що зі збільшенням швидкості набігаючого потоку число, масштаб та місцерозташування квазістійких вихрових структур змінюються. Так, їх число збільшується, а розмір великомасштабного когерентного вихору зменшується, відносна швидкість обертання його збільшується та він зміщується ближче до придонної частини заглиблення.

Отримані результати доповнюють базу даних крайових умов, що можуть використовуватися для моделювання обтікання поверхонь з напівциліндричноми траншеями, для проектування таких поверхонь, а також для малозатратного керування течіями навколо таких поверхонь та процесами масо- і теплопереносу.

РЕЗЮМЕ

Экспериментально измеренные поля скорости дали возможность зафиксировать в полуцилиндрической траншее крупномасштабный вихрь и серию мелкомасштабных вихрей. Показано, что при увеличении скорости обтекания число мелкомасштабных вихревых структур увеличивается, а размер крупномасштабного вихря уменьшается и он прижимается потоком ближе к придонной части каверны.

Ключевые слова: полуцилиндрическая траншея, поле скорости, изотахи, когерентные вихревые структуры.

SUMMARY

The experimental velocity fields are got enabled to fix a large-scale vortex and series of small-scale vortices in the half-cylindrical cavity. It is set that at the increase of flow velocity the number of small-scale vortical structures is increased, and the size of large-scale vortices decreased and it's presented to the near-bottom cavity part by stream.

Keywords: half-cylindrical cavity, velocity field, curve of equal velocities, coherent vortical structures.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ермишин А.В. Управление обтеканием тел с вихревыми ячейками в приложении к летательным аппаратам интегральной компоновки / Под ред. А.В. Ермишина, С.А. Исаева. – М.-СПб.: Изд-во Моск. ун-та, 2001. – 360 с.
2. Смольяков А.В. Шум турбулентных потоков / А.В. Смольяков – С.-Пб.: ЦНИИ им. Акад. А.И.Крылова, 2005. – 312 с.
3. Blake W.K. Mechanics of flow-induced sound and vibration: in 2 vols / W.K. Blake. – New York: Academic Press, 1986. – 974 p.
4. Теплогидравлическая эффективность перспективных способов интенсификации теплоотдачи в каналах теплообменного оборудования / Ю.Ф. Гортышов, И.А. Попов, В.В. Олимпиев и др. – Казань: Центр инновационных технологий, 2009. – 531 с.
5. Кикнадзе Г.И. Явление самоорганизации смерчеобразных струй в потоках сплошной среды и технологий на его основе: труды XVI школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А.И.Леонтьева [«Проблемы газодинамики в энергетических установках»], (Санкт-Петербург, 21-25 мая 2007 г.) / Г.И. Кикнадзе. – М.: Издательский дом МЭИ, 2007. – Т. 2. – С. 341-345.
6. Исаев С.А. Численное моделирование смерчевого теплообмена при обтекании поверхностей с лунками (состояние и перспективы) / С.А. Исаев, А.И. Леонтьев, Н.В. Корнев // VI Минский Межд. Форум по Теплообмену, ММФ 2008. – Минск, Беларусь. – 2008. – №1/25. – 11 с.
7. Халатов А.А. Теплообмен и гидродинамика около поверхностных углублений (лунок) / А.А. Халатов – К.: ИТТФ НАН Украины, 2005. – 76 с.
8. Воскобійник В.А. Статистичні характеристики вихрових систем у напівциліндричному заглибленні на обтічній поверхні / В.А. Воскобійник, А.В. Воскобійник // Гідроакустичний журнал. – 2006. – № 3. – С. 57-65.
9. Халатов А.А. Режимы течения в единичном углублении, имеющем форму сферического сегмента / А.А. Халатов, Г.В. Коваленко, В.И. Терехов// VI Минский Межд. Форум по Теплообмену, ММФ 2008. – Минск, 2008. – № 1/30. – С. 16.
10. Воскобойник А.В. Поле пульсаций пристеночного давления внутри и вблизи овальной лунки при малой скорости обтекания / А.В. Воскобойник// Вісник Донецького Університету, Сер. А: Природничі науки. – 2010. – Вип. 1. – С. 42-51.
11. Воскобійник А.В. Кінематика вихорового руху на обтічній поверхні з напівциліндричною канавкою / А.В. Воскобійник, В.А. Воскобійник // Акустичний вісник. – 2007. – Т. 10, № 3. – С. 30-41.
12. Афанасьев В.Р. Гидродинамика и теплообмен при обтекании одиночных углублений на исходно гладкой поверхности / В.Р. Афанасьев, В.Ю. Веселкин, А.И. Леонтьев и др. – Препр. МГТУ им. Н.Э. Баумана № 2-91. Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ, 1991. – 56 с.
13. Воскобойник А.А. Влияние поперечной канавки на поле скоростей над пластиной / А.А. Воскобойник, А.В. Воскобойник, В.А. Воскобойник // Вісник Донецького Університету, Сер. А: Природничі науки. – 2007. – Вип. 2. – С. 81-88.

Надійшла до редакції 07.06.2011 р.

УДК 539.3:534.1

НЕЛИНЕЙНОЕ АНГАРМОНИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОСЕСИММЕРИЧНОЙ ПРОДОЛЬНО-СДВИГОВОЙ ВОЛНЫ И ВОЛНЫ КРУЧЕНИЯ В ЗАКРЕПЛЕННОМ ЦИЛИНДРЕ

А. В. Елагин

Статья посвящена теоретическому численно-аналитическому исследованию нелинейных вторых гармоник, генерируемых при одновременном распространении осесимметричных нормальных упругих волн продольно-сдвигового и крутильного типа вдоль осевого направления в изотропном цилиндре кругового сечения с закрепленной боковой поверхностью. Для цилиндра из дюралюминия проведен анализ форм волновых движений в нелинейной волне, генерируемой в результате взаимодействия нормальных волн этого типа с варьируемыми относительными длинами.

Ключевые слова: цилиндрический волновод, физическая и геометрическая нелинейность, нормальные продольно-сдвиговые и крутильные волны, нелинейные ангармонические возмущения, нелинейное взаимодействие.

Введение. Исследование нелинейных эффектов при распространении волн деформаций в упругих средах является современной актуальной задачей динамики деформируемого твердого тела, представляющей интерес для фундаментальной науки и для целого ряда приложений в акустоэлектронике, ультразвуковой дефектоскопии, геоакустике. В частности результаты исследований эффектов нелинейного взаимодействия при распространении нескольких волн в деформируемых волноводах применяются при проектировании и расчетах конструктивных параметров различных компонентов акустоэлектронных устройств [1]. При наличии достаточно широкого круга публикаций по вопросам нелинейных ангармонических эффектов применительно к объемным упругим волнам, анализ нелинейных возмущений при распространении нормальных волн в волноводах пространственного геометрического строения реализован далеко не в полной мере. Так, для упругих анизотропных волноводов в виде монокристаллического слоя кубической системы анализ различных задач описания нелинейных вторых гармоник проведен в работах [2, 3]. В ряде работ в различных вариантах анализировалась проблема распространения нелинейных упругих волн в волноводах цилиндрической формы [4–8]. В пространственной постановке вопросы о нелинейных ангармонических эффектах при распространении волн вдоль изотропного упругого цилиндра рассматривались в работах [5, 6]. Эффекты нелинейного ангармонического взаимодействия двух одновременно распространяющихся осесимметричных нормальных продольно-сдвиговых волн с различными частотами и относительными длинами исследованы в [7]. Вопрос о нелинейном ангармоническом взаимодействии осесимметричной продольно-сдвиговой волны и волны кручения в закрепленном цилиндре в рамках пространственной модели на основе представления упругого потенциала Мурнагана и теории конечных деформаций, ранее не рассматривался. Качественному и количественному анализу данных эффектов и посвящена данная статья.

Постановка и основные соотношения задачи. Рассматривается протяженный изотропный упругий цилиндр с жестко закрепленной боковой поверхностью, который отнесен к системе нормированных цилиндрических координат и занимает область.

$$V=\left\{0\le r\le R,\,0\le\theta\le 2\pi,\,-\infty<z<\infty\right\}$$

В цилиндре, по предположению, одновременно распространяются две осесимметричные нормальные упругие волны с различными частотами и относительными длинами, первая из которых принадлежит спектру линейных осесимметричных нормальных продольно-сдвиговых волн (волн Похгаммера-Кри) в закрепленном по боковой поверхности изотропном цилиндре [9], а вторая – спектру линейных осесимметричных нормальных волн кручения в рассматриваемом цилиндре. Характеристиками поля указанных волн являются компоненты комплексного вектора динамических упругих перемещений $u_\alpha(r,\theta,z,t)$ $(\alpha=r,\theta,z)$. Исследованию подлежат нелинейные ангармонические эффекты, заключающиеся в генерировании вторых гармоник для суммарного поля указанных линейных волн.

Используемая в работе модель нелинейного динамического деформирования изотропных упругих сред с учетом эффектов геометрической и физической нелинейности основывается на тензорном представлении функции упругого потенциала U с квадратичными и кубическими членами по деформациям ε_{ij}, а коэффициенты этого представления выражаются через компоненты тензоров упругих постоянных второго и третьего порядка.

В качестве представления U рассматривается упругий потенциал Мурнагана [8] в форме

$$U=\frac{\lambda+2\mu}{2}E_1^2-2\mu E_2+\frac{l+2m}{3}E_1^3-2mE_1F_2+nE_3\,.$$

Здесь λ, μ – параметры Ламе линейной модели деформирования материала цилиндра; l, m, n – упругие постоянные третьего порядка соответствующей модели нелинейного деформирования; E_i $(i=1,2,3)$ – главные инварианты тензора деформаций Грина, которые связаны формулами

$$E_1 = I_1, \ \ E_2 = \frac{1}{2}\left(I_1^2 - I_2\right), \ \ E_3 = \frac{1}{6}\left(I_1^3 - 3I_1 I_2 + 2I_3\right)$$

с алгебраическими инвариантами

$$I_1 = E_{rr} + E_{\theta\theta} + E_{zz}, \quad I_2 = E_{\theta\theta}E_{zz} - E_{\theta z}E_{z\theta} + E_{zz}E_{rr} - E_{rz}E_{zr} + E_{rr}E_{\theta\theta} - E_{r\theta}E_{\theta r},$$
$$I_3 = E_{rr}E_{\theta\theta}E_{zz} - E_{rz}E_{\theta\theta}E_{zr}.$$

Для изотропного материала рассматриваемого цилиндрического волновода представления нормированных отнесенных к μ компонент второго тензора напряжений Пиола-Кирхгофа на основных площадках цилиндрической системы координат имеют вид

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(l)} + \sigma_{ij}^{(n)},$$

$$\sigma_{ij}^{(l)} = \frac{2\sigma}{1-2\sigma} I\delta_{ij} + 2\varepsilon_{ij},$$

$$\sigma_{ij}^{(n)} = \frac{1}{\mu}\left[lI_1^2 - (2m-n)I_2\right]\delta_{ij} + \frac{1}{\mu}(m-n)I_1\varepsilon_{ij} + \frac{n}{\mu}\varepsilon_{ik}\varepsilon_{kj} \quad (i,j=r,\theta,z).$$

Представления для компонент тензора напряжений Лагранжа (первого тензора напряжений Пиола-Кирхгофа) на основных площадках цилиндрической системы координат следуют из соотношения

$$\begin{bmatrix} S_{rr} & S_{r\theta} & S_{rz} \\ S_{\theta r} & S_{\theta\theta} & S_{\theta z} \\ S_{zr} & S_{z\theta} & S_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+\dfrac{\partial u_r}{\partial r} & \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u_r}{\partial \theta} - \dfrac{u_\theta}{r} & \dfrac{\partial u_r}{\partial z} \\ \dfrac{\partial u_\theta}{\partial r} & 1+\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \dfrac{u_r}{r} & \dfrac{\partial u_\theta}{\partial z} \\ \dfrac{\partial u_z}{\partial r} & \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u_z}{\partial \theta} & 1+\dfrac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{rr} & \sigma_{r\theta} & \sigma_{rz} \\ \sigma_{\theta r} & \sigma_{\theta\theta} & \sigma_{\theta z} \\ \sigma_{zr} & \sigma_{z\theta} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

и, соответственно, могут быть представлены в форме

$$S_{\alpha\beta} = S_{\alpha\beta}^{(l)} + S_{\alpha\beta}^{(n)} \qquad (\alpha, \beta = r, \theta, z).$$

Краевые условия жесткого закрепления боковой поверхности волновода имеют вид

$$(u_r)_{r=R} = (u_\theta)_{r=R} = (u_z)_{r=R} = 0.$$

Решение рассматриваемой задачи. В работе используется методика [2-8], основанная на представлении компонент вектора упругих волновых перемещений u_j в виде суммы линейных составляющих $u_j^{(l)}$ и соответствующих нелинейных ангармонических возмущений (вторых гармоник) $u_j^{(n)}$:

$$u_j = u_j^{(l)} + u_j^{(n)}, \ \ |u_j^{(n)}| \sim \delta |u_j^{(l)}|,$$

где малый параметр δ характеризует отношение амплитуды рассматриваемой упругой волны к ее длине. Характеристики $u_j^{(l)}$ определяются из линейных краевых задач о спектре нормальных волн, а функции волновых перемещений $u_j^{(n)}$ во вторых гармониках являются решениями неоднородных краевых задач, правые части которых выражаются через характеристики $u_j^{(l)}$. При этом [2 – 8] в случае, когда линейное волновое поле представлено суммой двух нормальных волн с различными частотами и относительными длинами, соответствующие ангармонические возмущения $u_j^{(n)}$ являются суммами трех слагаемых – вторых гармоник для каждой из входящих в сумму линейных нормальных волн и возникающей вследствие нелинейного ангармонического взаимодействия второй гармоники “комбинационного типа” в виде волны с частотой, равной сумме частот линейных волн.

В рассматриваемой задаче о вторых гармониках осесимметричных волн в суммарном поле двух волн – волны продольно-сдвигового и волны крутильного типа в рассматриваемом цилиндре, поле линейных волновых перемещений в продольно-сдвиговой осесимметричной нормальной волне имеет представление $u_r^{(l)} = u_r^{(0,l)}(r)e^{-i(w_1 t - k_1 z)}$, $u_z^{(l)} = u_z^{(0,l)}(r)e^{-i(w_1 t - k_1 z)}$, а поле осесимметричных линейных нормальных волн кручения – представление $u_\theta^{(l)}(r,z,t) = u_\theta^{(0,l)} e^{-i(w_2 t - k_2 z)}$. Решения линейных волновых уравнений относительно комплексных амплитудных функций $u_\theta^{(0,l)}$ и $u_r^{(0,l)}$, $u_z^{(0,l)}$, которые описывают первые гармоники нормальных осесимметричных волн кручения и нормальных продольно-сдвиговых волн в цилиндре, могут быть представлены в виде

$$u_\theta^{(0,l)} = AJ_1(\beta r);$$

$$u_r = -A_1 \alpha J_1(\alpha R) + A_2\, ik\alpha\beta J_1(\beta R) = 0, \quad u_z = A_1\, ik\, J_0(\alpha R) - A_2\, \beta J_0(\beta R) = 0, \qquad (1)$$

Здесь A, A_1, A_2 – произвольные амплитудные множители; J_n – цилиндрические функции Бесселя индекса n. Дисперсионные уравнения, которые описывают полные спектры линейных осесимметричных волн кручения и осесимметричных продольно-сдвиговых волн в закрепленном цилиндре соответственно имеют вид

$$\omega = \left(\left(\xi_p^2 \big/ R^2 + k^2 \right) v_s^2 \right)^{1/2},$$

$$k^2 J_0(\beta R) J_1(\alpha R) + \alpha\beta J_0(\alpha R) J_1(\beta R) = 0,\ \beta = (-k^2 + \Omega^2 / \zeta)^{1/2},\ \alpha = (-k^2 + \Omega^2)^{1/2},$$

где $\xi_p\ (p = \overline{1,\infty})$ – корни уравнения $J_1(\xi) = 0$.

Проведенными в данной работе исследованиями в результате подстановки представлений (1) в правые части краевой задачи относительно вторых гармоник установлено, что соответствующие гармоники комбинационного типа являются осесимметричными волнами кручения с характеристиками, определяемыми из неоднородной граничной задачи

$$\rho \frac{\partial^2 u_\theta^{(n)}}{\partial t^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r S_{\theta r}^{(l)}(u_\theta^{(n)})) - \frac{\partial S_{\theta z}^{(l)}(u_\theta^{(n)})}{\partial z} - \frac{S_{\theta r}^{(l)}(u_\theta^{(n)})}{r} =$$

$$= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r S_{\theta r}^{(n)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)}, u_\theta^{(l)})) + \frac{\partial S_{\theta z}^{(n)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)}, u_\theta^{(l)})}{\partial z} + \frac{S_{\theta r}^{(n)}(u_r^{(l)}, u_z^{(l)}, u_\theta^{(l)})}{r}, \qquad (2)$$

$$(u_\theta^{(n)})_{r=R} = 0.$$

Решение неоднородной граничной задачи (11) получено в виде:

$$u_\theta^{(0,n)} = BJ_1(2\beta r) + F_1(r), \quad F_1(r) = \sum_{p=1}^{\infty} a_p r^p,$$

где $F_1(r)$ является частным решением входящего в (2) неоднородного волнового уравнения. Коэффициенты a_p в представлении $F_1(r)$ рассчитываются на основе рекуррентных соотношений:

$$a_1 = \frac{\alpha_1}{\Delta_{13}^{(n)}},\ a_2 = \frac{\alpha_2 - b_1 \Delta_{14}^{(n)}}{\Delta_{12}^{(n)} + 2\Delta_{13}^{(n)} + 2\Delta_{15}^{(n)}},\ a_{p+2} = \frac{\alpha_{p+2} - \Delta_{11}^{(n)} a_p}{\Delta_{12}^{(n)} + \Delta_{13}^{(n)}(p+2) + \Delta_{14}^{(n)}(p+2)(p+1)} \quad (p = \overline{1,\infty}).$$

Удовлетворяя граничному условию краевой задачи (2), находим $B = -F_1(R) / J_1(2\beta R)$ и окончательно получаем представление для комплексной амплитудной функции второй гармоники комбинационного типа.

Результаты численных исследований. В ходе численных исследованиях проведен анализ распределений по радиальной координате для безразмерных нормированных амплитуд волновых смещений в комбинационных вторых гармониках, генерируемых при одновременном распространении осесимметричной волны кручения 1 из первой моды и осесимметричных волн продольно-сдвигового типа 2, 3 из второй моды соответствующего дисперсионного спектра, имеющих одинаковые амплитудные множители $u^{(0)}$. Расчеты ангармонических эффектов были проведены для волновода из дюралюминия со следующими физико-механическими параметрами: ρ=2,79·10^3 kg/m^3; $\sigma = 0,31$; $\mu = 2,6 \cdot 10^{10}\ Pa$; $\lambda = 2\sigma\mu/(1-2\sigma) = 4,2 \cdot 10^{10}\ Pa$; $l = -26,46 \cdot 10^{10}\ Pa$; $m = 38,22 \cdot 10^{10}\ Pa$; $n = 36,26 \cdot 10^{10}\ Pa$.

Фрагменты дисперсионных спектров, на которых точками отмечены взаимодействующие осесимметричные крутильная и продольно-сдвиговая волны, представлены на рис.1, 2 соответственно.

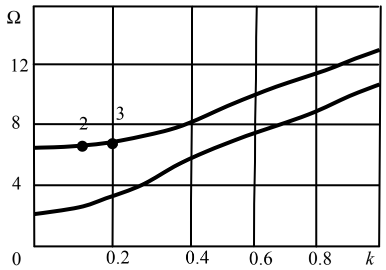


Рис. 1

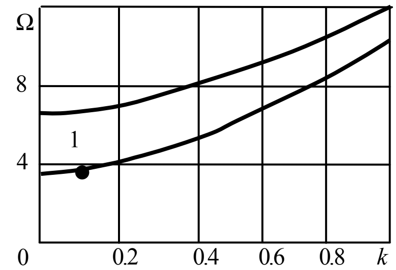
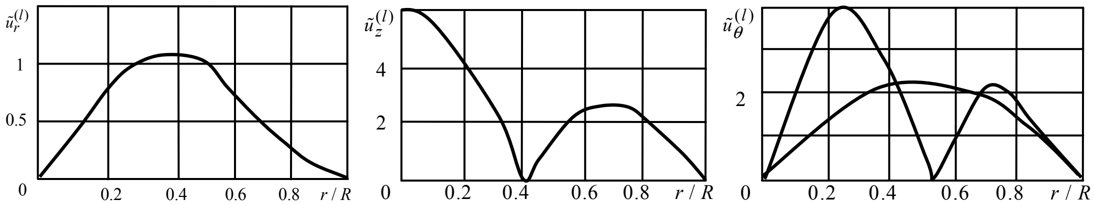
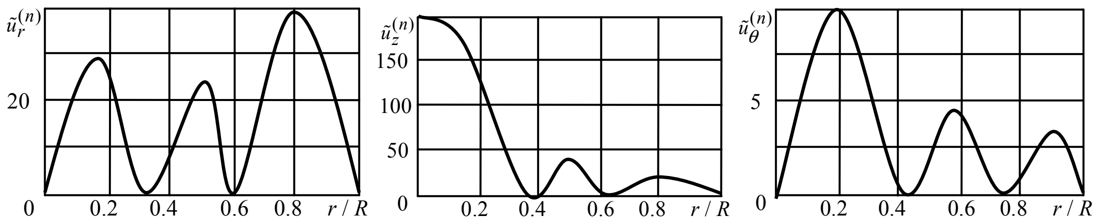


Рис. 2

Результаты расчетов, приведенных на рис. 3, 4, позволяют дать оценку уровней амплитуд в различных вторых гармониках монохроматического и комбинационного типа при взаимодействии крутильной волны 1 и продольно-сдвиговой волны

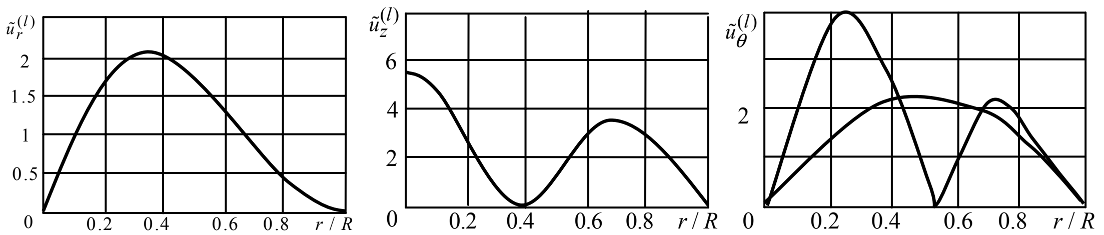


а) $\tilde{u}_r^{(l)} = |u_r^{(l)}|/u^{(0)}$ б) $\tilde{u}_z^{(l)} = |u_z^{(l)}|/u^{(0)}$ в) $\tilde{u}_\theta^{(l)} = |u_\theta^{(l)}|/u^{(0)}$

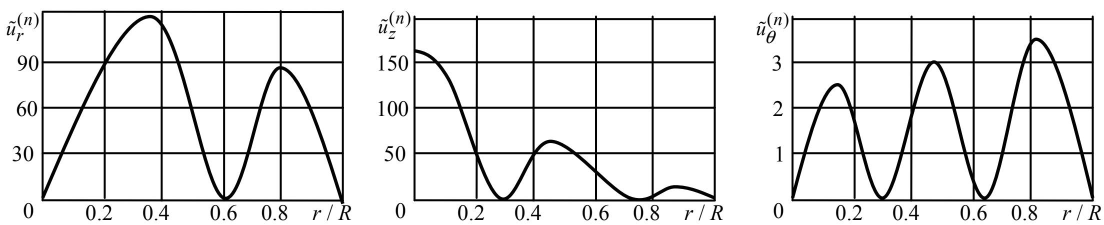


г) $\tilde{u}_r^{(n)} = |u_r^{(n)}|/(u^{(0)})^2$ д) $\tilde{u}_z^{(n)} = |u_z^{(n)}|/(u^{(0)})^2$ е) $\tilde{u}_\theta^{(n)} = |u_\theta^{(n)}|/(u^{(0)})^2$

Рис.3. Радиальные распределения относительных амплитуд в линейных нормальных волнах 1 и 2, второй гармонике волны 2 и комбинационной второй гармонике.



а) $\tilde{u}_r^{(l)} = |u_r^{(l)}|/u^{(0)}$ б) $\tilde{u}_z^{(l)} = |u_z^{(l)}|/u^{(0)}$ в) $\tilde{u}_\theta^{(l)} = |u_\theta^{(l)}|/u^{(0)}$



г) $\tilde{u}_r^{(n)} = |u_r^{(n)}|/(u^{(0)})^2$ д) $\tilde{u}_z^{(n)} = |u_z^{(n)}|/(u^{(0)})^2$ е) $\tilde{u}_\theta^{(n)} = |u_\theta^{(n)}|/(u^{(0)})^2$

Рис.4. Радиальные распределения относительных амплитуд в линейных нормальных волнах 1 и 3, второй гармонике волны 3 и комбинационной второй гармонике.

Приведенные результаты анализа кинематических характеристик линейных волн и их нелинейных вторых гармоник показывают, что в рассмотренных случаях мера нелинейного взаимодействия крутильной и продольно-сдвиговой нормальной волны является относительно невысокой. Так, максимум амплитуд нормированных волновых перемещений $\tilde{u}_\theta^{(n)}$ во второй гармонике комбинационного типа составляет порядка 4,76 % от максимума амплитуд нормированных перемещений во второй гармонике монохроматического типа для волны 2 и 2,15 % от максимума амплитуд нормированных перемещений во второй гармонике монохроматического типа для волны 3. Вместе с тем, характер радиальных распределений интенсивности амплитуд $\tilde{u}_{\theta}^{(n)}$ в рассматриваемых случаях отличается. Если для случая одновременного распространения волн 1 и 2 указанная интенсивность затухает при удалении от центра волновода к границе (рис. 3,е), то при синхронном распространении волн 1 и 3 тенденция в изменениях максимумов амплитуд нормированных волновых перемещений вдоль радиальной координаты качественно изменяется на нарастающую при увеличении радиальной координаты (рис. 4,е). Сопоставление рис. 3,е с рис. 3,а, 3,б, 3,в, а также рис.4,е с рис. 4,а, 4,б, 4,в позволяет констатировать уменьшение величины максимума нормированных волновых перемещений в комбинационной второй гармонике по отношению к максимуму нормированных волновых перемещений в линейных волнах в случаях одновременного распространения волн 1 и 2 в сравнении со случаем одновременного распространения волн 1 и 3.

Заключение. В результате проведенных исследований предложена методика теоретического анализа степени нелинейного ангармонического взаимодействия пары осесимметричных нормальных волн продольно-сдвигового и крутильного типа, синхронно распространяющихся вдоль изотропного упругого цилиндра с жестко закрепленной боковой поверхностью. Дана количественная оценка для уровней и характера радиальных распределений функции нормированных амплитуд волновых перемещений в нелинейных вторых гармониках комбинационного типа, генерируемых в следствие нелинейного взаимодействия линейных нормальных волн.

РЕЗЮМЕ

Стаття присвячена теоретичному чисельно-аналітичному дослідженню нелінійних других гармонік, що генеруються при одночасному поширенні осесиметричних нормальних пружних хвиль поздовжньо-зсувного типу і хвиль крутіння вздовж вісьового напрямку в ізотропному циліндрі кругового переризу із закріпленою бічною поверхнею. Для циліндра з дюралюмінію проведено аналіз форм хвильових рухів в нелінійній хвилі, що генерується в результаті взаємодії нормальних хвиль цього типу з варійованими відносними довжинами.

Ключові слова: циліндричний хвилевід, фізична та геометрична нелінійність, нормальні поздовжньо-зсувні і крутильні хвилі, нелінійні ангармонічних збурення, нелінійна взаємодія.

SUMMARY

This article is devoted to theoretical numerical and analytical study of nonlinear second harmonics generated at the same time spreading of axisymmetric normal longitudinal elastic waves and the torsional shear type along the axial direction in an isotropic cylinder of circular cross section with a fixed lateral surface. The forms of wave motion in nonlinear wave generated by the interaction of normal waves of this type of waves with variable relative lengths were analyzed for a cylinder made of duralumin.

Keywords: cylindrical waveguide, the physical and geometric nonlinearity, the normal longitudinal- shear and torsional waves, nonlinear anharmonic perturbation, the nonlinear interaction.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Речицкий В.И. Акустоэлектронные радиокомпоненты: схемы, типология, конструкции / В.И. Речицкий. – М.: Радио и связь, 1987. – 192 с.
2. Куренная К. И. Ангармонические эффекты при распространении нелинейных нормальных P-SV волн в анизотропном упругом слое / К. И. Куренная, В. И. Сторожев // Теорет. и прикл. механика. – 2002. – Вып. 36. – С. 116-124.
3. Kurennaya K. I., Analyses of nonlinear ultraacoustic wave properties in germanium monocrystal layer / K. I. Kurennaya, V. I. Storozhev // Journal of Computational and Applied Mechanics. – 2005. – Vol. 6, No 1. – P. 67-82.
4. Kurennaya K. I. Nonlinear acoustic effects while spreading of the normal waves in anisotropic elastic layer / K. I. Kurennaya , V. I. Storozhev // Proceedings of the Tenth International Congress on Sound and Vibration (Stockholm, Sweden, 7-10 July 2003). – Stockholm, IIAV, 2003. – P. 3605-3612.
5. Sugimoto N. Nonlinear mode coupling of elastic waves / N. Sugimoto , M. Hirao // J. Acoust. Sos. Am. – 1977. – Vol. 62, No 1. – P. 23-32.
6. Sugimoto N. Numerical investigation of nonlinear mode coupling of elastic waves / N. Sugimoto // J. Acoust. Sos. Am. – 1978. – Vol. 64, No 4. – P. 1190-1195.
7. Елагин А.В. Нелинейное ангармоническое взаимодействие двух осесимметричных продольно-сдвиговых волн в закрепленном цилиндре / А.В. Елагин, В.И. Сторожев // Проблеми обчислювальної механіки і міцності конструкцій. – 2011. – Вип. 16. – С. 266 -272.
8. Гузь А.Н. Устойчивость упругих тел при конечных деформациях / А.Н. Гузь. – К.: Наук. думка, 1973. – 271 с.
9. Комиссарова Г. Л. Дисперсия осесимметричных нормальных волн в упругом жесткозащемленном цилиндре / Г. Л. Комиссарова // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1981. – № 9. – С. 39-43.

Поступила в редакцию 23.09.2011 г.

УДК 539.3:534.1

НЕЛИНЕЙНОЕ АНГАРМОНИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН ЛЯВА В АНИЗОТРОПНОМ СЛОЕ НА АНИЗОТРОПНОМ ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ

Н. В. Жоголева, В. И. Сторожев
Институт прикладной математики и механики НАН Украины, г. Донецк

Получено численно-аналитическое решение задачи о нелинейном ангармоническом взаимодействии двух обобщенных поверхностных волн Лява в кристаллическом слое класса m3m кубической системы на упругой кристаллической подложке этого же класса анизотропии. Проведены численно-аналитические исследования характеристик взаимодействия для пары волн с двух низших вервей дисперсионного спектра волн Лява в слое из монокристала германия на полупространстве из монокристалла кремния.

Ключевые слова: слой монокристалла германия на кремниевой подложке, обобщенные поверхностные волны Лява, нелинейное взаимодействие, малые нелинейные ангармонические возмущения, численно-аналитическое определение вторых гармоник, расчеты амплитудно-частотных характеристик.

Введение. Задача исследования нелинейных ангармонических эффектов при распространении поверхностных упругих волн в течении длительного времени представляет фундаментальный и прикладной интерес как одна из актуальных проблем динамики деформируемого твердого тела. По достаточно широкому кругу аспектов она изучалась в работах [1 – 5]. Вместе с тем, при исследовании нелинейных ангармонических возмущений в монохроматических поверхностных сдвиговых волнах Лява учет фактора анизотропии упругого слоя и идеально контактирующего с ним упругого полупространства стал предметом анализа лишь в последние годы [6 – 7]. Вопрос же об исследовании эффектов нелинейного ангармонического взаимодействия для двух одновременно распространяющихся обобщенных поверхностных волн Лява в анизотропном слое на анизотропном полупространстве является открытой задачей и рассматривается в данной статье.

Используемый в работе подход ранее применялся при анализе нелинейных ангармонических возмущений для монохроматических обобщенных волн Лява в анизотропном слое на анизотропном полупространстве [6 – 9], а также при анализе нелинейных ангармонических возмущений для сдвиговых волн, локализованных в анизотропном слое между кристаллическими полупространствами [10].

Постановка задачи. Рассматривается составная волноводная структура, образуемая анизотропным кристаллическим слоем толщины $\tilde{h}$ из материала класса m3m кубической системы и идеально контактирующим с ним кристаллическим полупространством. В системе нормированных прямоугольных координат $Ox_1x_2x_3$ слой занимает область $V_1 = \{-\infty < x_1, x_2 < \infty, -h \le x_3 \le 0\}$, а полупространство-подложка область $V_2 = \{-\infty < x_1, x_2 < \infty, 0 < x_3 < \infty\}$. Анизотропный материал полупространства относится к тому же классу, что и материал слоя. Упруго-эквивалентные направления этих материалов являются коллинеарными и ориентированы вдоль координатных осей Ox_j. Физико-механические свойства компоненты V_p волновода характеризуются упругими постоянными второго порядка $\tilde{c}_{ij}^{(p)}$, третьего порядка $\tilde{c}_{ijk}^{(p)}$, а также плотностью $\tilde{\rho}_p$ $(i, j, k = \overline{1,6};\ p = \overline{1,2})$. Характеристиками динамического напряженно-деформированного состояния в составляющих V_p кусочно-однородного полупространства являются компоненты вектора динамических волновых перемещений $\tilde{u}_j^{(p)}$ и тензора динамических напряжений $\tilde{\sigma}_{ij}^{(p)}$. В качестве нормирующего параметра для координатных переменных $\tilde{x}_j$ взята величина R_*, а компоненты вектора волновых упругих перемещений $\tilde{u}_j^{(p)}$ при переходе к безразмерным нормированным характеристикам $u_j^{(p)}$ отнесены к амплитудному параметру $u_* = \max\limits_{\{x_1, x_2, x_3, t, j, p\}} \tilde{u}_j^{(p)}(x_1, x_2, x_3, t)$. В свою очередь, механические напряжения и упругие постоянные в составляющих V_p отнесены к нормирующему параметру c_*. Таким образом, $x_j = \tilde{x}_j R_*^{-1}$, $u_j = \tilde{u}_j u_*^{-1}$, $c_{ij}^{(p)} = \tilde{c}_{ij}^{(p)} / c_*$, $c_{ijk}^{(p)} = \tilde{c}_{ijk}^{(p)} / c_*$, а величина $\delta = u_* / R_*$ для упругих волн малой интенсивности при выборе $R_* = \tilde{h}$ является малым параметром. На границе $x_3 = -h$ составного волновода и в плоскости $x_3 = 0$ идеального контакта слоя V_1 с полупространством V_2 задаются граничные условия

$$(\sigma_{32}^{(1)})_{x_3=-h} = 0\,,\ (\sigma_{32}^{(1)})_{x_3=0} = (\sigma_{32}^{(2)})_{x_3=0}\,,\ (u_2^{(1)})_{x_3=0} = (u_2^{(2)})_{x_3=0}\,, \qquad (1)$$

а также условие локализации волновых движений $(u_2^{(2)})_{x_3\to\infty} \to 0$.

При анализе нелинейных ангармонических эффектов в случае одновременного распространения двух сдвиговых поверхностных упругих волн Лява вдоль координатного направления Ox_1 используется модель физически и геометрически нелинейного динамического деформирования упругого монокристаллического материала класса m3m кубической системы, базирующаяся на задании упругого потенциала $\tilde{U}^{(p)}$ для компонентов волновода V_p в виде:

$$\begin{aligned}\tilde{U}^{(p)} = \{ & [\frac{1}{2}c_{11}^{(p)}\sum_{k=1}^{3}u_{k,k}^2 + \frac{1}{2}c_{44}^{(p)}\sum_{k,l=1,\ k\neq l}^{3}u_{k,l}^2 + c_{44}^{(p)}\sum_{k,l=1,\ k<l}^{3}u_{k,l}u_{l,k} + c_{12}^{(p)}\sum_{k,l=1,\ k<l}^{3}u_{k,k}u_{l,l}]\delta^2 + \\ & +[\frac{1}{6}\Delta_1^{(p)}\sum_{k=1}^{3}u_{k,k}^3 + \sum_{k,l,m=1,\ k\neq l,m,\ l\neq m}^{3}u_{k,l}u_{k,m}u_{m,l} + \frac{1}{2}\Delta_2^{(p)}\sum_{k,l=1,\ k\neq l}^{3}u_{k,k}u_{k,l}^2 + \frac{1}{2}\Delta_3^{(p)}\sum_{k,l=1,\ k\neq l}^{3}u_{k,k}u_{l,k}^2 + \\ & +\frac{1}{2}\Delta_5^{(p)}\sum_{k,l=1,\ k\neq l}^{3}u_{k,k}u_{l,l}^2 + \frac{1}{2}\Delta_7^{(p)}\sum_{k,l,m=1,\ k\neq l,m,\ l\neq m}^{3}u_{k,k}u_{l,m}^2 + +c_{144}^{(p)}\sum_{k,l,m=1,\ k\neq l,m,\ l<m}^{3}u_{k,k}u_{l,m}u_{m,l} + \\ & +\Delta_4^{(p)}\sum_{k,l=1,\ k<l}^{3}u_{k,k}u_{k,l}u_{l,k} + \Delta_6^{(p)}\sum_{\substack{k,l,m=1,\ k\neq l,\\ m,\ l<m}}^{3}u_{k,l}u_{k,m}\left(u_{l,m}+u_{m,l}\right) + c_{456}^{(p)}\sum_{l,m=2,\ l\neq m}^{3}u_{1,l}u_{l,m}u_{m,1}]\delta^3\}c_*,\end{aligned} \qquad (2)$$

а также на представлениях конечных деформаций, имеющих в тензорной форме записи вид

$$\varepsilon_{jk} = 1/2([u_{j,k} + u_{k,j}]\delta + [u_{l,j}u_{l,k}]\delta^2)\,. \qquad (3)$$

В выражениях (2), (3), записываемых для составляющей V_p, полагается

$$u_j = u_j^{(p)};\ \ \Delta_1^{(p)} = 3c_{11}^{(p)} + c_{111}^{(p)};\ \ \Delta_2^{(p)} = c_{12}^{(p)} + 2c_{44}^{(p)} + c_{155}^{(p)};\qquad \Delta_3^{(p)} = c_{11}^{(p)} + c_{155}^{(p)};\ \ \Delta_4^{(p)} = c_{44}^{(p)} + c_{155}^{(p)};$$

$$\Delta_5^{(p)} = c_{12}^{(p)} + c_{112}^{(p)};\ \ \Delta_6^{(p)} = c_{44}^{(p)} + c_{456}^{(p)};\ \Delta_7^{(p)} = c_{12}^{(p)} + c_{144}^{(p)};\ \ u_{j,k} = \partial u_j / \partial x_k\,.$$

Нормированные комплексные характеристики для элементов тензора напряжений при выборе $\tilde{U}^{(p)}$ в виде (2) имеют вид

$$\sigma_{ij}^{(p)} = \partial\tilde{U}^{(p)} / \partial u_{i,j}^{(p)} = [\sigma_{ij}^{(p,l)}]\delta + [\sigma_{ij}^{(p,n)}]\delta^2, \qquad (4)$$

где

$$\sigma_{jj}^{(p,l)} = c_{11}^{(p)}u_{j,j}^{(p)} + c_{12}^{(p)}(u_{l,l}^{(p)} + u_{k,k}^{(p)})\ \left(j=\overline{1,3}\right),\ \sigma_{rj}^{(p,l)} = c_{44}^{(p)}\left(u_{r,j}^{(p)} + u_{j,r}^{(p)}\right)\left(r, j=\overline{1,3},\quad r\neq j\right); \qquad (5)$$

$$\begin{aligned}\sigma_{jj}^{(p,n)} = {} & \frac{1}{2}\Delta_1^{(p)}(u_{j,j}^{(p)})^2 + \frac{1}{2}\Delta_2^{(p)}\left((u_{j,l}^{(p)})^2 + (u_{j,k}^{(p)})^2\right) + \frac{1}{2}\Delta_3^{(p)}\left((u_{l,j}^{(p)})^2 + (u_{k,j}^{(p)})^2\right) + \\ & +\Delta_4^{(p)}(u_{j,l}^{(p)}u_{l,j}^{(p)} + u_{j,k}^{(p)}u_{k,j}^{(p)}) + \frac{1}{2}\Delta_5^{(p)}\left(2u_{j,j}^{(p)}u_{l,l}^{(p)} + u_{j,j}^{(p)}u_{k,k}^{(p)} + (u_{l,l}^{(p)})^2 + (u_{k,k}^{(p)})^2\right) + \\ & +\frac{1}{2}\Delta_7^{(p)}\left((u_{l,k}^{(p)})^2 + (u_{k,l}^{(p)})^2\right) + c_{144}^{(p)}u_{l,k}^{(p)}u_{k,l}^{(p)} + c_{123}^{(p)}u_{l,l}^{(p)}u_{k,k}^{(p)}\ \left(j=\overline{1,3}\right),\end{aligned} \qquad (6)$$

$$\begin{aligned}\sigma_{rj}^{(p,n)} = {} & \Delta_2^{(p)}u_{r,r}^{(p)}u_{r,j}^{(p)} + \Delta_3^{(p)}u_{j,j}^{(p)}u_{r,j}^{(p)} + \Delta_4^{(p)}\left(u_{r,r}^{(p)}u_{j,r}^{(p)} + u_{j,j}^{(p)}u_{j,r}^{(p)}\right) + \Delta_6^{(p)}(u_{r,m}^{(p)}u_{m,j}^{(p)} + u_{m,r}^{(p)}u_{m,j}^{(p)} + \\ & +u_{r,m}^{(p)}u_{j,m}^{(p)}) + \Delta_7^{(p)}u_{r,j}^{(p)}u_{m,m}^{(p)} + c_{144}^{(p)}u_{r,j}^{(p)}u_{m,m}^{(p)} + c_{456}^{(p)}u_{j,m}u_{m,r}\ \left(r, j=\overline{1,3},\quad r\neq j\right);\end{aligned}$$

$$l = \begin{cases}1, & j=2,3;\\ 2, & j=1;\end{cases}\qquad k = \begin{cases}2, & j=3;\\ 3, & j=1,\ 2;\end{cases}\qquad m = \begin{cases}1, & (r,j)=(2,3),(3,2);\\ 2, & (r,j)=(1,3),(3,1);\\ 3, & (r,j)=(1,2),(2,1).\end{cases}$$

Численно-аналитическое решение задачи. Используемый в работе подход основывается на концепции определения характеристик нелинейного волнового поля как первых двух членов в представлениях вектор-функций напряженности волны в компоненте V_p рядом по степеням малого параметра δ:

$$u_j^{(p)} = u_j^{(p,l)} + \delta u_j^{(p,n)} \left(j = \overline{1,3} \right), \tag{7}$$

где в рассматриваемом случае

$$u_2^{(p,l)} = u_2^{(p,l,1)} + u_2^{(p,l,2)}, \; u_1^{(p,l)} \equiv u_3^{(p,l)} \equiv 0 .$$

При подстановке представления (7) в уравнения движения

$$\sigma_{ij,j}^{(p)} - \delta(\rho_p R_*^2 / c_*) \ddot{u}_i^{(p)} = 0$$

и краевые условия (1), а также при последующем выделении членов одного порядка малости по параметру δ, возникает двухэтапная задача определения составляющих в представлении (7).

На первом этапе строится решение задач о распространении двух линейных волн Лява различной частоты, то есть рассматриваются однородные спектральные задачи для нормированных комплексных функций напряженности $u_2^{(p,l,m)}$ $(m = 1,2)$ двух линейных волн Лява в рассматриваемой структуре:

$$\sigma_{2j,j}^{(p,l,m)} - (\rho_p R_*^2 / c_*) \ddot{u}_2^{(p,l,m)} = 0, \tag{8}$$

$$(\sigma_{32}^{(1,l,m)})_{x_3=-h} = 0, \; (\sigma_{32}^{(1,l,m)})_{x_3=0} = (\sigma_{32}^{(2,l,m)})_{x_3=0}, \; (u_2^{(1,l,m)})_{x_3=0} = (u_2^{(2,l,m)})_{x_3=0}$$
$$(p = 1,2; \; m = 1,2) . \tag{9}$$

На втором этапе при определении характеристик нелинейных вторых гармоник строится решение неоднородной краевой задачи с правой частью, выражаемой через сумму характеристик линейных волн, то есть неоднородной краевой задачи определения компонент $u_j^{(p,n)}$ нормированной вектор-функции напряженности для соответствующих нелинейных ангармонических возмущений (вторых гармоник для суммы волн Лява):

$$(\sigma_{ij,j}^{(p,l)})_{u_j^{(p)} = u_j^{(p,n)}} - (\rho_p R_*^2 / c_*) \ddot{u}_i^{(p,n)} = -(\sigma_{ij,j}^{(p,n)})_{u_j^{(p)} = u_j^{(p,l,1)} + u_j^{(p,l,2)}} ; \tag{10}$$

$$\left[(\sigma_{3i}^{(1,l)})_{u_j^{(1)} = u_j^{(1,n)}} + (\sigma_{3i}^{(1,n)})_{u_j^{(1)} = u_j^{(1,l,1)} + u_j^{(1,l,2)}} \right]_{x_3=-h} = 0,$$

$$\left[(\sigma_{3i}^{(1,l)})_{u_j^{(1)} = u_j^{(1,n)}} + (\sigma_{3i}^{(1,n)})_{u_j^{(1)} = u_j^{(1,l,1)} + u_j^{(1,l,2)}} \right]_{x_3=0} = \left[(\sigma_{3i}^{(2,l)})_{u_j^{(2)} = u_j^{(2,n)}} + (\sigma_{3i}^{(2,n)})_{u_j^{(2)} = u_j^{(2,l,1)} + u_j^{(2,l,2)}} \right]_{x_3=0},$$
$$\left[u_j^{(2,n)} \right]_{x_3=0} = \left[u_j^{(1,n)} \right]_{x_3=0} \left(i, j = \overline{1,3} \right). \tag{11}$$

Из спектральных задач (8), (9) находятся представления для нормированных комплексных функций напряженности двух линейных волн Лява $\vec{u}_2^{(p,l,m)}$ с безразмерными амплитудными параметрами $u_{2m}^{(0)}$ и круговыми частотами ω_m $(\omega_1 \neq \omega_2)$, принадлежащих одной или различным действительным модам дисперсионного спектра поверхностных волн Лява в рассматриваемой волноводной структуре:

$$u_{2m}^{(1,l)} = u_{2m}^{(0)} (\cos(\alpha_m^{(1)} x_3) + i c_{44}^{(2)} \alpha_m^{(2)} \sin(\alpha_m^{(1)} x_3) / (c_{44}^{(1)} \alpha_m^{(1)})) E_1, \; x_3 \in [-h; 0] ;$$
$$u_{2m}^{(2,l)} = u_{2m}^{(0)} e^{i \alpha_m^{(2)} x_3} E_1, \;\; x_3 \in [0; \infty) ; \tag{12}$$

$$\alpha_m^{(p)} = ((-c_{44}^{(p)} k_m^2 + \Omega_{pm}^2) \big/ c_{44}^{(p)})^{\frac{1}{2}}, \;\; \Omega_{pm} = \left(\rho_p \omega_m^2 R_*^2 / c_* \right)^{1/2}, \;\; E_1 = e^{-i(\omega_m t - k_m x_1)} \left(m = \overline{1,2} \right). \tag{13}$$

Соответственно соотношения неоднородной граничной задачи для определения компонент нормированного комплексного вектора напряженности ангармонического возмущения для суммы двух волн Лява в составляющих V_p рассматриваемой кусочно-однородной волноводной структуры имеют вид:

$$(\rho_p R_*^2 / c_*) \ddot{u}_1^{(p,n)} - c_{11}^{(p)} u_{1,11}^{(p,n)} - c_{44}^{(p)} u_{1,33}^{(p,n)} - \Delta_8^{(p)} u_{3,31}^{(p,n)} = [\Delta_3^{(p)} u_{2,1}^{(p,l,1)} u_{2,11}^{(p,l,1)} +$$

$$+\Delta_6^{(p)} u_{2,1}^{(p,l,1)} u_{2,33}^{(p,l,1)} + \left(\Delta_6^{(p)} + \Delta_7^{(p)}\right) u_{2,3}^{(p,l,1)} u_{2,31}^{(p,l,1)}] + [\Delta_3^{(p)} u_{2,1}^{(p,l,2)} u_{2,11}^{(p,l,2)} +$$

$$+\Delta_6^{(p)} u_{2,1}^{(p,l,2)} u_{2,33}^{(p,l,2)} + \left(\Delta_6^{(p)} + \Delta_7^{(p)}\right) u_{2,3}^{(p,l,2)} u_{2,31}^{(p,l,2)}] + [\Delta_3^{(p)} (u_{2,1}^{(p,l,1)} u_{2,11}^{(p,l,2)} + u_{2,1}^{(p,l,2)} u_{2,11}^{(p,l,1)}) +$$

$$+\Delta_6^{(p)} (u_{2,33}^{(p,l,1)} u_{2,1}^{(p,l,2)} + u_{2,33}^{(p,l,2)} u_{2,1}^{(p,l,1)}) + (\Delta_6^{(p)} + \Delta_7^{(p)})(u_{2,3}^{(p,l,1)} u_{2,13}^{(p,l,2)} + u_{2,3}^{(p,l,2)} u_{2,13}^{(p,l,1)})],$$

$$(\rho_p R_*^2 / c_*)\ddot{u}_2^{(p,n)} - c_{44}^{(p)} u_{2,11}^{(p,n)} - c_{44}^{(p)} u_{2,33}^{(p,n)} = 0,$$

$$(\rho_p R_*^2 / c_*)\ddot{u}_3^{(p,n)} - c_{11}^{(p)} u_{3,33}^{(p,n)} - c_{44}^{(p)} u_{3,11}^{(p,n)} - \Delta_8^{(p)} u_{1,13}^{(p,n)} = [\Delta_3^{(p)} u_{2,3}^{(p,l,1)} u_{2,33}^{(p,l,1)} + \qquad (14)$$

$$+\Delta_6^{(p)} u_{2,3}^{(p,l,1)} u_{2,11}^{(p,l,1)} + \left(\Delta_6^{(p)} + \Delta_7^{(p)}\right) u_{2,1}^{(p,l,1)} u_{2,13}^{(p,l,1)}] + [\Delta_3^{(p)} u_{2,3}^{(p,l,2)} u_{2,33}^{(p,l,2)} + \Delta_6^{(p)} u_{2,3}^{(p,l,2)} u_{2,11}^{(p,l,2)} +$$

$$+\left(\Delta_6^{(p)} + \Delta_7^{(p)}\right) u_{2,1}^{(p,l,2)} u_{2,13}^{(p,l,2)}] + [\Delta_3^{(p)} (u_{2,3}^{(p,l,1)} u_{2,33}^{(p,l,2)} + u_{2,3}^{(p,l,2)} u_{2,33}^{(p,l,1)}) +$$

$$+\Delta_6^{(p)} (u_{2,3}^{(p,l,1)} u_{2,11}^{(p,l,2)} + u_{2,3}^{(p,l,2)} u_{2,11}^{(p,l,1)}) + \left(\Delta_6^{(p)} + \Delta_7^{(p)}\right) (u_{2,1}^{(p,l,1)} u_{2,13}^{(p,l,2)} + u_{2,1}^{(p,l,2)} u_{2,13}^{(p,l,1)})];$$

$$c_{44}^{(1)} \left(u_{1,3}^{(1,n)} + u_{3,1}^{(1,n)} \right)_{x_3=-h} = -\Delta_6^{(1)} (\left(u_{2,1}^{(1,l,1)} u_{2,3}^{(1,l,1)} \right) + \left(u_{2,1}^{(1,l,2)} u_{2,3}^{(1,l,2)} \right) +$$

$$+\left(u_{2,1}^{(1,l,1)} u_{2,3}^{(1,l,2)} + u_{2,1}^{(1,l,2)} u_{2,3}^{(1,l,1)} \right))_{x_3=-h},$$

$$\left(c_{12}^{(1)} u_{1,1}^{(1,n)} + c_{11}^{(1)} u_{3,3}^{(1,n)} \right)_{x_3=-h} = -[(\frac{1}{2}\Delta_7^{(1)} \left(u_{2,1}^{(1,l,1)} \right)^2 + \frac{1}{2}\Delta_3^{(1)} \left(u_{2,3}^{(1,l,1)} \right)^2) +$$

$$+(\frac{1}{2}\Delta_7^{(1)} \left(u_{2,1}^{(1,l,2)} \right)^2 + \frac{1}{2}\Delta_3^{(1)} \left(u_{2,3}^{(1,l,2)} \right)^2) + (\Delta_7^{(1)} u_{2,1}^{(1,l,1)} u_{2,1}^{(1,l,2)} + \Delta_3^{(1)} u_{2,3}^{(1,l,1)} u_{2,3}^{(1,l,2)})]_{x_3=-h}, \qquad (15)$$

$$c_{44}^{(1)} \left(u_{1,3}^{(1,n)} + u_{3,1}^{(1,n)} \right)_{x_3=0} - c_{44}^{(2)} \left(u_{1,3}^{(2,n)} + u_{3,1}^{(2,n)} \right)_{x_3=0} = \Delta_6^{(2)} [\left(u_{2,1}^{(2,l,1)} u_{2,3}^{(2,l,1)} \right) +$$

$$+\left(u_{2,1}^{(2,l,2)} u_{2,3}^{(2,l,2)} \right) + \left(u_{2,1}^{(2,l,1)} u_{2,3}^{(2,l,2)} + u_{2,1}^{(2,l,2)} u_{2,3}^{(2,l,1)} \right)]_{x_3=0} - \Delta_6^{(1)} [\left(u_{2,1}^{(1,l,1)} u_{2,3}^{(1,l,1)} \right) +$$

$$+\left(u_{2,1}^{(1,l,2)} u_{2,3}^{(1,l,2)} \right) + \left(u_{2,1}^{(1,l,1)} u_{2,3}^{(1,l,2)} + u_{2,1}^{(1,l,2)} u_{2,3}^{(1,l,1)} \right)]_{x_3=0},$$

$$\left(c_{12}^{(1)} u_{1,1}^{(1,n)} + c_{11}^{(1)} u_{3,3}^{(1,n)} \right)_{x_3=0} - \left(c_{12}^{(2)} u_{1,1}^{(2,n)} + c_{11}^{(2)} u_{3,3}^{(2,n)} \right)_{x_3=0} = [(\frac{1}{2}\Delta_7^{(2)} \left(u_{2,1}^{(2,l,1)} \right)^2 +$$

$$+\frac{1}{2}\Delta_3^{(2)} \left(u_{2,3}^{(2,l,1)} \right)^2) + (\frac{1}{2}\Delta_7^{(2)} \left(u_{2,1}^{(2,l,2)} \right)^2 + \frac{1}{2}\Delta_3^{(2)} \left(u_{2,3}^{(2,l,2)} \right)^2) + (\Delta_7^{(2)} u_{2,1}^{(2,l,1)} u_{2,1}^{(2,l,2)} +$$

$$+\Delta_3^{(2)} u_{2,3}^{(2,l,1)} u_{2,3}^{(2,l,2)})]_{x_3=0} - [(\frac{1}{2}\Delta_7^{(1)} \left(u_{2,1}^{(1,l,1)} \right)^2 + \frac{1}{2}\Delta_3^{(1)} \left(u_{2,3}^{(1,l,1)} \right)^2) + (\frac{1}{2}\Delta_7^{(1)} \left(u_{2,1}^{(1,l,2)} \right)^2 +$$

$$+\frac{1}{2}\Delta_3^{(1)} \left(u_{2,3}^{(1,l,2)} \right)^2) + (\Delta_7^{(1)} u_{2,1}^{(1,l,1)} u_{2,1}^{(1,l,2)} + \Delta_3^{(1)} u_{2,3}^{(1,l,1)} u_{2,3}^{(1,l,2)})]_{x_3=0},$$

$$\left(u_j^{(1,n)} \right)_{x_3=0} - \left(u_j^{(2,n)} \right)_{x_3=0} = 0 \ (j = \overline{1,3}), \quad \Delta_8^{(p)} = c_{12}^{(p)} + c_{44}^{(p)}.$$

Структура соотношений (14), (15) показывает, что вторыми гармониками для поля, образуемого суммой двух поверхностных линейных волн Лява, являются упругие волны P-SV типа. Решение неоднородной задачи (14), (15), определяющее вид ангармонического возмущения для суммы двух линейных поверхностных SH-волн с разными частотами и длинами, в данном случае включает составляющие, отвечающие вторым гармоникам с частотами $2\omega_m$ $(m = \overline{1,2})$ для каждой из одновременно распространяющихся волн Лява круговой частоты ω_m, рассматриваемых как отдельно взятые монохроматические волны, и составляющую "комбинационного" типа в виде волны с частотой $\omega_1 + \omega_2$.

Компоненты $u_j^{(p,n,m)}$ $(m = 1,2;\ j = 1;3)$ комплексного вектора напряженности вторых гармоник монохроматических волн с частотами $2\omega_m$ $\left(m = \overline{1,2}\right)$ определяются из соотношений краевой задачи (14), (15) в аналитической форме методами компьютерной алгебры. При условии, что вторая гармоника в виде упругой волны P-SV типа с частотой $2\omega_m$ и волновым числом $2k_m$ не принадлежит дисперсионному спектру обобщенных поверхностных волн релеевского типа в рассматриваемом волноводе, представления для $u_j^{(p,n,m)}$ имеют структуру:

$$\begin{aligned}
u_{1m}^{(1,n)} &= (\lambda_{11m}\cos(\varsigma_{1m}^{(1)}x_3) + \lambda_{12m}\cos(\varsigma_{2m}^{(1)}x_3) + \mu_{11m}\sin(\varsigma_{1m}^{(1)}x_3) + \mu_{12m}\sin(\varsigma_{2m}^{(1)}x_3) + \\
&\quad + A_{11m1} + A_{11m2}\cos(2\alpha_m^{(1)}x_3) + A_{11m3}\sin(2\alpha_m^{(1)}x_3))E_2; \\
u_{3m}^{(1,n)} &= (\lambda_{31m}\sin(\varsigma_{1m}^{(1)}x_3) + \lambda_{32m}\sin(\varsigma_{2m}^{(1)}x_3) + \mu_{31m}\cos(\varsigma_{1m}^{(1)}x_3) + \mu_{32m}\cos(\varsigma_{2m}^{(1)}x_3) + \\
&\quad + A_{31m1} + A_{31m2}\sin(2\alpha_m^{(1)}x_3) + A_{31m3}\cos(2\alpha_m^{(1)}x_3))E_2; \\
u_{1m}^{(2,n)} &= \left(\beta_{11m}\exp(\varsigma_{1m}^{(2)}x_3) + \beta_{12m}\exp(\varsigma_{2m}^{(2)}x_3) + A_{12m1}\exp(2i\alpha_m^{(2)}x_3)\right)E_2; \\
u_{3m}^{(2,n)} &= \left(\beta_{31m}\exp(\varsigma_{1m}^{(2)}x_3) + \beta_{32m}\exp(\varsigma_{2m}^{(2)}x_3) + A_{32m1}\exp(2i\alpha_m^{(2)}x_3)\right)E_2.
\end{aligned} \tag{16}$$

Здесь $E_2(t,x_1,\omega_m,k_m) = \exp(-2i(\omega_m t - k_m x_1))$; A_{jlmq} – коэффициенты в слагаемых, соответствующих частному решению системы дифференциальных уравнений (13); λ_{jlm}, μ_{jlm}, β_{jlm} – коэффициенты в слагаемых, описывающих общее решение для соответствующей (12) однородной системы дифференциальных уравнений; $\varsigma_{jm}^{(p)}$ – корни характеристических полиномов для соответствующих (12) однородных систем обыкновенных дифференциальных уравнений в случае распространения монохроматических продольно-сдвиговых волн частоты $2\omega_m$.

Компоненты комплексного вектора напряженности $u_{j+}^{(p,n)}$ $(j=1;3)$ второй гармоники "комбинационного" типа с частотой $\omega_1+\omega_2$ также определяется из соотношений (12),(13) в аналитической форме методами компьютерной алгебры. При условии, что ангармоническое возмущение в виде упругой волны P-SV типа с частотой $\omega_1+\omega_2$ и волновым числом k_1+k_2 не принадлежит дисперсионному спектру обобщенных поверхностных волн релеевского типа в рассматриваемом волноводе, представления для $u_{j+}^{(p,n)}$ имеют структуру:

$$\begin{aligned}
u_{1+}^{(1,n)} &= (\lambda_{11+}\cos(\varsigma_{1+}^{(1)}x_3) + \lambda_{12+}\cos(\varsigma_{2+}^{(1)}x_3) + \mu_{11+}\sin(\varsigma_{1+}^{(1)}x_3) + \mu_{12+}\sin(\varsigma_{2+}^{(1)}x_3) + \\
&\quad + A_{1131}\cos((\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)})x_3) + A_{1132}\sin((\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)})x_3) + A_{1133}\cos((\alpha_1^{(1)}-\alpha_2^{(1)})x_3) + \\
&\quad A_{1134}\sin((\alpha_1^{(1)}-\alpha_2^{(1)})x_3))E_{12}; \\
u_{3+}^{(1,n)} &= (\lambda_{31+}\sin(\varsigma_{1+}^{(1)}x_3) + \lambda_{32+}\sin(\varsigma_{2+}^{(1)}x_3) + \mu_{31+}\cos(\varsigma_{1+}^{(1)}x_3) + \mu_{32+}\cos(\varsigma_{2+}^{(1)}x_3) + \\
&\quad + A_{3131}\sin((\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)})x_3) + A_{3132}\cos((\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)})x_3) + A_{3133}\sin((\alpha_1^{(1)}-\alpha_2^{(1)})x_3) + \\
&\quad A_{3134}\cos((\alpha_1^{(1)}-\alpha_2^{(1)})x_3))E_{12}; \\
u_{1+}^{(2,n)} &= \left(\beta_{11+}\exp(\varsigma_{1+}^{(2)}x_3) + \beta_{12+}\exp(\varsigma_{2+}^{(2)}x_3) + A_{1231}\exp(2i(\alpha_1^{(2)}+\alpha_2^{(2)})x_3)\right)E_{12}; \\
u_{3+}^{(2,n)} &= \left(\beta_{31+}\exp(\varsigma_{1+}^{(2)}x_3) + \beta_{32+}\exp(\varsigma_{2+}^{(2)}x_3) + A_{3231}\exp(2i(\alpha_1^{(2)}+\alpha_2^{(2)})x_3)\right)E_{12}.
\end{aligned} \tag{17}$$

где $E_{12}(t,x_1,\omega_m,k_m) = \exp(-i((\omega_1 t+\omega_2 t)-(k_1x_1+k_2x_1)))$. Для коэффициентов A_{jlmq}, λ_{jlm}, μ_{jlm}, β_{jlm} и корней $\varsigma_{j+}^{(p)}$ характеристических полиномов для соответствующих (12) однородных систем обыкновенных дифференциальных уравнений в выражениях (16) и (17) в случае распространения продольно-сдвиговых волн частоты $\omega_1+\omega_2$ также получены развернутые аналитические представления. Построенные решения позволяют провести численное исследование ряда характеристик, описывающих меру нелинейного взаимодействия обобщенных поверхностных волн Лява. При этом оценке, прежде всего, подлежат характеристики второй гармоники комбинационного типа, генерируемой именно вследствие нелинейного взаимодействия двух рассматриваемых поверхностных волн.

Результаты численных исследований. Численные исследования кинематических характеристик нелинейных вторых гармоник комбинационного типа реализованы применительно к волноводу в виде слоя V_1 из монокристалла германия, идеально контактирующего по нижней грани с полупространством

V_2 из монокристалла кремния. Компоненты волновода характеризуются такими наборами независимых физико-механических постоянных [11]:

$$\rho_1 = 5.32\rho_* ;\ c_{11}^{(1)} = 12,92c_*; c_{12}^{(1)} = 4,79c_*; c_{44}^{(1)} = 6,70c_* ,$$

$$c_{111}^{(1)} = -71,00c_*; c_{112}^{(1)} = -38,90c_*; c_{123}^{(1)} = -1,80c_*; c_{144}^{(1)} = -2,30c_*; c_{456}^{(1)} = -5,30c_*; c_{155}^{(1)} = -29,20c_*;$$

$$\rho_2 = 2.33\rho_* ;\ c_{11}^{(2)} = 16,70c_*; c_{12}^{(2)} = 7,90c_*; c_{44}^{(2)} = 6,50c_*;$$

$$c_{111}^{(2)} = -82,50c_*; c_{112}^{(2)} = -45,10c_*; c_{123}^{(2)} = -6,40c_*; c_{144}^{(2)} = 1,20c_*; c_{456}^{(2)} = -6,40c_*; c_{155}^{(2)} = -31,00c_*;$$

$$c_* = 10^{10}\ Pa ,\ \rho_* = 10^3\ kg / m^3 .$$

Результаты расчетов частотных распределений для величин безразмерных нормированных амплитудных характеристик $\left|u_{1+}^{(n)}\right| / u_0{}^2$ и $\left|u_{3+}^{(n)}\right| / u_0{}^2$ комбинационных вторых гармоник в плоскости контакта слоя и полупространства в предположении $u_{21}^{(0)} = u_{22}^{(0)} = u^{(0)}$ представлены на рис. 1 – 4 в виде тонированных изображений, на которых увеличению значений исследуемых характеристик соответствует переход от темных тонов к светлым.

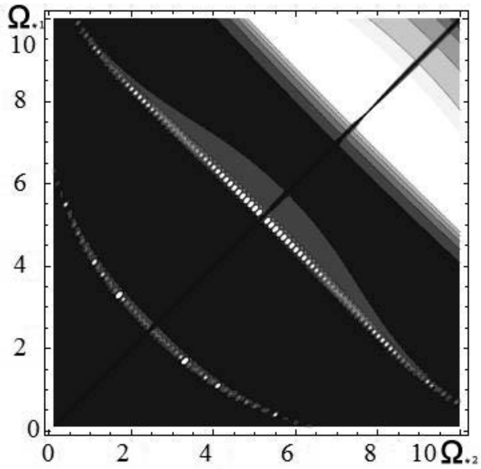


Рис. 1.

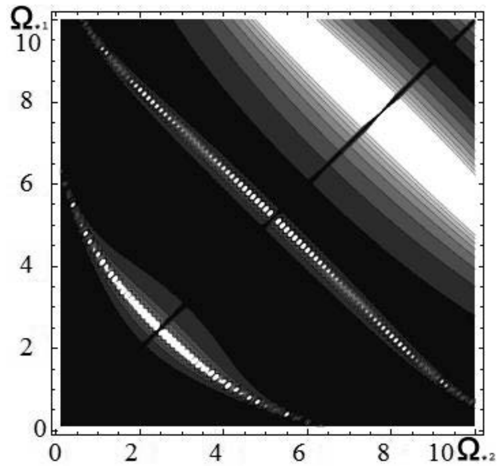


Рис. 2.

Рис. 1, 2 описывают распределения амплитудных показателей функций $\left|u_{1+}^{(n)}\right| / u_0{}^2$ и $\left|u_{3+}^{(n)}\right| / u_0{}^2$ в зависимости от сочетаний нормированных безразмерных частотных параметров $\Omega_{*m} = (\rho_* \omega_m^2 \tilde{h}^2 / c_*)^{1/2}$ для двух волн Лява с круговыми частотами ω_1 и ω_2, принадлежащих первой (низшей) моде соответствующего дисперсионного спектра. Рис.3 – 4, в свою очередь, описывают распределения амплитудных характеристик $\left|u_{1+}^{(n)}\right| / u_0{}^2$ и $\left|u_{3+}^{(n)}\right| / u_0{}^2$ для двух волн Лява, первая из которых имеет приведенную круговую частоту Ω_{*1} и принадлежит первой моде дисперсионного спектра, а вторая – приведенную круговую частоту Ω_{*2} и принадлежит второй моде дисперсионного спектра поверхностных волн Лява.

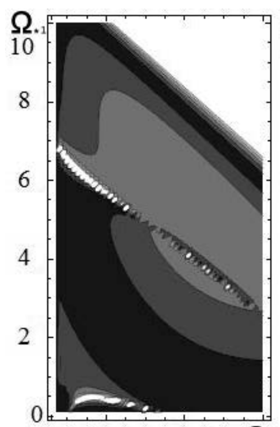


Рис.3

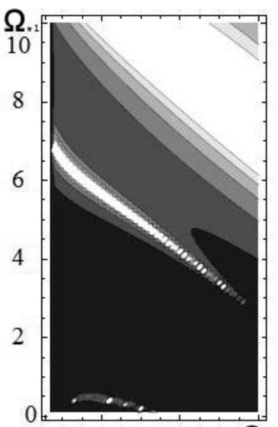


Рис.4

На рис. 5 – 8 приведены распределения нормированных значений $\left|u_{jm}^{(n)}\right| / u_0{}^2$ для вторых гармоник, образующих исследуемое линейное волновое поле волн Лява и рассматриваемых как отдельно взятые монохроматические волны с частотами $\tilde{\Omega}_{*m}$. Для указанных на рис. 5 – 8 значениях частотного параметра $\tilde{\Omega}_{*m}$ эффекты возрастания интенсивности волновых перемещений в ангармонических возмущениях соответствуют случаям, когда вторая гармоника в виде упругой волны P-SV типа с частотой $2\omega_m$ и волновым числом $2k_m$ принадлежит дисперсионному спектру обобщенных поверхностных волн релеевского типа в рассматриваемом волноводе, то есть случаям, которые исключены из рассмотрения. Распределения на рис. 1, 2, характеризующие взаимодействие волн одной моды, естественно являются симметричными относительно диагонали $\Omega_{*1} = \Omega_{*2}$.

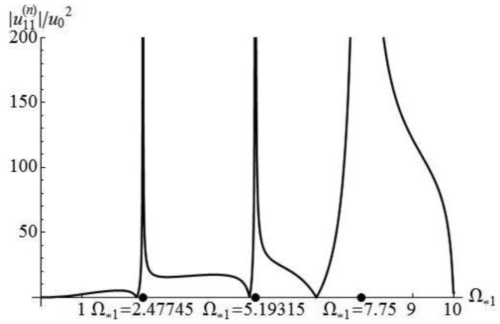


Рис. 5

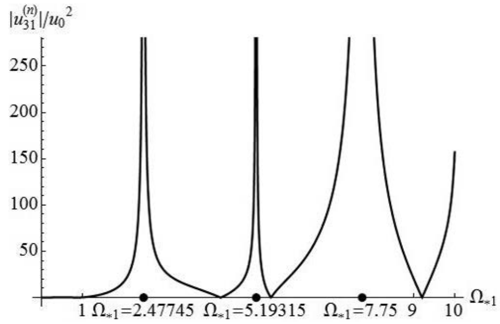


Рис. 6

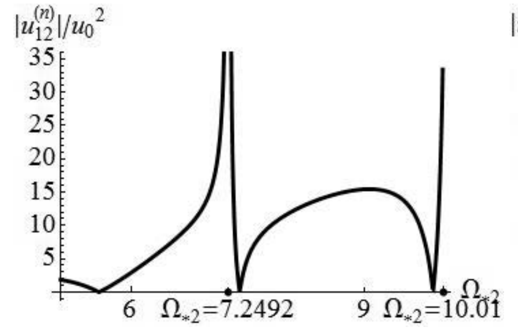


Рис. 7

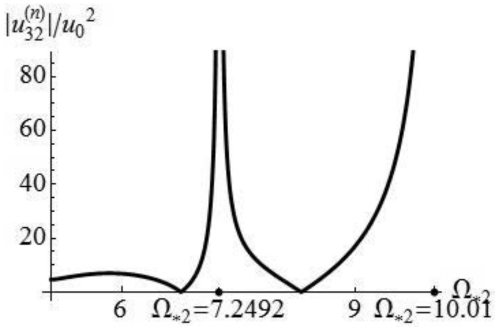


Рис. 8

Представленные частотные распределения дают представление о мере интенсивности и частотных областях разноуровневого нелинейного ангармонического взаимодействия обобщенных поверхностных волн Лява. Можно заключить, что степень взаимодействия увеличивается, когда $\Omega_{*1} = \Omega_{*2} > 4.5$, а в случае взаимодействия волн из двух соседних низших мод – при $\Omega_{*1} = \Omega_{*2} > 6.0$. Вместе с тем, в областях более низких частот имеются локализованные области значений $(\Omega_{*1}, \Omega_{*2})$, в которых также наблюдаются эффекты интенсивного ангармонического взаимодействия. Особо следует отметить интенсивное взаимодействие волн разных мод в зоне $\Omega_{*1} << 1,\ \Omega_{*2} \approx 7$, в которой частота комбинационной гармоники предельно близка к частоте Ω_{*2} одной из взаимодействующих волн, а следовательно, появление интенсивной волны с практически идентичной частотой может интерпретироваться как эффект нелинейного усиления для относительно высокочастотной поверхностной волны.

Выводы. В рамках модели геометрически и физически нелинейного динамического деформирования кристаллической среды класса m3m кубической системы получено численно-аналитическое решение задачи о нелинейном ангармоническом взаимодействии двух обобщенных поверхностных волн Лява в слое монокристалла германия на подложке в виде полупространства монокристалла кремния. Проанализированы амплитудные характеристики нелинейного взаимодействия для пар волн одной и той же первой (низшей) моды линейного дисперсионного спектра обобщенных волн Лява и для пары волн, соответственно принадлежащих первой и второй модам указанного дисперсионного спектра. Отмечены частотные эффекты возрастания степени нелинейного взаимодействия в рассматриваемом волновом процессе. Теоретические результаты работы могут найти применение в технологиях ультразвуковой дефектоскопии и при конструировании акустоэлектронных устройств.

РЕЗЮМЕ

Отримано чисельно-аналітичний розв’язок задачі про нелінійну ангармонічну взаємодію двох узагальнених поверхневих хвиль Лява в кристалічному шарі класу m3m кубічної системи на пружному кристалічному півпросторі цього ж класу анізотропії. Проведено чисельне дослідження характеристик взаємодії для пари хвиль з двох нижчих гілок дисперсійного спектру хвиль Лява в шарі з монокристалу германію на півпросторі з монокристалу кремнію.

Ключові слова: шар монокристалу германію на кремнієвому півпросторі, узагальнені поверхневі хвилі Лява, нелінійна взаємодія, малі нелінійні ангармонічні збурення, чисельно-аналітичне визначення других гармонік, розрахунки амплітудно-частотних характеристик.

SUMMARY

The numerical and analytical solve of the problem of two generic surface Love waves nonlinear anharmonic interaction in a crystal layer of m3m class of cubic system on the elastic crystal halfspace of the same anisotropy class has been received. The numerical research of interaction characteristics of the wave pair from Love wave dispersion spectrum two lowest branches in a germanium monocrystal layer on the silicon monocrystal halfspace has been carried out.

Keywords: germanium monocrystal layer on a silicon halfspace, generic surface Love waves, nonlinear interaction, nonlinear small anharmonic perturbations, numerical and analytical second harmonics definition, amplitude-frequency characteristics calculations.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Красильников В. А. Нелинейное взаимодействие упругих волн в кристаллах и обработка сигнальной информации / В. А. Красильников, В. Е. Лямов // Акустический журнал. – 1973. – Т. 19, Вып. 5. – С. 801-804.
2. Ferreira E. R. Large amplitude Love waves. / R. E. Ferreira, Ph. Boulanger, M. Destrade // The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics. – 2008. – Vol. 61, No 3. – P. 353-371.
3. Harvey A. P. Propagation of anisotropic elastic and piezoelectric nonlinear surface acoustic waves / A. P. Harvey, G. E. Tupholme // Wave Motion. – 1992. – Vol. 16. – P. 125-135.
4. Kalyanasundaram N. Nonlinear mixing of surface acoustic waves propagation in opposite directions / N. Kalyanasundaram // J. Acoust. Sos. Am. – 1973. – Vol. 73, No 6. – P. 1956-1965.
5. Kumon R. E. Directional dependence of nonlinear surface acoustic waves in the (001) plane of cubic crystals / R. E. Kumon, M. F. Hamilton // J. Acoust. Sos. Am. – 2002. – Vol. 111, No 1. – P. 2060-2069.
6. Storozhev V I. Nonlinear anharmonic effects for Love waves in structure “anisotropic layer on the anisotropic halfspace” / V. I. Storozhev, N. V. Scherbak // Works of the second international conference “Nonlinear Dynamics–2007”. – Kharkov: 2007. – P. 283 - 288.
7. Щербак Н. В. Энергетические характеристики нелинейных вторых гармоник поверхностных волн Лява в волноводе с кристаллическими компонентами кубической системы. / Н. В. Щербак, В. И. Сторожев // Труды XI Международной конференции «Современные проблемы механики сплошной среды» (Ростов-на-Дону, 26-29 ноября 2007г.) – Ростов-на-Дону, 2007. – Т. 2. – С. 173-177.
8. Жоголева Н. В. Комбинационные вторые гармоники нелинейных волн Лява в кристаллическом слое на кристаллическом полупространстве./ Н. В. Жоголева // Актуальные проблемы механики деформируемого твердого тела: матер. VI междунар. науч. конф. – Донецк: Юго-Восток, 2010. – С 149-153.
9. Щербак Н. В. Нелинейные вторые гармоники обобщенных волн Лява в анизотропном слое на анизотропном полупространстве / Н. В. Щербак, В. І. Сторожев // Вісник Донецького університету, Сер.А: Природничі науки. – 2008. – Вип.2. – С. 75-80.
10. Сторожев В. И. Анализ нелинейных ангармонических возмущений для упругих SH-волн, локализованных в кристаллическом слое между анизотропными полупространствами./ В. И. Сторожев, Н. В. Щербак // Труды ин-та прикладной математики и механики. – 2009. – Т. 19. – С. 234 – 243.
11. Блистанов А. А. Акустические кристаллы / А. А. Блистанов, В. С. Бондаренко, В. В. Чкалова / Под ред. М. П. Шашкольской. – М.: Наука, 1982. – 632 с.

Поступила в редакцию: 28.02.2012 г.

УДК 531.38

ОДИН СЛУЧАЙ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ГИРОСТАТА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ С УЧЕТОМ ЭФФЕКТА БАРНЕТТА-ЛОНДОНА

А. В. Зыза, К. С. Бородкина

В работе исследуется один случай полиномиальных решений класса Горячева-Стеклова-Ковалевского уравнений задачи о движении гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона. Условия существования решения этого класса получены в виде системы алгебраических уравнений на параметры задачи и коэффициенты решения. Построено одно новое частное решение уравнения движения гиростата, которое зависит от пяти независимых параметров.

Ключевые слова: гиростат, полиномиальное решение, первые интегралы, эффект Барнетта-Лондона, эллиптические функции времени, форма Лежандра.

Введение. Обобщением классической задачи динамики твердого тела [1] является задача о движении гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона [2 – 5]. Гиромагнитные явления играют важную роль в исследовании движений приборов в магнитных полях. Поєтому при математическом моделировании движения тела в магнитном поле следует учитывать магнитный момент, возникающий в результате эффекта Барнетта-Лондона. Это обстоятельство приводит к тому, что уравнения движения тела в магнитном поле с учетом эффекта Барнетт-Лондона в отличие от классических уравнений движения тела в поле силы тяжести не допускают интеграл энергии. Поэтому для интегрирования уравнений движения недостаточно иметь дополнительный первый интеграл [1]. В связи с этим проводятся исследования по построению частных решений различных классов, в частности, полиномиальных [6 – 9].

В данной статье изучается один класс полиномиальных решений уравнений движения гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона, рассматриваемого в работах [6, 7].

Постановка задачи. Рассмотрим движение гиростата с неподвижной точкой в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона. Эффект Барнетта-Лондона состоит в том, что первоначально ненамагниченные и сверхпроводящие твердые тела при движении в магнитном поле намагничиваются вдоль оси вращения. Возникающая при вращении намагниченность линейно зависит от угловой скорости тела. Магнитный момент при взаимодействии с внешним магнитным полем будет стремиться к направлению вектора напряженности магнитного поля. Взаимодействие намагниченности, вызванной вращением тела с внешним магнитным полем, приводит к прецессии вектора кинетического момента тела вокруг вектора поля [2 – 5].

Уравнения движения рассматриваемой задачи запишем в виде [5]

$$A\dot{\boldsymbol{\omega}} = (A\boldsymbol{\omega}+\boldsymbol{\lambda})\times\boldsymbol{\omega} + B\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}\times(C\boldsymbol{\nu}-\boldsymbol{s}), \quad \dot{\boldsymbol{\nu}} = \boldsymbol{\nu}\times\boldsymbol{\omega}. \tag{1}$$

Эти уравнения допускают только два первых интеграла

$$\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{\nu} = 1, \quad (A\boldsymbol{\omega}+\boldsymbol{\lambda})\cdot\boldsymbol{\nu} = k. \tag{2}$$

Изменение полной энергии гиростата определяется соотношением

$$\left[(A\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\omega}) - 2(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{\nu}) + (C\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{\nu})\right]^{\bullet} = 2(B\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{\nu})\cdot\boldsymbol{\omega}, \tag{3}$$

поэтому уравнения (1) не имеют интеграла энергии. В уравнениях (1) – (3) обозначения таковы: $\boldsymbol{\omega}$ – угловая скорость гиростата; $\boldsymbol{\nu}$ – единичный вектор, характеризующий направление магнитного поля; $\boldsymbol{\lambda}$ – гиростатический момент; $\boldsymbol{s}$ – вектор обобщенного центра масс; B и C – симметричные матрицы третьего порядка; k – постоянная интеграла площадей; точка над переменными обозначает относительную производную. Если же для динамического уравнения из (1) имеет место равенство $B = \lambda E$ (E – единичная матрица), то из соотношения (3) вытекает интеграл энергии для уравнений (1) и они будут относиться к уравнениям класса Кирхгофа.

Запишем уравнения (1) и первые интегралы (2) в скалярном виде при условиях, что матрицы A, B, C имеют диагональный вид $A = diag(A_1, A_2, A_3)$, $B = diag(B_1, B_2, B_3)$, $C = diag(C_1, C_2, C_3)$ и $\boldsymbol{\omega} = (p, q, r)$, $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$, $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2, s_3)$, $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$:

$$\begin{aligned}
A_1\dot{p} &= (A_2 - A_3)qr + B_2\nu_3 q - B_3\nu_2 r + (C_3 - C_2)\nu_2\nu_3 + \lambda_2 r - \lambda_3 q + \nu_3 s_2 - \nu_2 s_3,\\
A_2\dot{q} &= (A_3 - A_1)rp + B_3\nu_1 r - B_1\nu_3 p + (C_1 - C_3)\nu_1\nu_3 + \lambda_3 p - \lambda_1 r + \nu_1 s_3 - \nu_3 s_1,\\
A_3\dot{r} &= (A_1 - A_2)pq + B_1\nu_2 p - B_2\nu_1 q + (C_2 - C_1)\nu_1\nu_2 + \lambda_1 q - \lambda_2 p + \nu_2 s_1 - \nu_1 s_2;
\end{aligned} \tag{4}$$

$$\dot{\nu}_1 = r\nu_2 - q\nu_3, \quad \dot{\nu}_2 = p\nu_3 - r\nu_1, \quad \dot{\nu}_3 = q\nu_1 - p\nu_2; \tag{5}$$

$$\nu_1^2 + \nu_2^2 + \nu_3^2 = 1, \quad (A_1 p + \lambda_1)\nu_1 + (A_2 q + \lambda_2)\nu_2 + (A_3 r + \lambda_3)\nu_3 = k. \tag{6}$$

Следуя работам [6, 7], поставим задачу об исследовании условий существования у уравнений (4), (5) при $s_2 = 0,\ s_3 = 0,\ \lambda_2 = 0,\ \lambda_3 = 0$ решений следующего вида

$$\begin{gathered} q^2 = Q(p) = \sum_{k=0}^{n} b_k p^k, \quad r^2 = R(p) = \sum_{i=0}^{m} c_i p^i, \quad \nu_1 = \varphi(p) = \sum_{j=0}^{l} a_j p^j, \\ \nu_2 = q\psi(p), \quad \nu_3 = r\kappa(p), \quad \psi(p) = \sum_{i=0}^{n_1} g_i p^i, \quad \kappa(p) = \sum_{j=0}^{m_1} f_j p^j, \end{gathered} \tag{7}$$

где n, m, l, n_1, m_1 – натуральные числа или нули; b_k, c_i, a_j, g_i, f_j – неизвестные параметры.

Подставим выражения (7) в уравнения (4), (5) и геометрический интеграл из (6)

$$\dot{p} = \mu(p)\sqrt{Q(p)R(p)}, \quad \mu(p) = (\psi(p) - \kappa(p))(\varphi'(p))^{-1}, \tag{8}$$

$$\left(Q(p)\psi^2(p)\right)'\mu(p) = 2\psi(p)(p\kappa(p) - \varphi(p)), \quad \left(R(p)\kappa^2(p)\right)'\mu(p) = 2\kappa(p)(\varphi(p) - p\psi(p)), \tag{9}$$

$$\begin{gathered} A_1\mu(p) = (C_3 - C_2)\psi(p)\kappa(p) + B_2\kappa(p) - B_3\psi(p) + A_2 - A_3, \\ A_2 Q'(p)\mu(p) = 2\left[(C_1 - C_3)\varphi(p)\kappa(p) - \kappa(p)(B_1 p + s_1) + B_3\varphi(p) + (A_3 - A_1)p - \lambda_1\right], \\ A_3 R'(p)\mu(p) = 2\left[(C_2 - C_1)\varphi(p)\psi(p) + \psi(p)(B_1 p + s_1) - B_2\varphi(p) + (A_1 - A_2)p + \lambda_1\right]; \end{gathered} \tag{10}$$

$$\varphi^2(p) - 1 + Q(p)\psi^2(p) + R(p)\kappa^2(p) = 0. \tag{11}$$

В уравнениях (8) – (10) символом штрих обозначена производная по независимой переменной p. Если функции $Q(p),\ R(p),\ \varphi(p),\ \psi(p),\ \kappa(p)$ определены, то зависимость p от времени устанавливается из дифференциального уравнения (8).

Новое частное решение. Рассмотрим случай, когда в (7) $m = l = 2$, а $n = n_1 = m_1 = 1$. Тогда

$$\begin{gathered} q^2 = Q(p) = b_1 p + b_0, \quad r^2 = R(p) = c_2 p^2 + c_1 p + c_0, \quad \nu_1 = \varphi(p) = a_2 p^2 + a_1 p + a_0, \\ \nu_2 = \psi(p)q, \quad \nu_3 = \kappa(p)r, \quad \psi(p) = g_1 p + g_0, \quad \kappa(p) = f_1 p + f_0. \end{gathered} \tag{12}$$

Подставим выражения (12) в уравнения (9) – (11). Требование того, чтобы полученные равенства были тождествами по p, приводит к следующей системе уравнений на параметры задачи и коэффициенты решения (12):

$$\begin{gathered} C_1 = C_2 = C_3, \quad B_2 f_1 - B_3 g_1 = 0, \quad \mu_0 = (B_2 f_0 - B_3 g_0 + A_2 - A_3)A_1^{-1}, \\ g_1 - f_1 - 2a_2\mu_0 = 0, \quad g_0 - f_0 - a_1\mu_0 = 0, \quad f_1 - a_2 = 0, \\ 3b_1 g_1\mu_0 - 2(f_0 - a_1) = 0, \quad (b_1 g_0 + 2b_0 g_1)\mu_0 + 2a_0 = 0, \quad 2c_2 f_1\mu_0 - a_2 + g_1 = 0, \\ (2c_2 f_0 + 3c_1 f_1)\mu_0 - 2(a_1 - g_0) = 0, \quad (c_1 f_0 + 2c_0 f_1)\mu_0 - 2a_0 = 0, \\ B_3 a_2 - B_1 f_1 = 0, \quad f_1 s_1 + B_1 f_0 - B_3 a_1 + A_1 - A_3 = 0, \\ A_2 b_1\mu_0 + 2[f_0 s_1 - B_3 a_0 + \lambda_1] = 0, \quad A_3 c_2\mu_0 - g_1 s_1 - B_1 g_0 + B_2 a_1 - A_1 + A_2 = 0, \\ B_1 g_1 - B_2 a_2 = 0, \quad A_3 c_1\mu_0 + 2[B_2 a_0 - g_0 s_1 - \lambda_1] = 0, \quad a_0^2 + b_0 g_0^2 + c_0 f_0^2 - 1 = 0. \end{gathered} \tag{13}$$

Решение системы (13) представим в виде

$$C_1 = C_2 = C_3, \quad A_1 = A_3, \quad B_1 = B_3, \quad \mu_0 = (B_2 - B_3)(2B_3)^{-1}, \quad b_1 = \frac{4B_3 s_1}{3B_2(B_3 - B_2)},$$

$$b_0 = \frac{\left[(B_2 - B_3)(B_2 - 5B_3)A_3 + 8B_3^2(A_2 - A_3)\right]s_1 + 12(B_2 - B_3)B_2 B_3^2 a_0}{3(B_3 - B_2)B_2 \cdot \delta} s_1^2,$$

$$c_1 = 2(B_2 - 3B_3)s_1 / \left(3B_3(B_3 - B_2)\right), \quad c_2 = -1,$$

$$c_0 = \frac{\left(B_2^2 - B_3^2\right)(3B_3 A_2 - B_2 A_3) + 8B_2 B_3^2(A_3 - A_2)}{3(B_3 - B_2)B_3^2 \cdot \delta} s_1^3 + \frac{(B_2 + 3B_3)B_2 a_0}{\delta} s_1^2,$$

$$\delta=\left[\left(3B_2-B_3\right)B_3A_2-2B_2^2A_3\right]s_1+3\left(B_2-B_3\right)B_2B_3^2a_0,\quad a_2=B_3B_2^{-1}g_1,$$

$$a_1=\frac{\left(B_2-B_3\right)B_2A_3+2B_3\left(B_3A_2-B_2A_3\right)}{3\left(B_3-B_2\right)B_2B_3}+\frac{2B_3a_0}{s_1},$$

$$g_1=\frac{2B_2\left(B_3A_2-B_2A_3\right)+\left(B_2-B_3\right)B_3A_2}{3\left(B_2-B_3\right)B_3s_1}+\frac{B_2B_3a_0}{s_1^2},$$

$$g_0=\frac{\left(B_2-6B_3\right)B_2A_3+B_3^2\left(8A_2-3A_3\right)}{6\left(B_3-B_2\right)B_3^2}+\frac{B_2a_0}{s_1},\quad f_1=a_2,$$

$$f_0=\frac{\left(3B_2+B_3\right)B_3A_2-\left(B_2+3B_3\right)B_2A_3}{3\left(B_3-B_2\right)B_2B_3}+\frac{B_3a_0}{s_1},\quad \lambda_1=\frac{\left[B_3\left(4A_2-3A_3\right)-B_2A_3\right]s_1}{3B_3\left(B_2-B_3\right)}.\tag{14}$$

Здесь s_1 – корень кубического уравнения

$$\Delta_1s^3+\Delta_2s^2+\Delta_3s+\Delta_4=0,$$

в котором

$$\Delta_1=4B_3A_2\Big\{\Big(9B_2^2\left(B_2-B_3\right)+B_3^2\left(B_3-33B_2\right)\Big)B_3^2A_2^2+3\Big(B_3^2\left(13B_3+27B_2\right)-$$

$$-B_2^2\left(5B_3+3B_2\right)\Big)B_2B_3A_2A_3+3\Big(B_2^3\left(B_2+5B_3\right)-B_3^2\Big(6B_3^2+21B_2B_3+11B_2^2\Big)\Big)B_3A_3^2\Big\}+$$

$$+\Big(9B_3^3\left(B_2+B_3\right)\left(6B_2+B_3\right)-B_2^3\Big(B_2^2+15B_2B_3-18B_3^2\Big)\Big)B_2A_3^2,$$

$$\Delta_2=-12B_2B_3^2\left(B_2-B_3\right)a_0\left[A_2B_3\left(3B_2+B_3\right)-A_3B_2\left(B_2+3B_3\right)\right]^2,$$

$$\Delta_3=36B_2^2B_3^4\left(B_2-B_3\right)^2\left[B_3\left(3B_2-B_3\right)A_2-2B_2^2A_3\right],\quad \Delta_4=108B_2^3B_3^6\left(B_2-B_3\right)^3a_0.$$

Решение (12) при условиях (14) будет действительным, если

$$\delta\neq 0,\quad b_0\geq 0,\quad c_0>0.\tag{15}$$

Зависимость p от времени устанавливаем из (8)

$$\dot{p}=\mu_0\sqrt{\left(b_1p+b_0\right)\left(c_2p^2+c_1p+c_0\right)}.\tag{16}$$

Тем самым найдено новое частное решение класса Горячева-Стеклова-Ковалевского задачи о движении гиростата в магнитном поле. Полученное решение выражается через эллиптические функции и зависит от параметров A_2, A_3, B_2, B_3, a_0. Это решение также можно найти из уравнений, указанных в [10].

Рассмотрим численный пример решения (12), (14) – (16) уравнений (4), (5). Пусть

$$C_1=C_2=C_3,\quad A_1=A_3,\quad A_2=7A_3/4,\quad A_3=a,\quad B_1=B_3,\quad B_2=3B_3,$$

$$B_3=b,\quad a_0=1,\quad s_1=-36b^2/a,\quad \lambda_1=-6b\quad \left(a>0,\ b>0\right).$$

Тогда из (14) – (16) следует

$$q^2=Q\left(p\right)=8\xi p,\quad r^2=R\left(p\right)=144\xi^2-p^2,$$

$$\nu_1=\varphi\left(p\right)=\frac{1}{144\xi^2}p^2-\frac{1}{4\xi}p+1,\quad \nu_2=\left(\frac{1}{48\xi^2}p-\frac{1}{4\xi}\right)\sqrt{8\xi p},\quad \nu_3=\frac{1}{144\xi^2}p\sqrt{144\xi^2-p^2};\tag{17}$$

$$\dot{p}=\sqrt{8\xi p\left(144\xi^2-p^2\right)},\tag{18}$$

где $\xi=a/b,\quad 0\leq p\leq 12\xi$. В этом решении остался свободный параметр ξ, который можно устранить переходом к безразмерным величинам.

В случае (17), (18) сведем задачи к квадратурам. С этой целью в эллиптическом интеграле, полученном из дифференциального уравнения (18) при $y=\sqrt{p}$

$$\int\frac{12dy}{\sqrt{144-y^4/\xi^2}}=12\xi\sqrt{2\xi}\left(t-t_0\right),$$

произведем замену $hy = \sqrt{1-u^2}$, где $0 \le u \le 1$, $\quad h = 1/\left(2\sqrt{3\xi}\right)$. Тогда

$$\int_0^u \frac{du}{\sqrt{\left(1-u^2\right)\left(1-\tilde{k}^2u^2\right)}} = \tilde{h}\left(t-t_0\right), \tag{19}$$

где $\tilde{k} = \sqrt{2}/2$, $\quad \tilde{h} = -2\sqrt{6}\xi$. Если положить $u = \sin\varphi$, $\left(\varphi \in \left[0; \pi/2\right]\right)$, то интеграл (19) примет вид

$$\int_0^\varphi \frac{d\varphi}{\sqrt{1-0,5\sin^2\varphi}} = \theta, \quad \theta = \tilde{h}\left(t-t_0\right) \tag{20}$$

В результате обращения (20) получим значение для угла φ: $\varphi = \mathrm{am}\theta$, $u = \mathrm{sn}\theta$. Так как $y = \sqrt{p}$, то полученное значение для y дает зависимость переменной p от времени, с помощью которой из (17) можно получить выражение всех переменных от t.

Выводы. Таким образом, в статье найдено новое частное решение полиномиального вида дифференциальных уравнений, описывающих задачу о движении гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона. Полученное решение зависит от пяти свободных параметров задачи и выражается через эллиптические функции времени.

РЕЗЮМЕ

У роботі досліджується один випадок поліноміальних розв’язків класу Горячева-Стєклова-Ковалевського рівнянь задачі про рух гіростата у магнітному полі з урахуванням ефекту Барнетта-Лондона. Умови існування розв’язка цього класу отримані у вигляді системи алгебраїчних рівнянь на параметри задачі та коефіцієнти розв’язка. Побудовано один новий частинний розв’язок рівнянь руху гіростата, який залежить від п’яти незалежних параметрів.

Ключові слова: гіростат, поліноміальний розв’язок, перші інтеграли, ефект Барнетта-Лондона, еліптичні функції часу, форма Лєжандра.

SUMMARY

In the paper one case of polynomial Goriachev-Steklov-Kovalevsky class solutions to the equations of the task about the gyrostat movement in the magnetic field with the allowance for the Barnett-London effect is studied. The conditions of existence of this class are obtained in the form of algebraic equations for the task parameters and coefficients of the solution. A new separate solution to the equation of the gyrostat movement which depends on five independent parameters has been worked out.

Keywords: gyrostat, polynomial solution, first integrals, the Barnett-London effect, elliptic functions of time, Legandre form

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Харламов П.В. Лекции по динамике твердого тела / П.В. Харламов. – Новосибирск: Изд-во Новосибир. ун-та, 1965. – 221 с.
2. Самсонов В.А. О вращении твердого тела в магнитном поле / В.А. Самсонов // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1984. – № 4. – С. 32-34.
3. Козлов В.В. К задаче о вращении твердого тела в магнитном поле / В.В. Козлов // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1985. – № 6. – С. 28-33.
4. Урман Ю.Н. Динамические эффекты, обусловленные вращательным движением сверхпроводника в магнитном подвесе / Ю.Н. Урман // Докл. АН СССР. – 1984. – Т. 276, № 6. – С. 1402-1404.
5. Горр Г.В. Динамика гиростата, имеющего неподвижную точку / Г.В. Горр, А.В. Мазнев. – Донецк: ДонНУ, 2010. – 364 с.
6. Миронова Е.Н. О решении уравнений движения тела в магнитном поле на основе полиномиальных решений/ Е.Н. Миронова // Прикладная механика. – 2001. – Т. 37, № 2. – С. 105-113.
7. Зыза А.В. О полиномиальных решениях уравнений движения гиростата в магнитном поле / А.В. Зыза // Механика твердого тела. – 2003. – Вып. 33. – С. 61-70.
8. Зыза А.В. О новом классе полиномиальных решений уравнений движения гиростата в магнитном поле с учетом эффекта Барнетта-Лондона / А.В. Зыза // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2010. – № 1. – С. 52-56.
9. Зыза А.В. Об одном классе полиномиальных решений движения тела в магнитном поле / А.В. Зыза // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2010. – № 2. – С. 19-23.
10. Горр Г.В. О резукции дифференциальных уравнений в двух задачах динамики твердого тела / Г.В. Горр, А.В. Зыза// Тр. ин-та прикладной математики и механики НАН Украины. – 2009. – Т. 18. – С. 29-36.

Поступила в редакцию 27.12.2011 г.

УДК 539.3

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ВЫРАБОТКИ ВБЛИЗИ ЗАГРУЖЕННОЙ ДНЕВНОЙ ПОВЕРХНОСТИ НА КОНЦЕНТРАЦИЮ НАПРЯЖЕНИЙ ОКОЛО НЕЕ

С. А. Калоеров, Е. В. Авдюшина, А. Б. Мироненко

С использованием методов комплексных потенциалов, интегралов типа Коши и наименьших квадратов исследовано напряженное состояние горного массива с выработками вблизи дневной поверхности. Исследовано влияние формы выработки на концентрацию напряжений около ее поверхности, длины разгрузочной щели в основании на уменьшение выпучивания породы.

Ключевые слова: подземная выработка, концентрация напряжений, метод комплексных потенциалов, интегралы типа Коши, разгрузочные щели

На стадии проектирования подземных выработок приходится учитывать их форму вблизи дневной поверхности, на которой расположены сооружения. Около поверхностей таких выработок могут возникать концентрации напряжений, приводящие к их разрушению, а следовательно, и наземных сооружений. К настоящему времени эффективные методы решения задач теории упругости, к которым приводится задача об определении напряженного состояния около криволинейных отверстий вблизи загруженной границы, не разработаны. Для полуплоскости с отверстием достаточно широкие исследования проведены лишь для случая кругового отверстия [1, 2]. При этом использовался метод комплексных потенциалов Колосова-Мусхелишвили [3] с привлечением метода рядов и аналитического продолжения функций через незагруженные участки прямолинейной границы. В работе [4] предложен другой подход решения задач для многосвязной изотропной пластинки с использованием комплексных потенциалов.

В настоящей статье предложен метод решения задачи теории упругости для полуплоскости с произвольным криволинейным контуром. Дано приложение подхода к расчету подземной выработки вблизи загруженной прямолинейной границы. Описаны результаты исследования концентрации напряжений около выработки.

Постановка задачи. Рассмотрим горный массив с горизонтальной выработкой вблизи дневной поверхности. Будем считать, что поверхность выработки не подкреплена и не загружена; на дневной поверхности массива располагается протяженное сооружение, действие которого можно заменить давлением по поверхности. Нужно определить концентрацию напряжений в массиве и выбрать оптимальную форму выработки по снижению концентрации напряжений.

Для исследования напряженного состояния рассматриваемого массива представим его изотропной полуплоскостью с криволинейным отверстием с заданными на прямолинейной границей распределенными усилиями. Криволинейный контур аппроксимируем совокупностью дуг эллипсов, т. е. будем решать задачу теории упругости для полуплоскости с эллиптическими отверстиями. Таким образом, рассматривается изотропная полуплоскость с прямолинейной границей L^+ и конечным числом произвольно расположенных эллиптических отверстий с контурами L_l, полуосями a_l, b_l и центрами в точках x_{0l}, y_{0l} $\left(l=\overline{1, \mathcal{L}}\right)$ (рис.1). Контуры отверстий могут касаться, пересекаться, переходить в прямолинейные разрезы, своими дугами (берегами в случае прямолинейных трещин) образовывать контуры криволинейных отверстий и разрезов. На прямолинейной границе усилия действуют на ее конечной части L' и равны нулю на остальной части L''. На бесконечности полуплоскость не загружена.

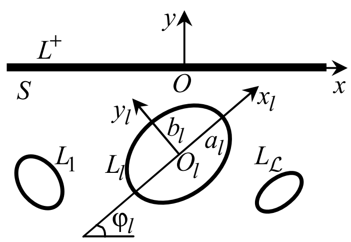


Рис. 1

Определение напряженно-деформированного состояния рассматриваемой полуплоскости сводится к нахождению производных комплексных потенциалов $\Phi(z)$ и $\Omega(z)$, удовлетворяющих граничным условиям [4, 5]

$$\Phi(t)+\overline{\Omega(t)}=g(t) \text{ на } L^+; \tag{1}$$

$$\delta\Phi(t)+(\delta-\overline{\delta})\overline{\Phi(t)}+(t-\overline{t})\overline{\delta}\overline{\Phi'(t)}+\overline{\delta}\overline{\Omega(t)}=0 \text{ на } L_l \ \left(l=\overline{1, \mathcal{L}}\right), \tag{2}$$

где

$$g(t)=-i\left(X_n+iY_n\right) \text{ на } L', \ g(t)=0 \text{ на } L'';$$

$\delta = dt/ds$; (X_n, Y_n) – усилия, действующие на L'.

Функции $\Phi(z)$, $\Omega(z)$ представим в виде

$$\Phi(z) = \Phi_0(z) + \Phi_1(z), \quad \Omega(z) = \Omega_0(z) + \Omega_1(z), \tag{3}$$

в котором $\Phi_0(z)$, $\Omega_0(z)$ – функции, голоморфные в нижней полуплоскости; $\Phi_1(z)$, $\Omega_1(z)$ – функции, голоморфные вне контуров отверстий L_l.

Используя конформные отображения внешности единичного круга на внешность эллипсов [6]

$$z = z_{0l} + R_l\left(\zeta_l + \frac{m_l}{\zeta_l}\right); \tag{4}$$

$$z_{0l} = x_{0l} + iy_{0l}, \quad R_l = R_{0l}e^{i\varphi_l}, \quad R_{0l} = \frac{a_l + b_l}{2}, \quad m_l = \frac{a_l - b_l}{a_l + b_l},$$

для функций $\Phi_1(z)$, $\Omega_1(z)$ получаем выражения

$$\Phi_1(z) = \sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_{ln}(z)a_{ln}, \quad \Omega_1(z) = \sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\psi_{ln}(z)a_{ln} + \varphi_{ln}(z)\bar{b}_{ln}\right); \tag{5}$$

в которых

$$\varphi_{ln}(z) = -\frac{n}{\zeta_l^{n-1}R_l\left(\zeta_l^2 - m_l\right)};$$

$$\psi_{ln}(z) = -\frac{n}{\zeta_l^{n-1}R_l\left(\zeta_l^2 - m_l\right)^3}\Big\{c_{l3}\zeta_l^3 + c_{l2}\zeta_l^2 +$$

$$+c_{l1}\zeta_l + n\left[d_{l4}\zeta_l^4 + c_{l3}\zeta_l^3 + d_{l2}\zeta_l^2 - c_{l1}\zeta_l + d_{l0}\right]\Big\};$$

$$c_{l3} = \bar{r}_{l1}, \quad c_{l2} = 2\left(\bar{r}_{l0} + \bar{r}_{l2}m_l\right), \quad c_{l1} = \bar{r}_{l1}m_l,$$

$$d_{l4} = \bar{r}_{l2}, \quad d_{l2} = \bar{r}_{l0} - \bar{r}_{l2}m_l, \quad d_{l0} = -\bar{r}_{l0}m_l,$$

$$r_{l0} = \frac{R_l - \bar{R}_l m_l}{\bar{R}_l}, \quad r_{l1} = \frac{z_{0l} - \bar{z}_{0l}}{\bar{R}_l}, \quad r_{l2} = \frac{m_l R_l - \bar{R}_l}{\bar{R}_l}; \tag{6}$$

φ_l – угол между положительными направлениями осей Ox и осью эллипса a_l, отсчитываемый против часовой стрелки.

Подставив выражения (3), (4) в граничные условия (1) и применяя метод интегралов типа Коши, будем иметь

$$\Phi(z) = \varphi_0(z) + \sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\varphi_{ln}(z)a_{ln} + \frac{1}{s}\bar{\psi}_{ln}(z)\bar{a}_{ln} + \frac{1}{s}\bar{\varphi}_{ln}(z)b_{ln}\right];$$

$$\Omega(z) = \psi_0(z) + \sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\psi_{ln}(z)a_{ln} + s\,\bar{\varphi}_{ln}(z)\bar{a}_{ln} + \varphi_{ln}(z)\bar{b}_{ln}\right], \tag{7}$$

где

$$\varphi_0(z) = \frac{1}{2\pi i}\int_{L'}\frac{g(t)\,dt}{t - z}, \quad \psi_0(z) = \frac{1}{2\pi i}\int_{L'}\frac{\bar{g}(t)\,dt}{t - z}. \tag{8}$$

Комплексные потенциалы (7) точно удовлетворяют граничным условиям на прямолинейной границе L^+, а к граничным условиям (2) на контурах отверстий удовлетворим методом наименьших квадратов.

Исходя из (2), составим функционал

$$J=\sum_{m=1}^{M}\left|\delta\Phi(t_m)+(\delta-\bar\delta)\overline{\Phi(t_m)}+\left(t_m-\bar t_m\right)\bar\delta\overline{\Phi'(t_m)}+\bar\delta\overline{\Omega(t_m)}\right|^2 \quad \left(l=\overline{1,\mathcal{L}}\right). \tag{9}$$

Здесь t_m – система точек, выбираемых на всех контурах отверстий L_l. Удовлетворяя условиям минимума функционала (9), для определения неизвестных постоянных, входящих в (7), получаем следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned}
&\sum_{m=1}^{M}\sum_{r=1}^{\mathcal{L}}\sum_{p=1}^{\infty}\Big\{\Big[r_{iln1}\varphi_{rp}(t_m)+r_{iln2}\varphi'_{rp}(t_m)-r_{iln3}\overline{\bar\psi_{rp}(t_m)}-\\
&\quad -r_{iln4}\overline{\bar\psi'_{rp}(t_m)}+r_{iln5}\psi_{rp}(t_m)-r_{iln6}\overline{\bar\varphi_{rp}(t_m)}\Big]a_{rp}-\\
&\quad -\Big[r_{iln1}\bar\psi_{rp}(t_m)+r_{iln2}\bar\psi'_{rp}(t_m)-r_{iln3}\overline{\varphi_{rp}(t_m)}-\\
&\quad -r_{iln4}\overline{\varphi'_{rp}(t_m)}+r_{iln5}\bar\varphi_{rp}(t_m)-r_{iln6}\overline{\psi_{rp}(t_m)}\Big]\bar a_{rp}+\\
&\quad -\Big[r_{iln1}\bar\varphi_{rp}(t_m)+r_{iln2}\bar\varphi'_{rp}(t_m)-r_{iln6}\overline{\varphi_{rp}(t_m)}\Big]b_{rp}-\\
&\quad -\Big[r_{iln3}\overline{\bar\varphi_{rp}(t_m)}+r_{iln4}\overline{\bar\varphi'_{rp}(t_m)}-r_{iln5}\varphi_{rp}(t_m)\Big]\bar b_{rp}\Big\}=\\
&\quad =-\sum_{m=1}^{M}\Big\{r_{iln1}\varphi_0(t_m)+r_{iln2}\varphi'_0(t_m)+r_{iln3}\overline{\varphi_0(t_m)}+\\
&\quad +r_{iln4}\overline{\varphi'_0(t_m)}+r_{iln5}\psi_0(t_m)+r_{iln6}\overline{\psi_0(t_m)}-\psi_{iln}g_l(t_m)-\\
&\quad -\varphi_{iln}\overline{g_l(t_m)}\Big\}\quad \left(i=\overline{1,2},\ \ l=\overline{1,\mathcal{L}},\ \ n=1,2,...\right),
\end{aligned}\tag{10}$$

где

$$\begin{aligned}
&r_{iln1}=\left(\delta-\bar\delta\right)\varphi_{iln}-\delta\psi_{iln},\quad r_{iln2}=\delta\left(t_m-\bar t_m\right)\varphi_{iln},\quad r_{iln3}=-\bar\delta\varphi_{iln}-\left(\delta-\bar\delta\right)\psi_{iln},\\
&r_{iln4}=-\bar\delta\left(t_m-\bar t_m\right)\psi_{iln},\quad r_{iln5}=-\delta\varphi_{iln},\quad r_{iln6}=-\bar\delta\psi_{iln};\\
&\varphi_{1ln}(t)=-\delta\varphi_{ln}(t)+\left(\delta-\bar\delta\right)\overline{\bar\psi_{ln}(t)}+\bar\delta\left(t-\bar t\right)\overline{\bar\psi'_{ln}(t)}+\bar\delta\,\overline{\bar\varphi_{ln}(t)},\\
&\psi_{1ln}(t)=\bar\delta\overline{\bar\psi_{ln}(t)}-\left(\delta-\bar\delta\right)\varphi_{ln}(t)-\delta\left(t-\bar t\right)\varphi'_{ln}(t)-\delta\psi_{ln}(t),\\
&\varphi_{2ln}(t)=\left(\delta-\bar\delta\right)\overline{\bar\varphi_{ln}(t)}+\bar\delta\left(t-\bar t\right)\overline{\bar\varphi'_{ln}(t)},\quad \psi_{2ln}(t)=\bar\delta\overline{\bar\varphi_{ln}(t)}-\delta\varphi_{ln}(t).
\end{aligned}$$

После решения системы (10) комплексные потенциалы (7) становятся известными, что позволяет вычислять напряжения по формулам

$$\sigma_x+\sigma_y=4\,\mathrm{Re}\,\Phi(z),\quad \sigma_y-\sigma_x+2i\tau_{xy}=2\Big[\left(\bar z-z\right)\Phi'(z)-\Phi(z)+\Omega(z)\Big]. \tag{11}$$

Численные исследования были проведены для полуплоскости с одним отверстием круговым (рис. 2, *а*) радиуса a, квадратным (рис. 2, *б*) со стороной $2a$ и сводчатым (рис. 2, *в*) с длиной прямолинейных участков $2a$ и радиусом круговой крышки a. Приложенные на прямолинейной границе воздействия моделировались равномерным давлением интенсивности p по отрезку $[-a,a]$. Все приводимые ниже значения величин даны с точностью до множителя p, причем эти величины даны для точек правых половин контуров отверстий (для левых половин в силу геометрической и силовой симметрии они такие же).

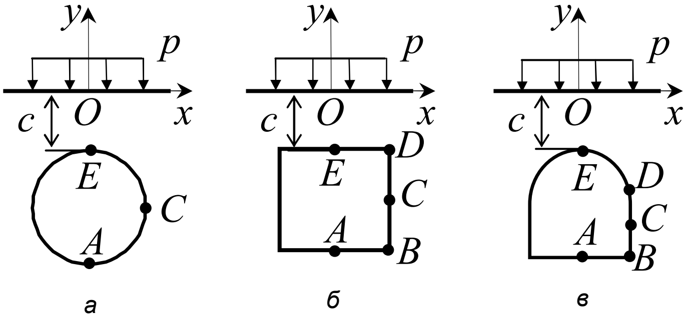


Рис. 2

На рис. 3 для полуплоскости с круговым отверстием при различных значениях отношения c/a длины перемычки к радиусу отверстия a приведены графики распределения нормальных напряжений

σ_s / p на площадках, перпендикулярных к контуру отверстия. Аналогичные графики распределения напряжений σ_s / p для случаев полуплоскости с квадратным и сводчатым отверстием приведены соответственно на рис. 4, 5.

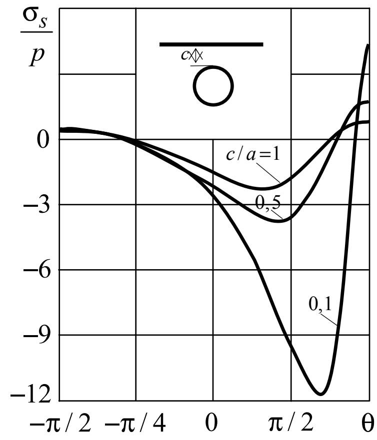


Рис. 3

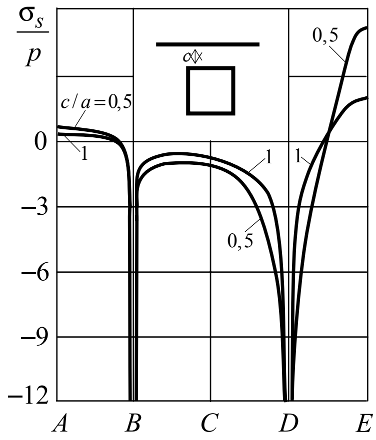


Рис. 4

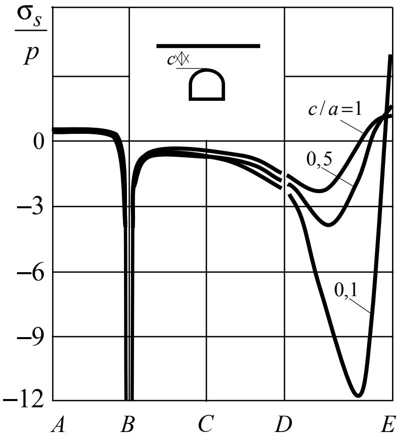


Рис. 5

Из приведенных выше результатов следует, что наименьшая концентрация напряжений имеет место в выработке в форме свода. Более того, создавать выработки кругового или эллиптического сечений неудобно. В случае выработок квадратного или прямоугольного сечений вблизи угловых точек возникает весьма высокая концентрация напряжений, а в центрах крышки и основания выработки – положительные (растягивающие) напряжения, которые могут приводить к выпучиванию породы и разрушению. Высокая концентрация напряжений вблизи угловых точек возникает и в случае сводчатого отверстия, но она меньше, чем в случае квадратного и прямоугольного, а указанные положительные напряжения вблизи центра крышки и основания значительно меньше, причем около основания их можно значительно уменьшить проведением разгрузочных щелей.

Проведенными ранее исследователями установлено, что концентрацию напряжений около свода можно существенно уменьшить проведением разгрузочных щелей из углов основания и боковых сторон. При этом щели из углов основания следует проводить [7] под углом $\pi/4$ к горизонту, отклонение от этого угла на $\pm\pi/18$ практически не влияет на значения максимальных напряжений. Горизонтальные разрезы следует проводить через середины прямолинейных вертикальных сторон свода. Однако для подземных выработок вблизи границы такие разгрузочные разрезы проводить нецелесообразно. Что же касается уменьшения положительных (выпучивающих) напряжений вблизи основания, то этого можно добиться проведение вертикальных щелей из центра основания (рис. 6). Как влияет длина этой разгрузочной щели l на значения напряжений, видно из данных таблицы, где для различных значений отношения l/a длины щели к полудлине основания приведены значения нормальных напряжений σ_s / p в точках $1\,(0{,}01a;\ -3{,}5a)$, $2\,(0{,}5a;\ -3{,}5a)$, $3\,(0{,}998a; -3{,}5a)$, $4\,(a;$ $-3{,}499a)$, $5\,(a; -3a)$, $6\,(a; -2{,}5a)$, $7\,(a;$ $-2a)$, $8\,(a; -1{,}501a)$, $9\,(a/\sqrt{2};\ -1{,}5a + a/\sqrt{2})$, $10\,(0; -0{,}5a)$. Из данных таблицы видно, что наличие щели существенно снижает положительные (выпучивающие) напряжения вблизи основания выработки, незначительно меняя их в других зонах. При этом, чем больше длина щели, тем меньше значения напряжений. Аналогичные результаты получаются в анизотропном массиве [8].

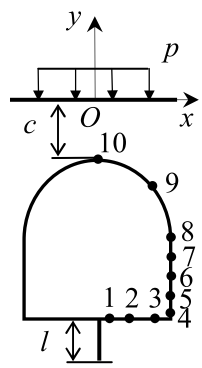


Рис. 6

Точки	l/a					
	0	0,1	0,2	0,3	0,5	1,0
1	0,226	0,146	0,008	0,007	-0,001	-0,001
2	0,241	0,227	0,168	0,125	0,064	0,046
3	-0,421	-0,473	-0,618	-0,703	-0,865	-1,151
4	-2,008	-1,887	-2,002	-1,972	-2,120	-2,400
5	-0,585	-0,570	-0,579	-0,575	-0,575	-0,585
6	-0,685	-0,666	-0,678	-0,675	-0,678	-0,686
7	-0,921	-0,893	-0,914	-0,906	-0,910	-0,924
8	-3,036	-0,168	-1,409	-1,421	-1,086	-2,422
9	-3,588	-3,590	-3,597	-3,602	-3,598	-3,594
10	1,551	1,559	1,546	1,549	1,558	1,529

Выводы. Таким образом, исследованиями установлено, что наиболее удобной в плане уменьшения концентрации напряжений около выработки вблизи дневной поверхности является сводчатая форма. Для предотвращения выпучивая вблизи основания надо проводить из центра основания разгрузочные щели, хотя бы небольшой длины.

РЕЗЮМЕ

З використанням методів комплексних потенціалів, інтегралів типу Коші і найменших квадратів досліджено напружений стан гірничого масиву з виробками поблизу денної поверхні. Досліджено вплив форми вироблення на концентрацію напружень біля її поверхні, довжини розвантажувальної щілини в основі на зменшення випинання породи.

Ключові слова: підземна виробка, концентрація напружень, метод комплексних потенціалів, інтеграли типу Коші, розвантажувальні щілини.

SUMMARY

With the use of complex potentials, the integrals of Cauchy type and least squares investigated the stress state of rock mass in near the daily workings of the surface. The effect of shape on the development of stress concentration near the surface, the length of unloading cracks at the bottom to reduce buckling of the breed.

Keywords: underground development, stress concentration, the method of complex potentials, the integrals of Cauchy type, unloading cracks.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Космодамианский А.С. Плоская задача теории упругости для пластин с отверстиями, вырезами и выступами / А.С.Космодамианский. – К.: Вища школа, 1975. – 228 с.
2. Шерман Д.И. Упругая весомая полуплоскость, ослабленная отверстиями эллиптической формы, достаточно близко расположенным от ее границы / Д.И. Шерман // Проблемы механики сплошной среды. – М.: Изд-во АН СССР, 1961. – С. 527-563.
3. Мусхелишвили Н.И. Некоторые основные задачи математической теории упругости / Н.И.Мусхелишвили. – М.: Наука, 1969. – 708 с.
4. Калоеров С.А. Об общих представлениях комплексных потенциалов для изотропных пластинок с отверстиями, трещинами и включениями / С.А.Калоеров, С.В.Вакуленко // Теорет. и прикладная механика. – 2001. – Вып. 32. – С.79-93.
5. Вакуленко С.В. Первая основная задача для многосвязной изотропной полуплоскости отверстиями и трещинами / С.В.Вакуленко // Теорет. и прикладная механика. – 2001. – Вып. 33. – С.91-99.
6. Калоеров С.А. Двумерное напряженное состояние многосвязного анизотропного тела с полостями и трещинами / С.А.Калоеров, Е.С.Горянская // Теорет. и прикладная механика. – 1995. – Вып.25. – С. 45-56.
7. Управление напряженным состоянием породного массива и устойчивостью горных пород / В.А.Полухин, С.А.Калоеров, Ю.Б.Грядущий, Е.С.Горянская. – Донецк: Юго-Восток, 2002. – 304 с.
8. Калоеров С.А. Напряженное состояние горного массива с выработками вблизи загруженной дневной поверхности / С.А.Калоеров, Е.В.Авдюшина // Наук. праці Донец. нац. техн. ун-ту. Сер. Гірнично-електромеханічна. – Вип. 83. – Донецк: ДонНТУ, 2004. – С.129-134.

Поступила в редакцию 17.02.2012 г.

УДК 539.374

УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ИЗОТРОПНОЙ ПЛОСКОСТИ С ДВУМЯ КРУГОВЫМИ ВЫРЕЗАМИ ПРИ ДВУСТОРОННЕМ ВНЕШНЕМ СЖАТИИ

Н. И. Кодак, В. Н. Ложкин
Институт прикладной математики и механики НАН Украины, г. Донецк

Методом последовательных конформных отображений и коллокации изучено упругопластическое равновесие неограниченной изотропной плоскости с двумя одинаковыми круговыми вырезами в случае идеальной пластичности. Плоскость сжимается равномерными усилиями вдоль и поперек линии центров вырезов. Контуры вырезов свободны от внешних воздействий. На неизвестной границе раздела упругой и пластических областей напряжения являются непрерывными. Определены условия, при которых имеет место начальный пластический охват контуров вырезов и при которых возможно наибольшее сближение пластических областей.

Ключевые слова: неограниченная изотропная плоскость, круговой вырез, упругопластическое равновесие, начальный пластический охват, упругая и пластическая области, неизвестная граница раздела, конформное отображение, коллокация.

Введение. Для плоской деформации или обобщенного плоского состояния многие упругопластические задачи для изотропных сред с круговыми вырезами при различных условиях пластичности ранее были решены с помощью аналитических функций. Две из этих функций характеризуют напряженное состояние упругой части среды, остальные конформно отображают внешности единичных окружностей на внешности неупругих областей, полностью охватывающих контуры вырезов и несоприкасающихся друг с другом. Коэффициенты разложений аналитических функций определяются из условия непрерывности упругих и пластических напряжений на границе их раздела методом малого параметра. Такой подход позволил получить удовлетворительные качественные результаты в случаях, когда контуры вырезов и внешние границы охватывающих их неупругих областей достаточно удалены друг от друга [1 – 6].

Анализ таких работ имеется в монографии [7]. Отметим, что метод, предложенный в статье [1], в работах [2 – 6] использован в случае, когда среда имеет два одинаковых круговых выреза.

Сегодня разработаны простые и эффективные приближенные методы решения двумерных упругопластических задач (для гибких сферических и цилиндрических оболочек с двумя круговыми вырезами) методом конечного элемента [8 – 10].

В настоящей работе предложен и использован метод последовательных конформных отображений для изучения возникновения и развития неупругих областей в изотропной плоскости с двумя одинаковыми круговыми вырезами от начального неупругого охвата их контуров в случае идеальной пластичности. В качестве исходного приближения берется конформное отображение, построенное методом малого параметра [4]. Из условий непрерывности упругих и пластических напряжений на подлежащей определению границе их раздела методом коллокации находятся коэффициенты разложений аналитических функций, характеризующих напряженное состояние упругой части плоскости, с последующим уточнением коэффициентов отображения для построения следующего приближения решения задачи.

Постановка задачи. Рассмотрим неограниченную изотропную плоскость с двумя одинаковыми круговыми вырезами радиуса R. Вырезы расположены на оси ox_1 на расстоянии lR от центра координат ox_1x_2. Плоскость сжимается усилиями q_1 вдоль оси ox_1 и q_2 – вдоль оси ox_2.

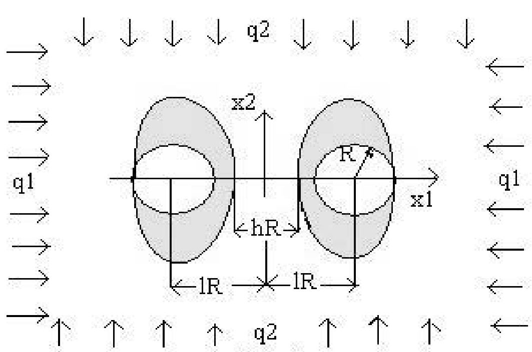


Рис.1

Контуры вырезов свободны от внешних воздействий. Расстояние между центрами вырезов и интенсивность усилий q_1 и q_2 таковы, что в плоскости возле вырезов возникают пластические области. Они полностью охватывают контуры вырезов, не соприкасаются и их внешние границы находятся на расстоянии $hR > 0$ друг от друга по оси ox_1 (рис. 1).

Геометрическая и силовая симметрия равновесия плоскости позволяет исследовать возникновение и развитие пластической области около одного – правого выреза.

Введем безразмерные координаты

$$z = \xi_1 + i\xi_2 = R^{-1}(x_1 + ix_2), \quad z - l = r\exp(i\theta). \tag{1}$$

Напряжения в упругой части плоскости удовлетворяют уравнениям равновесия, соотношению совместности и условиям внешнего нагружения [11]

$$\partial\sigma_{11}^e / \partial\xi_1 + \partial\tau_{12}^e / \partial\xi_2 = 0, \quad \partial\tau_{12}^e / \partial\xi_1 + \partial\sigma_{12}^e / \partial\xi_2 = 0;$$
$$(\partial^2\partial\xi_1^2 + \partial^2 / \partial\xi_2^2)(\sigma_{11}^e + \sigma_{22}^e) = 0; \quad |z| \to \infty: \sigma_{11}^e = -q_1, \quad \sigma_{22}^e = -q_2, \quad \tau_{12}^e = 0 \qquad (2)$$

Напряжения в правой пластической области удовлетворяют уравнениям равновесия, соотношению Мизеса и условиям на контуре выреза [7]

$$r\partial\sigma_r^p / \partial r + \sigma_r^p - \sigma_\theta^p + \partial\tau_{r\theta}^p / \partial\theta = 0, \quad r\partial\tau_{r\theta}^p / \partial r + 2\tau_{r\theta}^p + \partial\sigma_\theta^p / \partial\theta = 0;$$
$$(\sigma_r^p - \sigma_\theta^p)^2 + (2\tau_{r\theta}^p)^2 = 4k^2; \quad |z - l| = r = 1: \ \sigma_r^p = \tau_{r\theta}^p = 0. \qquad (3)$$

Здесь k – постоянная, имеющая размерность напряжений. На границе раздела упругой и пластической областей напряжения являются непрерывными.

Аналитическое решение задачи. Напряженное состояние упругой части плоскости описывается функциями $\Phi(z)$ и $\Psi(z)$, являющимися решением задачи (2). С учетом геометрической и силовой симметрии задачи их можно представить так [12]

$$\Phi(z), \Psi(z) = -\alpha / 2, \beta + \sum_{n=1} (a_n, b_n)\psi(z),$$
$$\psi_n(z) = \varsigma^{-(n+1)}(z - l) + (-1)^{n+1} \varsigma_1^{-(n+1)}(z + l), \qquad (4)$$

где

$$\alpha = (2k)^{-1}(q_1 + q_2), \quad \beta = (2k)^{-1}(q_1 - q_2). \qquad (5)$$

Значения $\varsigma(z - l)$ и $\varsigma_1(z + l)$ находятся из равенств

$$z - l = r_0\omega(\varsigma), \quad \omega(\varsigma) = \sum_{n=-1} c_{n+2}\varsigma^{-n}, \quad c_1 = 1; \quad \varsigma = \rho\exp(i\phi);$$
$$z + l = r_0\omega_1(\varsigma_1), \quad \omega_1(\varsigma_1) = -\omega(-\varsigma_1) = \sum_{n=-1} (-1)^{n+1} c_{n+2}\varsigma_1^{-n}. \qquad (6)$$

Здесь функции $z - l = r_0\omega(\varsigma)$ и $z + l = r_0\omega_1(\varsigma_1)$ конформно отображают внешности единичных окружностей $|\varsigma| = 1$ и $|\varsigma_1| = 1$ соответственно на внешности правой и левой пластических областей.

Для упругих напряжений справедливы равенства [1, 12]

$$\sigma_{11}^e + \sigma_{22}^e = 2k[\Phi(z) + \overline{\Phi(z)}], \ \sigma_{22}^e - \sigma_{11}^e + 2i\tau_{12}^e = 2k[(\bar{z} - z)\Phi_z'(z) + \Psi(z)] \qquad (7)$$

В окрестности правой пластической области функции (4) принимают вид

$$\Phi(\varsigma), \Psi(\varsigma) = -\alpha / 2, \beta + \sum_{n=1} (a_n, b_n)\psi_n(\varsigma), \ \psi_n(\varsigma) = \varsigma^{-(n+1)} + (-1)^{n+1}\varsigma_1^{-(n+1)}(\varsigma), \qquad (8)$$

где значения $\varsigma_1(\varsigma)$ находятся из равенства

$$\varsigma_1(\varsigma) = 2l / r_0 + \varsigma + \sum_{n=0} c_{n+2}[\varsigma^{-n} + (-1)^n \varsigma_1^{-n}(\varsigma)]. \qquad (9)$$

Соотношения (7) перепишутся так

$$\sigma_\rho^e + \sigma_\phi^e = 2k[\Phi(\varsigma) + \overline{\Phi(\varsigma)}],$$
$$\sigma_\rho^e - i\tau_{\rho\phi}^e = k[\Phi(\varsigma) + \overline{\Phi(\varsigma)} - \Omega_1(\varsigma, \bar{\varsigma})\Phi_\varsigma'(\varsigma) - \Omega_2(\varsigma, \bar{\varsigma})\Psi(\varsigma)], \qquad (10)$$

где

$$\Omega_1(\varsigma, \bar{\varsigma}) = \varsigma[\overline{\omega(\varsigma)} - \omega(\varsigma)] / \bar{\varsigma}\overline{\omega'(\varsigma)}, \quad \Omega_2(\varsigma, \bar{\varsigma}) = \varsigma\omega'(\varsigma) / \bar{\varsigma}\overline{\omega'(\varsigma)}. \qquad (11)$$

Решение задачи (3) для правой пластической области имеет вид [7,11]

$$\sigma_r^p = -2k\ln r, \quad \sigma_\theta^p = -2k(1 + \ln r), \quad \tau_{r\theta}^p = 0. \qquad (12)$$

Тогда на ее внешней границе $z - l = r_0\omega(\sigma)$ будем иметь

$$\sigma_\rho^p + \sigma_\phi^p = -2k[1 + 2\ln r_0 + \ln|\omega(\sigma)|^2],$$
$$\sigma_\rho^p - i\tau_{\rho\phi}^p = -2k[1 + 2\ln r_0 + \ln|\omega(\sigma)|^2 - \Omega_3(\sigma, \bar{\sigma})], \qquad (13)$$

где

$$\Omega_3(\varsigma,\bar{\varsigma}) = \varsigma\omega'(\varsigma)\overline{\omega(\varsigma)} / \bar{\varsigma}\overline{\omega'(\varsigma)}\omega(\varsigma), \quad \sigma = \exp(i\varphi). \tag{14}$$

Коэффициенты r_0, c_n, a_n, b_n разложений (6), (8) находятся из условия непрерывности упругих (10) и пластических (13) напряжений

$$\Phi(\sigma) + \overline{\Phi(\sigma)} = -1 - 2\ln r_0 - \ln|\omega(\sigma)|^2, \tag{15}$$

$$\begin{gathered}\Phi(\sigma) + \overline{\Phi(\sigma)} - \Omega_1(\sigma,\bar{\sigma})\Phi'_{\varsigma}(\sigma) - \Omega_2(\sigma,\bar{\sigma})\Psi(\sigma) = \\ = -1 - 2\ln r_0 - \ln|\omega(\sigma)|^2 + \Omega_3(\sigma,\bar{\sigma}).\end{gathered} \tag{16}$$

В случае, когда расстояния между центрами вырезов и между внешними границами пластических областей достаточно велики, решение задачи, построенное методом малого параметра, приведено в работе [4]. В частности уточненное отображение (6) будет таким

$$z - l = r_0\omega(\varsigma), \quad \omega(\varsigma) = \varsigma + c_2 + c_3\varsigma^{-1} + c_4\varsigma^{-2} + c_5\varsigma^{-2}(\varsigma - \varsigma_0)^{-1}, \tag{17}$$

где

$$\begin{aligned} &r_0 = r_p \exp\{-\beta\delta^2 + [(1+\beta)^2 + (15/2)\beta^2]\delta^4\}, \\ &r_p = \exp(\alpha/2 - 1/2), \quad \delta = r_p/2l - \beta(r_p/2l)^3, \\ &c_2 = 2(1-\beta)\beta\delta^3, \quad c_3 = -\beta + (1+\beta^2)\delta^2 - [8(1+\beta)^3 - 6(1+\beta)]\delta^4, \\ &c_4 = -2(1+\beta)(1+2\beta)\delta^3, \quad c_5 = 3(1+\beta)(1+3\beta)\delta^4, \quad \varsigma_0 = 2\beta\delta^3. \end{aligned} \tag{18}$$

Численное решение задачи. В случае, когда плоскость имеет один круговой вырез (задача Л.А.Галина), в работе [13] установлено, что начальный пластический охват его контура возможен при следующих ограничениях внешних усилий

$$0,65006 < (\alpha+\beta)/(\alpha-\beta) < 1,53581, \quad |\beta| < 0,57581. \tag{19}$$

Решение задачи строится методом последовательных конформных отображений. Для фиксированного расстояния l и фиксированного значения параметра β, удовлетворяющего второму ограничению (19), в качестве исходного приближения берется отображение (17). Уточняется значение параметра α_n, при котором возможен начальный пластический охват контура правого выреза.

Строится упругое решение для полученного отображения. Из условия (16) методом коллокации находятся коэффициенты a_n, b_n разложений (8). Для этого его распишем так

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1} a_n[2\operatorname{Re}\psi_n(\sigma) - \operatorname{Re}\Omega_1(\sigma,\bar{\sigma})\operatorname{Re}\psi'_n(\sigma) + \operatorname{Im}\Omega_1(\sigma,\bar{\sigma})\operatorname{Im}\psi'_n(\sigma)] - \\ &\quad -\sum_{n=1} b_n[\operatorname{Re}\Omega_2(\sigma,\bar{\sigma})\operatorname{Re}\psi_n(\sigma) - \operatorname{Im}\Omega_2(\sigma,\bar{\sigma})\operatorname{Im}\psi_n(\sigma)] = \\ &\quad = \alpha + \beta\operatorname{Re}\Omega_2(\sigma,\bar{\sigma}) - 1 - 2\ln r_0 - \ln|\omega(\sigma)|^2 + \Omega_3(\sigma,\bar{\sigma}), \\ &\sum_{n=1} a_n[\operatorname{Im}\Omega_1(\sigma,\bar{\sigma})\operatorname{Re}\psi'_n(\varpi) + \operatorname{Re}\Omega_1(\sigma,\bar{\sigma})\operatorname{Im}\psi'_n(\sigma)] + \\ &\qquad +\sum_{n=1} b_n[\operatorname{Im}\Omega_2(\sigma,\bar{\sigma})\operatorname{Re}\psi_n(\sigma) + \operatorname{Re}\Omega_2(\sigma,\bar{\sigma})\operatorname{Im}\psi_n(\sigma) = \\ &\quad = -\beta\operatorname{Im}\Omega_2(\sigma,\bar{\sigma}) - \operatorname{Im}\Omega_3(\sigma,\bar{\sigma}). \end{aligned} \tag{20}$$

Для уточнения коэффициентов r_0 и c_n используем преобразованное условие (15)

$$\ln|r_0\omega(\sigma)|^2 = (1+\mu)^{-1}[\alpha - 1 - 2\sum_{n=1} a_n \operatorname{Re}\psi_n(\sigma) + \mu\ln|r_0\omega(\sigma)|^2]. \tag{21}$$

Здесь μ – произвольная постоянная. Отображение (6) представим так

$$r_0\omega(\varsigma) = \omega_0(\varsigma) + \omega_h(\varsigma), \ \omega_0(\varsigma) = \sum_{n=-1} t_{n+2}\varsigma^{-n}, \ t_n = r_0c_n, \ \omega_h(\varsigma) = \sum_{n=-1} h_{n+2}\varsigma^{-n}. \tag{22}$$

Величины h_n предполагаются малыми. Учитывая, что

$$\ln|r_0\omega(\sigma)|^2 \approx \ln|\omega_0(\sigma)|^2 + |\omega_0(\sigma)|^{-2}[\overline{\omega_0(\sigma)}\omega_h(\sigma) + \omega_0(\sigma)\overline{\omega_h(\sigma)}],$$

условие (21) принимает вид

$$2\sum_{n=-1} h_{n+2}[\operatorname{Re}\omega_0(\sigma)\cos n\phi + \operatorname{Im}\omega_0(\sigma)\sin n\phi] =$$
$$= (1+\mu)^{-1}\,|\,\omega_0(\sigma)|^2\,[\alpha - 1 - 2\sum_{n=1} a_n \operatorname{Re}\psi_n(\sigma) - \ln|\,\omega_0(\sigma)|^2]. \qquad (23)$$

Из него методом коллокации найдем постоянные h_n. Новые коэффициенты r_0 и c_n подсчитываются так

$$r_0 = t_1 + h_1, \quad c_n = (t_1 + h_1)^{-1}(t_n + h_n). \qquad (24)$$

При построении приближений возможно пересечение оси ox_2 внешней границей правой пластической области. Поэтому параметр r_0 уточняется следующим образом

$$l + r_0\omega(-1) \ge 0:\ r_0 = t_1 + h_1; \quad l + r_0\omega(-1) < 0:\ r_0 = -l/\omega(-1). \qquad (25)$$

Точки коллокации ($0 \le \varphi \le \pi$) выбираются на контуре $z - l = r_0\omega(\sigma)$ не симметрично относительно прямой $x_1 = l$. Значения функции $\varsigma_1(\varsigma)$ вычисляются из уравнения (9) методом Вегстейна. Сходимость приближений обеспечивается подбором произвольной постоянной μ.

Построение приближений заканчивается при совпадении двух последних внешних границ правой пластической области с заданной точностью. Затем осуществляется переход с заданным шагом к новому значению параметра α, вычисляется коэффициент r_0 по формулам (18), постоянные c_n сохраняются от предыдущего шага. Определяющим критерием решения задачи является точность выполнения условия непрерывности напряжений (10), (13) на границе их раздела

$$z - l = r_0\omega(\sigma):\ \sigma_\rho^e = \sigma_\rho^p\,,\quad \sigma_\varphi^e = \sigma_\varphi^p\,,\quad \tau_{\rho\varphi}^e = \tau_{\rho\varphi}^p\,. \qquad (26)$$

С увеличением параметра α и фиксированном значении β последующая пластическая область полностью охватывает предыдущую.

Результаты численных исследований сведены в таблице. В ней для различных расстояний l между началом координат и центрами вырезов и различных значений параметра β приведены:

- значения параметра α_n, при котором происходит начальный пластический охват контуров вырезов;
- значение параметра α_k, до которого предложенный метод позволил довести вычисления;
- значения параметра h (рис.1), характеризующего расстояние между внешними границами пластических областей и соответствующего величинам α_k и β.

Таблица

l	1.75			2.0			3.0			4.0		
β	α_n	α_k	h	α_n	α_k	h	α_n	α_k	h	α_n	α_k	h
-0,35							1,93	2,1068	0,087	1,89	2,6830	0,074
-0,30							1,78	2,1600	0,093	1,76	2,7360	0,096
-0,25							1,64	2,2140	0,085	1,61	2,7900	0,078
-0,20							1,51	2,2680	0,086	1,54	2,8440	0,087
-0,15				1,45	1,510	0,086	1,38	2,3227	0,081	1,35	2,8983	0,094
-0,10				1,34	1,565	0,083	1,28	2,3770	0,097	1,25	2,9532	0,094
-0,05	1,29	1,352	0,089	1,24	1,620	0,088	1,17	2,4328	0,081	1,15	3,0088	0,078
0,0	1,21	1,408	0,085	1,15	1,676	0,085	1,07	2,4880	0,095	1,00	3,0644	0,086
0,05	1,16	1,464	0,087	1,08	1,732	0,086	1,06	2,5444	0,089	1,08	3,1208	0,071
0,10	1,16	1,520	0,094	1,14	1,788	0,096	1,16	2,6010	0,092	1,17	3,1770	0,096
0,15	1,18	1,578	0,084	1,26	1,846	0,082	1,26	2,6580	0,098	1,26	3,2342	0,094
0,20	1,31	1,635	0,092	1,32	1,903	0,093	1,38	2,7160	0,092	1,38	3,2920	0,090
0,25	1,42	1,693	0,095	1,44	1,961	0,097	1,50	2,7740	0,097	1,52	3,3501	0,099
0,30	1,54	1,752	0,094	1,56	2,020	0,095	1,62	2,8330	0,094	1,65	3,4090	0,099
0,35				1,68	2,080	0,088	1,75	2,8928	0,085	1,78	3,4685	0,098

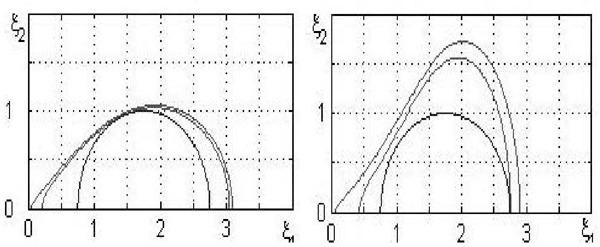
На рис. 2 – 5 в системе безразмерных координат $o\xi_1\xi_2$ изображены внешние границы правых пластических областей, соответствующие α_n и α_k, для таких значений параметров l и β:

$l = 1{,}75,\ \beta = -0{,}05,\ \beta = 0{,}30$, (рис.2);

$l = 2{,}0,\ \beta = -0{,}15,\ \beta = 0{,}35$, (рис.3);

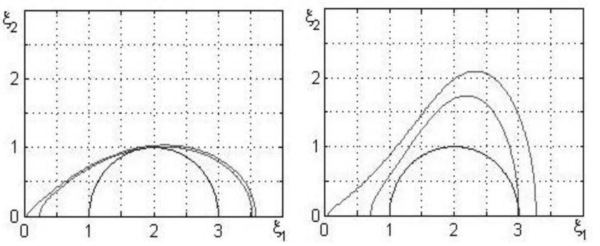
$l = 3{,}0,\ \beta = -0{,}35,\ \beta = 0{,}35$, (рис.4);

$l = 4{,}0,\ \beta = -0{,}35,\ \beta = 0{,}35$, (рис.5).



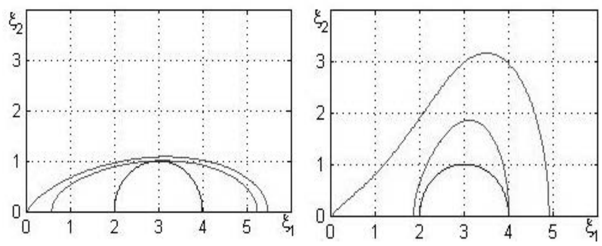
а б

Рис.2



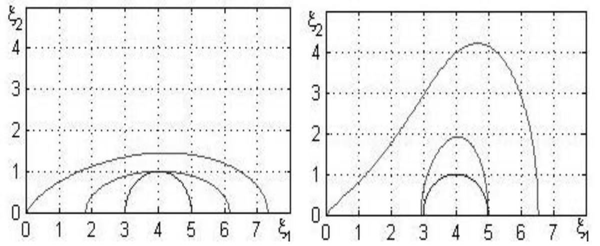
а б

Рис.3



а б

Рис.4



а б

Рис.5

Установлено, что при выполнении условий

$$l = 1,75;\ \beta < -0,05; \qquad l = 2,0;\ \beta < -0,15; \qquad l = 3,0;\ \beta < -0,35 \tag{27}$$

раздельный начальный пластический охват контуров вырезов отсутствует. В этих случаях соприкосновение пластических областей происходит до полного охвата ими своих контуров вырезов.

Согласно обозначений (5) внешние усилия q_1, q_2 через параметры α, β выражаются так

$$q_1 = (\alpha + \beta)k, \quad q_2 = (\alpha - \beta)k. \tag{28}$$

Выводы. Проанализировав данные, приведенные в таблице, можно утверждать, что метод последовательных конформных отображений совместно с методом коллокации позволил изучить упругопластическое равновесие неограниченной изотропной плоскости с двумя одинаковыми круговыми вырезами для расстояний между их контурами от полутора радиуса и сблизить внешние границы охватывающих эти контуры пластических областей до расстояний, меньших одной десятой радиуса выреза. Определены значения геометрических и силовых параметров рассмотренной задачи, при которых раздельный пластический охват контуров вырезов отсутствует, а соприкосновение пластических областей происходит до полного охвата ими своих контуров вырезов.

Следует отметить вычислительные особенности, возникшие при использовании предложенного метода. С одной стороны с расширением пластических областей в плоскости (с ростом значений параметра α) необходимо было увеличивать количество коэффициентов разложений аналитических функций (6), (8). С другой стороны, для их определения из равенств (20), (23) следовало брать больше точек колокации, что не всегда приводило к улучшению результатов. Поэтому при сближении внешних границ пластических областей приходилось снижать точность удовлетворения условиям непрерывности напряжений (26). Так при начальном пластическом охвате контуров вырезов она составляла 10^{-4}, а в конце счета только 10^{-2}. Кроме того, чтобы при построении конформных отображений (6) для близко расположенных пластических областей не происходило пересечение их внешних границ, необходимо было ввести правило уточнения (25) основного коэффициента отображений. Все выше сказанное обеспечило сходимость метода последовательных конформных отображений.

Предположим, что сжатие плоскости поперек линии центров является наибольшим: $q_1 < q_2$, $\beta < 0$. После анализа графиков, приведенных на рис. 2–4, а, можно заключить, что внешние границы пластических областей сохраняют свою гладкость вплоть до соприкосновения.

Пусть сжатие плоскости вдоль линии центров является наибольшим: $q_1 > q_2$, $\beta > 0$. После анализа графиков, приведенных на рис. 2–4, б, можно сделать вывод, что внешние границы пластических областей при соприкосновении в начале координат имеют точку возврата, в которой отображения (6), теряют свою конформность.

Следует отметить, что метод последовательных конформных отображений в сочетании с методом коллокации можно использовать при замене в задаче (3) условия Мизеса другим условиям пластичности [13, 14].

РЕЗЮМЕ

Методом послідовних конформних відображень і колокації **в**ивчено пружнопластичну рівновагу необмеженої ізотропної площини з двома однаковими круговими вирізами у випадку ідеальної пластичності. Площина стискається рівномірними зусиллями вздовж і впоперек лінії центрів вирізів. Контури вирізів вільні від зовнішніх впливів. На невідомій границі розділу пружної і пластичних областей напруження є неперервними. Знайдено зусилля, при яких має місто початкове пластичне охоплення контурів вирізів та при яких можливо найбільше зближення непружних областей.

Ключові слова: необмежена ізотропна площина, круговий виріз, пружнопластична рівновага, початкове непружне охоплення, пружна і пластична області, невідома границя розділу, конформне відображення, колокація.

SUMMARY

By method of successive conformal mappings and by method of collocation elastoplastic equilibrium of an infinite isotropic plane with two the same circular cut outs in the case of an ideal plasticity is studied. The plane by an uniform load along and across the line of centers of the cut outs is compressed. Theirs contours from external force are free. Stress on an unknown border of separating of the elastic and plastic domains are continuous. Efforts, at which the initial plastic enclusien of contours of the cut outs take plane and at which the maximum convergence of plastic domains is possible, are determined.

Keywords: infinite isotropic plane, circular cut out, elastoplastic equilibrium, initial plastic enclusien, elastic and plastic domains, unknown border of separating, conformal mapping, collocation.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Космодамианский А.С. Упругопластическая задача для изотропного массива, ослабленного бесконечным рядом одинаковых круговых выработок / А.С.Космодамианский // Изв. АН СССР. Механика и машиностроение. – 1961. – №4. – С. 187-188.
2. Аннин Б.Д. Упругопластическое распределение напряжений в плоскости, ослабленной двумя круговыми отверстиями / Б.Д.Аннин // Динамика сплошной среды. – Новосибирск, 1969. – № 1. – С. 234-241.
3. Остросаблин Н.И. Упругопластическая задача для плоскости с двумя одинаковыми круговыми отверстиями/ Н.И.Остросаблин // Динамика сплошной среды. – Новосибирск , 1970. – № 4. – С. 114-118.
4. Иванов Г.М. Упругопластическая задача для изотропного массива, ослабленного двумя круговыми вырабтками / Г.М.Иванов, А.Н.Семенихина // Прикладная механика. – 1973. – Т. 9, № 3. – С. 131-133.
5. Мирсалимов В.М. Об одной упругопластической задаче для массива, ослабленного двумя одинаковыми круговыми выработками / В.М.Мирсалимов // Физ-техн. проблемы разработки полезных ископаемых. – 1975. – № 5. – С. 142-146.
6. Остросаблин Н.И. Упругопластическое распределение напряжений в плоскости, ослабленной конечным числом круговых отверстий / Н.И.Остросаблин // Прикладная механика. – 1973. – Т. 9, № 10. – С. 124-128.
7. Аннин Б.Д. Упругопластическая задача / Б.Д.Аннин, Г.П.Черепанов. – Новосибирск: Наука, 1983. – 238 с.
8. Гузь А.Н. Неупругое деформирование гибких сферических оболочек, ослабленных двумя круговыми отверстиями / А.Н.Гузь, Е.А.Сторожук, И.С.Чернышенко // Прикладная механика. – 2004. – Т. 40, № 6. – С. 90-98.
9. Гузь А.Н. Упругопластическое состояние цилиндрических оболочек с двумя круговыми отверстиями / А.Н.Гузь, Е.А.Сторожук, И.С.Чернышенко // Прикладная механика. – 2004. – Т. 40, № 10. – С. 107-112.
10. Сторожук Е.А. Упругопластическое деформирование гибких цилиндрических оболочек с двумя круговыми вырезами при осевом растяжении / Е.А.Сторожук, И.С.Чернышенко // Прикладная механика. – 2005. – Т. 41, № 5. – С. 52-57.
11. Савин Г.Н. Распределение напряжений около отверстий / Г.Н.Савин. – Киев: Наук. думка, 1968. – 878 с.
12. Ворович И.И. Упругое равновесие изотропной плоскости, ослабленной бесконечным рядом одинаковых криволинейных отверстий / И.И.Ворович, А.С.Космодамианский // Изв. АН СССР. Механика и машиностроение. – 1959. – № 4. – С. 69-76.
13. Ложкин В.Н. Условия пластического охвата контура кругового отверстия в задаче Л.А.Галина и ее обобщениях / В.Н.Ложкин, Н.И.Кодак // Доп. НАН України. – 2003. – № 3. – С. 42-46.
14. Космодамианский А.С. Определение пластической области около кругового отверстия с учетом объемных и сдвиговых деформаций/ А.С.Космодамианский, В.Н.Ложкин // Доп. НАН України. – 1995. – № 11. – С. 49-51.

Поступила в редакцию 15.12.2011 г.

УДК 531.38

ПРЕЦЕССИОННО–ИЗОКОНИЧЕСКИЕ ДВИЖЕНИЯ ВТОРОГО ТИПА В ЗАДАЧЕ О ДВИЖЕНИИ ГИРОСТАТА С ПЕРЕМЕННЫМ ГИРОСТАТИЧЕСКИМ МОМЕНТОМ

*А. В. Мазнев, Г. А. Котов**

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, г. Макеевка

Получены условия существования прецессионно-изоконических движений второго типа в задаче о движении гиростата с переменным гиростатическим моментом. Получены новые решения уравнений движения гиростата с заданным свойством.

Ключевые слова: гиростат, гиростатический момент, прецессии, изоконические движения.

Введение. Применение теоремы Пуансо прямого кинематического истолкования движения гиростата, основанного на уравнениях П.В. Харламова [1], позволило получить значительную информацию о свойствах движения [2, 3]. Одним из наглядных классов движения гиростата является класс изоконических движений, который характеризуется симметричностью подвижного и неподвижного годографов угловой скорости относительно касательной к ним плоскости.

Прецессионные движения, обладающие свойством постоянства угла между двумя прямыми, фиксированными соответственно в теле и в пространстве, имеют большое значение для приложений [4]. Весьма естественным является рассмотрение движений гиростата, характеризующихся двумя указанными выше свойствами. Такие движения называются прецессионно–изоконическими движениями [4, 5].

В случае, когда гиростатический момент [6] постоянен, получены многочисленные результаты [4, 5] по изучению условий существования прецессионно–изоконических движений. Поэтому актуальной задачей является задача исследования прецессионно–изоконических движений в случае переменного гиростатического момента. Отметим, что постановку задачи о движении гиростата с переменным гиростатическим моментом рассматривали Ж. Лиувилль [7], В. Вольтерра [8], Н.Е. Жуковский [9], П.В. Харламов [6].

Условия существования простейших классов прецессионных движений неавтономного гиростата изучены в работах [10 – 12]. В работе [13] предложен общий метод исследования прецессионных движений гиростата с переменным гиростатическим моментом под действием потенциальных и гироскопических сил. Особенность этого метода состоит в том, что его применение позволяет получить замкнутую систему трех обыкновенных дифференциальных уравнений относительно величины гиростатического момента и скоростей прецессии и собственного вращения.

В данной работе исследован класс прецессионно-изоконических движений гиростата, который характеризуется постоянством скорости собственного вращения. Получены новые решения уравнений движения гиростата под действием потенциальных и гироскопических сил.

Постановка задачи. Пусть гиростат намагничен, несет на себе электрические заряды и находится под действием электрических, магнитных, ньютоновских и лоренцевых сил. Тогда уравнения движения гиростата можно записать в виде [6,14]

$$A\dot{\boldsymbol{\omega}} = A\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{\omega} - L\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\omega}\times\left(B\boldsymbol{\nu} - \lambda(t)\boldsymbol{\alpha}\right) + \boldsymbol{\nu}\times\left(C\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{s}\right), \tag{1}$$

$$\dot{\boldsymbol{\nu}} = \boldsymbol{\nu}\times\boldsymbol{\omega}, \quad \dot{\lambda} = L. \tag{2}$$

Здесь $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ – угловая скорость тела-носителя; $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$ – единичный вектор оси симметрии силовых полей; L – проекция момента сил, действующих на носимые тела, относительно оси вращения; $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ – единичный вектор, характеризующий направление вектора гиростатического момента $\lambda\boldsymbol{\alpha}$; $\lambda(t)$ – ограниченная, дифференцируемая функция времени; $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2, s_3)$ – вектор, сонаправленный с вектором обобщенного цента масс гиростата; $A = (A_{ij})$ – тензор инерции гиростата; $B = (B_{ij})$ и $C = (C_{ij})$ – симметричные постоянные матрицы третьего порядка; точка над переменными $\boldsymbol{\nu}$, $\boldsymbol{\omega}$, λ обозначает относительную производную по времени t.

Уравнения (1), (2) имеют два первых интеграла

$$\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{\nu} = 1, \quad \left(A\boldsymbol{\omega} + \lambda\boldsymbol{\alpha}\right)\cdot\boldsymbol{\nu} - \frac{1}{2}\left(B\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{\nu}\right) = k, \tag{3}$$

где k – произвольная постоянная.

Рассмотрим класс прецессионных движений гиростата относительно вертикали ν для уравнений (1), (2), т.е. в процессе движения угол между единичным вектором $\boldsymbol{a}$, неизменно связанным с телом и единичным вектором ν, неизменным в пространстве постоянен и равен θ_0. Подвижную систему координат свяжем с вектором $\boldsymbol{a}$ таким образом, чтобы $\boldsymbol{a}=(0,0,1)$.

Тогда имеет место инвариантное соотношение

$$\boldsymbol{a}\cdot\nu=a_0,\quad (a_0=\cos\theta_0). \tag{4}$$

Согласно методу исследования прецессий, указанному в [4] векторы ν и ω могут быть представлены в виде

$$\nu=\left(a_0'\sin\varphi,\ a_0'\cos\varphi,\ a_0\right),\quad \omega=\dot{\varphi}(t)\boldsymbol{a}+\dot{\psi}(t)\nu, \tag{5}$$

где $a_0'=\sin\theta_0$, φ и ψ – новые переменные. Поскольку уравнение Пуассона из (2) при подстановке в него равенств (5) дает тождество, то необходимо исследовать динамическое уравнение (1) при наличии соотношений (5). Для этой цели в уравнение (1) подставим выражение $L=\dot{\lambda}$ из системы (2) и ω из системы (5) и спроектируем обе части полученного равенства на независимые векторы $\boldsymbol{a}$, ν, $\boldsymbol{a}\times\nu$ [13]

$$\begin{gathered}\alpha_3\dot{\lambda}(t)-a_0'(\alpha_1\cos\varphi-\alpha_2\sin\varphi)\dot{\psi}\lambda(t)+A_{33}\ddot{\varphi}+(\beta_1\cos\varphi+\beta_1'\sin\varphi+\beta_0)\ddot{\psi}+\\+(A_2\sin2\varphi-A_2'\cos2\varphi+a_0\beta_1\sin\varphi-a_0\beta_1'\sin\varphi)\dot{\psi}^2+(B_2'\cos2\varphi-B_2\sin2\varphi+\\+a_0\gamma_1'\cos\varphi-a_0\gamma_1\sin\varphi)\dot{\psi}+(C_2'\cos2\varphi-C_2\sin2\varphi-\kappa_1'\cos\varphi+\kappa_1\sin\varphi)=0,\end{gathered} \tag{6}$$

$$\begin{gathered}(\alpha_1a_0'\sin\varphi+\alpha_2a_0'\cos\varphi+a_0\alpha_3)\dot{\lambda}(t)+a_0'(\alpha_1\cos\varphi-\alpha_2\sin\varphi)\dot{\varphi}\lambda(t)+\\+(\beta_1\cos\varphi+\beta_1'\sin\varphi+\beta_0)\ddot{\varphi}+(\beta_1'\cos\varphi-\beta_1\sin\varphi)\dot{\varphi}^2+(A_2\cos2\varphi+A_2'\sin2\varphi+\\+2a_0\beta_1\cos\varphi+2a_0\beta_1'\sin\varphi+A_0)\ddot{\psi}+2(A_2'\cos2\varphi-A_2\sin2\varphi+a_0\beta_1'\cos\varphi-\\-a_0\beta_1\sin\varphi)\dot{\varphi}\dot{\psi}-(B_2'\cos2\varphi-B_2\sin2\varphi+a_0\gamma_1'\cos\varphi-a_0\gamma_1\sin\varphi)\dot{\varphi}=0,\end{gathered} \tag{7}$$

$$\begin{gathered}a_0'(\alpha_1\cos\varphi-\alpha_2\sin\varphi)\dot{\lambda}(t)+a_0'\Big[(\alpha_3a_0'-\alpha_1a_0\sin\varphi-\alpha_2a_0\cos\varphi)\dot{\psi}-\\-(\alpha_1\sin\varphi+\alpha_2\cos\varphi)\dot{\varphi}\Big]\lambda(t)+(\beta_1'\cos\varphi-\beta_1\sin\varphi)\ddot{\varphi}+(A_2'\cos2\varphi-A_2\sin2\varphi+\\+a_0\beta_1'\cos\varphi-a_0\beta_1\sin\varphi)\ddot{\psi}-(2A_2\cos2\varphi+2A_2'\sin2\varphi+2a_0\beta_1\cos\varphi+2a_0\beta_1'\sin\varphi-\\-a_0'^2A_{33})\dot{\varphi}\dot{\psi}-(a_0A_2\cos2\varphi+a_0A_2'\sin2\varphi+\kappa_0\beta_1\cos\varphi+\kappa_0\beta_1'\sin\varphi+a_0D_0)\dot{\psi}^2-\\-(\beta_1\cos\varphi+\beta_1'\sin\varphi)\dot{\varphi}^2+\left(B_2\cos2\varphi+B_2'\sin2\varphi+a_0\gamma_1\cos\varphi+a_0\gamma_1'\sin\varphi-B_0^*\right)\dot{\varphi}+\\+(a_0B_2\cos2\varphi+a_0B_2'\sin2\varphi+\kappa_0\gamma_1\cos\varphi+\kappa_0\gamma_1'\sin\varphi+a_0E_0)\dot{\psi}+\\+(a_0C_2\cos2\varphi+a_0C_2'\sin2\varphi+\delta_1\cos\varphi+\delta_1'\sin\varphi+G_0)=0.\end{gathered} \tag{8}$$

В дифференциальных уравнениях (6) – (8) введены следующие обозначения

$$\begin{gathered}\beta_0=a_0A_{33},\ \beta_1=a_0'A_{23},\ \beta_1'=a_0'A_{13},\ \gamma_0=a_0B_{33},\ \ \gamma_1=a_0'B_{23},\ \gamma_1'=a_0'B_{13},\ \varepsilon_0=a_0C_{33},\\ \varepsilon_1=a_0'C_{23},\ \varepsilon_1'=a_0'C_{13},\ \ \kappa_0=a_0^2-a_0'^2,\ \kappa_1=a_0's_2-a_0\varepsilon_1,\ \kappa_1'=a_0's_1-a_0\varepsilon_1',\\ \delta_1=\left(2a_0^2-1\right)\varepsilon_1-a_0a_0's_2,\ \delta_1'=\left(2a_0^2-1\right)\varepsilon_1'-a_0a_0's_1,\ A_2=a_0'^2(A_{22}-A_{11})/2,\ A_2'=a_0'^2A_{12},\\ A_0=\left[a_0'^2(A_{11}+A_{22})+2a_0^2A_{33}\right]/2,\ B_2=a_0'^2(B_{22}-B_{11})/2,\ B_2'=a_0'^2B_{12},\\ B_0=\left[a_0'^2(B_{11}+B_{22})+2a_0^2B_{33}\right]/2,\ \ C_2=a_0'^2(C_{22}-C_{11})/2,\ C_2'=a_0'^2C_{12},\\ D_0=a_0'^2(A_{11}+A_{22}-2A_{33})/2,\ E_0=a_0'^2(B_{11}+B_{22}-2B_{33})/2,\ B_0^*=-a_0'^2(B_{11}+B_{22})/2.\\ G_0=a_0'^2\left[2s_3+a_0(C_{11}+C_{22}-2C_{33})\right]/2.\end{gathered}$$

Уравнения (6) – (8) допускают интеграл

$$
\begin{aligned}
&(\alpha_1 a_0' \sin\varphi + \alpha_2 a_0' \cos\varphi + a_0\alpha_3)\lambda(t) + (\beta_1\cos\varphi + \beta_1'\sin\varphi + \beta_0)\dot\varphi + \\
&+(A_2\cos 2\varphi + A_2'\sin 2\varphi + 2a_0\beta_1\cos\varphi + 2a_0\beta_1'\sin\varphi + A_0)\dot\psi - \\
&-(B_2\cos 2\varphi + B_2'\sin 2\varphi + 2a_0\gamma_1\cos\varphi + 2a_0\gamma_1'\sin\varphi + B_0)/2 = k,
\end{aligned}
\tag{9}
$$

который является следствием второго интеграла из системы (3) на инвариантном соотношении (4).

Предположим, что кроме свойства прецессионности движение гиростата обладает свойством изоконичности. То есть уравнения (1), (2) должны допускать инвариантные соотношения (4) и

$$\boldsymbol{\omega}\cdot(\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{c}) = 0, \tag{10}$$

где $\boldsymbol{c}$ – единичный вектор, неизменный в гиростате. Рассмотрим класс прецессионно-изоконических движений в случае, когда прецессия гиростата является прецессией второго типа $(\dot\varphi = n)$. В работе [4] на основе (5), (10) показано, что для таких движений должны выполняться равенства

$$\boldsymbol{\omega} = n\boldsymbol{a} + \dot\psi\boldsymbol{\nu}, \quad \dot\psi = \frac{n}{\gamma_0 + \gamma_1\sin\varphi}, \quad \varphi = nt + \varphi_0, \tag{11}$$

где γ_0, γ_1 – постоянные, удовлетворяющие условию $\gamma_0^2 = 1 + \gamma_1^2$. Пусть величина гиростатического момента во все время движения равна $\lambda(t) = \lambda_0 + \lambda_1\sin\varphi$, где λ_0, λ_1 – некоторые постоянные.

Случай $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{a}$, $a_0 = 0,\ B \neq 0,\ C \neq 0.$ Рассмотрим движение гиростата, когда на него действуют потенциальные и гироскопические силы, векторы $\boldsymbol{\alpha}$ и $\boldsymbol{a}$ совпадают, а собственная ось вращения горизонтальна. Тогда уравнения (6) – (8) примут вид

$$
\begin{aligned}
&\dot\lambda(t) + (\beta_1\cos\varphi + \beta_1'\sin\varphi)\ddot\psi + (A_2\sin 2\varphi - A_2'\cos 2\varphi)\dot\psi^2 + (B_2'\cos 2\varphi - B_2\sin 2\varphi)\dot\psi + \\
&+C_2'\cos 2\varphi - C_2\sin 2\varphi - \kappa_1'\cos\varphi + \kappa_1\sin\varphi = 0,
\end{aligned}
\tag{12}
$$

$$
\begin{aligned}
&n^2(\beta_1'\cos\varphi - \beta_1\sin\varphi) + (A_2\cos 2\varphi + A_2'\sin 2\varphi + A_0)\ddot\psi + \\
&+2n(A_2'\cos 2\varphi - A_2\sin 2\varphi)\dot\psi - n(B_2'\cos 2\varphi - B_2\sin 2\varphi) = 0,
\end{aligned}
\tag{13}
$$

$$
\begin{aligned}
&\lambda(t)\dot\psi + (A_2'\cos 2\varphi - A_2\sin 2\varphi)\ddot\psi - n(2A_2\cos 2\varphi + 2A_2'\sin 2\varphi - A_{33})\dot\psi - \\
&-n^2(\beta_1\cos\varphi + \beta_1'\sin\varphi) - (\kappa_0\beta_1\cos\varphi + \kappa_0\beta_1'\sin\varphi)\dot\psi^2 + n(B_2\cos 2\varphi + B_2'\sin 2\varphi - B_0^*) + \\
&+(\kappa_0\gamma_1\cos\varphi + \kappa_0\gamma_1'\sin\varphi)\dot\psi + (\delta_1\cos\varphi + \delta_1'\sin\varphi + G_0) = 0.
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Интеграл моментов из (9) представим в виде

$$n(\beta_1\cos\varphi + \beta_1'\sin\varphi) + (A_2\cos 2\varphi + A_2'\sin 2\varphi + A_0)\dot\psi - (B_2\cos 2\varphi + B_2'\sin 2\varphi + B_0)/2 = k, \tag{15}$$

Легко видеть, что (15) является следствием равенства (13). Поэтому подставим в соотношения (12), (14), (15) второе равенство из (11) и потребуем, чтобы они были тождествами по φ. Из полученной системы равенств на параметры задачи вытекают условия существования прецессионно-изоконического движения второго типа в задаче о движении гиростата с переменным гиростатическим моментом

$$
\begin{aligned}
&a_0 = 0,\ A_{12} = 0,\ A_{23} = 0,\ A_{13} = \sqrt{A_{11}(A_{22} - A_{11})},\ B_{12} = 0,\ B_{23} = 0,\ C_{12} = C_{13} = C_{23} = 0, \\
&C_{11} = C_{22},\ \gamma_0 = \sqrt{A_{22}/A_{11}},\ \gamma_1 = \sqrt{(A_{22} - A_{11})/A_{11}},\ \ 2k = -B_{22} + 2n\sqrt{A_{11}A_{22}}, \\
&s_2 = 0,\ \ \lambda_0 = n(A_{22} - A_{11} - A_{33}) - (s_3 + nB_{22})\sqrt{A_{22}/A_{11}}/n,\ \ \lambda_1 = s_1/n, \\
&n = \sqrt{A_{22} - A_{11}}\left(s_1\sqrt{A_{11}} + s_3\sqrt{A_{22} - A_{11}}\right)\Big/\left[B_{22}(A_{11} - A_{22}) + B_{13}A_{13}\right],
\end{aligned}
\tag{16}
$$

Можно показать, что четвертое условие не противоречит известным условиям на компоненты тензора инерции: $A_{11}A_{33} - A_{13}^2 > 0$ и $|A_{13}| \leq A_{22}/2$.

Решение системы уравнений (1), (2) представимо в виде

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{\omega} = n\boldsymbol{a} + \dot\psi\boldsymbol{\nu},\ \boldsymbol{\nu} = (\sin(nt + \varphi_0),\ \cos(nt + \varphi_0),\ 0), \\
&\lambda(\mathrm{t}) = \lambda_0 + \lambda_1\sin(nt + \varphi_0), \quad \dot\psi = \frac{n}{\gamma_0 + \gamma_1\sin\varphi},
\end{aligned}
\tag{17}
$$

Если параметры задачи удовлетворяют условию $B_{22}\left(A_{11}-A_{22}\right)+B_{13}A_{13}\neq 0$, то скорость собственного вращения принимает фиксированное значение. Если левая часть этого неравенства равна нулю, то необходимо требовать равенства $s_1\sqrt{A_{11}}+s_3\sqrt{A_{22}-A_{11}}=0$. В этом случае n принимает произвольное значение. Следовательно, решение уравнения (1),(2) в первом случае зависят от одной произвольной постоянной φ_0, а во втором случае – от двух произвольных постоянных φ_0, n

Из равенств (16),(17) видно, что решение уравнений движения тяжелого гиростата при отсутствии потенциальных и гироскопических сил $\left(B=0,\ C=0\right)$, которое характеризуется прецессионно-изоконическим движением второго типа при условии совпадения векторов $\boldsymbol{\alpha}$ и $\boldsymbol{a}$ и горизонтальности оси собственного вращения можно представить в виде (17), а условиями существования такого решения служат соотношения

$$a_0=0,\ A_{12}=0,\ A_{23}=0,\ A_{13}=\sqrt{A_{11}\left(A_{22}-A_{11}\right)},\ \gamma_0=\sqrt{A_{22}/A_{11}},\ \gamma_1=\sqrt{\left(A_{22}-A_{11}\right)/A_{11}},\ n=k\Big/\sqrt{A_{11}A_{22}},$$
$$\lambda_0=k\left(A_{22}-A_{11}-A_{33}\right)\Big/\sqrt{A_{11}A_{22}}-s_3A_{22}/k,\ \ \lambda_1=s_1\sqrt{A_{11}A_{22}}\Big/k,\ \ s_1\sqrt{A_{11}}+s_3\sqrt{A_{22}-A_{11}}=0,\ \ s_2=0. \qquad (18)$$

Поскольку k – произвольная постоянная, то решение (17) при условиях (18) зависят от двух произвольных постоянных φ_0, k. В этом состоит отличие построенных решений.

Дальнейшие исследования показали, что если ось собственного вращения гиростата не горизонтальна или векторы $\boldsymbol{\alpha}$ и $\boldsymbol{a}$ не совпадают, то прецессионно-изоконические движения второго типа в задаче о движении гиростата с переменным гиростатическим моментом динамически невозможны.

РЕЗЮМЕ

Отримані умови існування прецесійно-ізоконічних рухів другого типу в задачі про рух гіростата зі змінним гіростатичним моментом. Отримані нові розв’язки рівнянь руху гіростата із заданою властивістю.

Ключові слова: гіростат, гіростатичний момент, прецесії, ізоконічні рухи.

SUMMARY

The conditions of existence of precession-isoconic motions of a rigid body with variable gyrostatic moment are investigated. The new solutions of equation of gyrostat’s motions with pre-set property are obtained.

Keywords: gyrostat, gyrostatic moment, precessions, isoconic motions.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Харламов П. В. Кинематическое истолкование движения тела, имеющего неподвижную точку / П.В. Харламов // Прикладная математика и механика. – 1964. – Т.28, – Вып. 3. – С. 158-159.
2. Харламов П. В. Лекции по динамике твердого тела / П.В. Харламов. – Новосибирск: Изд–во Новосиб. университета. – 1965. – 221 с.
3. Горр Г.В. Классические задачи динамики твердого тела / Г.В. Горр, Л.В. Кудряшова., Л.А. Степанова // – К.: Наук. думка. – 1978. – 296 с.
4. Горр Г.В. Прецессионные движения в динамике твердого тела и в динамике систем связных твердых тел / Г.В. Горр, А.В. Мазнев, Е.К. Щетинина. – Донецк: ДонНУ, 2009. – 222 с.
5. Горр Г.В. Динамика гиростата, имеющего неподвижную точку / Г.В. Горр, А.В. Мазнев // – Донецк: ДонНУ, 2010. – 364 с.
6. Харламов П. В. Об уравнениях движения системы твердых тел / П.В. Харламов // Механика твердого тела. – 1972. – Вып. 4. – С. 52-73.
7. Liouville J. Dèveloppements sur un chapitre de la Mècanique de Poisson / J. Liouville // J. math. pures et appl. – 1858. – V.3. – P. 1-25.
8. Volterra V. Sur la théorie des variations des latitudes / V. Volterra // Acta. Math. – 1899. – Vol. 22. – P. 201-358.
9. Жуковский Н.Е. О движении твердого тела, имеющего полости, наполненные однородной капельной жидкостью / Н.Е. Жуковский. // Собр. соч. М.;Л.: Гостехиздат. – 1949. – Т. 2. – С.152-309.
10. Волкова О.С. Равномерные вращения вокруг наклонной оси твердого тела, несущего маховик / О.С. Волкова // Механика твердого тела. – 2008. – Вып. 38. – С.80-86.
11. Волкова О.С. Регулярные прецессии тяжелого гиростата вокруг вертикальной оси / О.С. Волкова // Труды ин-та прикладной математики и механики НАН Украины. – 2009. – Т. 19. – С.30-35.
12. Волкова О.С. Маятниковые вращения тяжелого гиростата с переменным гиростатическим моментом / О.С. Волкова, И.Н. Гашененко // Механика твердого тела. – 2009. – Вып. 39. – С.42-49.
13. Мазнев А.В. Прецессионные движения гиростата с переменным гиростатическим моментом под действием потенциальных и гироскопических сил / А.В. Мазнев // Механика твердого тела. – 2010. – Вып. 40. – С. 91–104.
14. Yehia H.M. On the motion of a rigid body acted upon by potential and gyroscopic forces, I: The equations of motion and their transformations / H.M. Yehia // J. Mecan. Theor. Appl. – 1986. – Vol. 5, No 5. – P. 742-745.

Поступила в редакцию 03.11.2011 г.

УДК 539.3

ПЛОСКА ЗАДАЧА ТЕОРІЇ ПРУЖНОСТІ АНІЗОТРОПНОГО ТІЛА З ПЕРІОДИЧНИМИ СИСТЕМАМИ ТОНКИХ НЕОДНОРІДНОСТЕЙ

Я. М. Пастернак
Луцький національний технічний університет, м. Луцьк

У роботі побудовано систему інтегральних рівнянь методу граничних елементів для дослідження періодичних систем тонких включень в анізотропному тілі. На їхній основі отримано низку замкнутих розв'язків задач для періодичних систем тріщин і жорстких плівкових включень в анізотропному матеріалі. Реалізовано числові процедури запропонованого методу та отримано значення узагальнених коефіцієнтів інтенсивності напружень для періодичних систем тонких пружних включень.

Ключові слова: тонке пружне включення, періодичний, анізотропний, метод граничних елементів, узагальнені коефіцієнти інтенсивності напружень

Вступ. Усі матеріали, зокрема й конструкційні, зазвичай, містять багато дефектів у формі тріщин та тонких включень. При дослідженні взаємодії таких дефектів, як правило, зосереджуються на вивченні регулярно розташованих неоднорідностей, що дає можливість оцінити з позицій механіки руйнування граничне навантаження тіла із системою дефектів. Доволі часто такі системи мають геометричну та силову періодичність.

Періодичні системи тріщин в ізотропному матеріалі розглянуто у численній кількості статей, основні результати яких відображено у монографіях [1 – 3]. Значно менше робіт стосується періодичних систем тріщин в анізотропному середовищі. Серед них можна відзначити праці [4 – 6].

Періодичні системи тонких жорстких включень розглянуті у роботах [7, 8]. Системи тонких пружних включень в ізотропному середовищі вивчені у працях [3, 9 – 11]. Періодичні задачі для глобулярних криволінійних включень в анізотропному тілі досліджені у монографії [12]. Тривимірна задача для періодичної системи включень розглянута за допомогою методу граничних елементів у праці [13]. Взаємодія регулярно розташованих тонких пружних включень в анізотропному середовищі мало вивчена і потребує додаткового дослідження.

Метою цієї роботи є побудова загального підходу, що дав би можливість розглядати періодичні системи тонких неоднорідностей в ізотропних та анізотропних тілах. Як засіб числового розв'язування сингулярних інтегральних рівнянь відповідних задач вибрано модифікацію [14, 15] методу граничних елементів, що засвідчила свою ефективність при вивченні тонких включень в анізотропних і п'єзоелектричних матеріалах, зокрема, й обчисленні коефіцієнтів інтенсивності напружень біля вістря включення.

Формулювання задачі. Розглянемо плоску задачу теорії пружності для безмежного анізотропного середовища із системою тонких пружних включень. Відповідно до принципу спряження континуумів різної вимірності [3] останні моделюватимемо лініями Γ_s $\left(s\in\mathbb{Z}\right)$ розриву полів напружень та переміщень. У цьому випадку інтегральні рівняння задачі для тіла з лініями стрибків набудуть вигляду [14]:

$$\frac{1}{2}\Sigma u_i^k\left(\mathbf{y}\right)=\sum_s\left[\mathrm{RPV}\int_{\Gamma_s^+}U_{ij}\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\Sigma t_j^s(\mathbf{x})d\Gamma\left(\mathbf{x}\right)-\mathrm{CPV}\int_{\Gamma_s^+}T_{ij}\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\Delta u_j^s(\mathbf{x})d\Gamma\left(\mathbf{x}\right)\right]+u_i^\infty\left(\mathbf{y}\right),$$

$$\frac{1}{2}\Delta t_i^k\left(\mathbf{y}\right)=n_j^+\left(\mathbf{y}\right)\sum_s\left[\mathrm{CPV}\int_{\Gamma_s^+}D_{ijk}\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\Sigma t_k^s(\mathbf{x})d\Gamma\left(\mathbf{x}\right)-\mathrm{HPV}\int_{\Gamma_s^+}S_{ijk}\left(\mathbf{x},\mathbf{y}\right)\Delta u_k^s(\mathbf{x})d\Gamma\left(\mathbf{x}\right)\right]+ \quad (1)$$
$$+n_j^+\left(\mathbf{y}\right)\sigma_{ij}^\infty,$$

де $\mathbf{y}\in\Gamma_k$ $\left(k\in\mathbb{Z}\right)$ – точка колокації; u_i, t_i – компоненти векторів переміщень та напружень; $\Delta u_i=u_i^+-u_i^-$, $\Delta t_i=t_i^+-t_i^-$, $\Sigma u_i=u_i^++u_i^-$, $\Sigma t_i=t_i^++t_i^-$; $t_i^\pm=\sigma_{ij}^\pm n_j^\pm$ ($n_j^\pm$ – компоненти векторів зовнішніх нормалей $\mathbf{n}^\pm$ до утворених розрізом Γ_s поверхонь $\Gamma_s^\pm$); σ_{ij} – компоненти тензора напружень; знаками «+» та «–» позначено величини, що стосуються поверхонь Γ_s^+ та Γ_s^-; σ_{ij}^∞, u_i^∞ – задані на безмежності напруження та відповідне поле переміщень. Індекси у позначеннях відповідають проекціям векторів на осі глобальної системи координат Ox_1x_2. У формулах прийняте правило Айнштайна підсумовування за індексом, що повторюється. Ядра інтегральних рівнянь для плоскої задачі теорії пружності анізотропного тіла відповідно до залежностей формалізму Stroh [16] мають вигляд [14]:

$$U_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{y})=\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\left[A_{i\alpha}A_{j\alpha}\ln Z_\alpha(\mathbf{x}-\mathbf{y})\right],\quad T_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{y})=\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\left[A_{i\alpha}B_{j\alpha}\frac{(n_2-n_1p_\alpha)}{Z_\alpha(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\right],$$

$$D_{ijk}(\mathbf{x},\mathbf{y})=C_{ijpm}\frac{\partial U_{pk}}{\partial y_m}=-\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\left[\left(\delta_{2j}-\delta_{1j}p_\alpha\right)B_{i\alpha}A_{k\alpha}\frac{1}{Z_\alpha(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\right], \tag{2}$$

$$S_{ijk}(\mathbf{x},\mathbf{y})=C_{ijpm}\frac{\partial T_{pk}}{\partial y_m}=\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\left[\left(\delta_{2j}-\delta_{1j}p_\alpha\right)B_{i\alpha}B_{k\alpha}\frac{n_2-n_1p_\alpha}{\left[Z_\alpha(\mathbf{x}-\mathbf{y})\right]^2}\right],\quad Z_\alpha(\mathbf{x})=x_1+p_\alpha x_2.$$

Комплексні сталі p_α (із додатною уявною частиною) та матриці $\mathbf{A}\equiv[A_{i\alpha}]=[\mathbf{a}_\alpha]$, $\mathbf{B}\equiv[B_{i\alpha}]=[\mathbf{b}_\alpha]$ визначаються із таких рівнянь та умов нормування [16]:

$$\left\{\mathbf{Q}+p_\alpha\left(\mathbf{R}+\mathbf{R}^{\mathrm{T}}\right)+p_\alpha^2\mathbf{T}\right\}\mathbf{a}_\alpha=0,\ \mathbf{b}_\alpha=\left(\mathbf{R}^{\mathrm{T}}+p_\alpha\mathbf{T}\right)\mathbf{a}_\alpha,\ \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}+\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{B}=\mathbf{I},\ \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\overline{\mathbf{A}}+\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\overline{\mathbf{B}}=\mathbf{0}, \tag{3}$$

де $Q_{ik}=C_{i1k1}$, $R_{ik}=C_{i1k2}$, $T_{ik}=C_{i2k2}$; C_{ijkm} – компоненти симетричного тензора ($C_{ijkm}=C_{ijkm}=C_{kmij}=C_{ijmk}$) жорсткості (пружні сталі), означені виразом закону Гука $\sigma_{ij}=C_{ijkm}u_{k,m}$:

$$C_{1111}=c_{11},\ C_{1122}=c_{12},\ C_{1121}=c_{16},\ C_{2222}=c_{22},\ C_{2212}=c_{26},\ C_{1212}=c_{66}.$$

Для плоского напруженого стану сталі $c_{ij}=c_{ji}$ дорівнюють

$$c_{11}=\frac{a_{22}a_{66}-a_{26}^2}{\Delta},\ c_{12}=\frac{a_{16}a_{26}-a_{12}a_{66}}{\Delta},\ c_{16}=\frac{a_{12}a_{26}-a_{16}a_{22}}{\Delta},$$
$$c_{22}=\frac{a_{11}a_{66}-a_{16}^2}{\Delta},\ c_{26}=\frac{a_{16}a_{12}-a_{11}a_{26}}{\Delta},\ c_{66}=\frac{a_{11}a_{22}-a_{12}^2}{\Delta};\qquad \Delta=\begin{vmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{16}\\a_{12}&a_{22}&a_{26}\\a_{16}&a_{26}&a_{66}\end{vmatrix}.$$

Тут a_{ij} – коефіцієнти деформації (модулі податності) [17]. При вивченні плоскої деформації сталі a_{ij} необхідно замінити величинами [17]

$$\beta_{ij}=a_{ij}-a_{i3}a_{j3}/a_{33}\quad (i,j=1,2,4,5,6).$$

Для розв’язування сформульованої задачі до інтегральних рівнянь (1) слід долучити співвідношення моделі тонкого включення

$$\Sigma u_i^k(\mathbf{y})=F_{ik}^u\left(\mathbf{y},\Delta u_j^k,\Sigma t_j^k\right),\ \Delta t_i^k(\mathbf{y})=F_{ik}^t\left(\mathbf{y},\Delta u_j^k,\Sigma t_j^k\right), \tag{4}$$

які пов’язують між собою розриви (стрибки) та середні значення векторів напружень і переміщень на протилеглих берегах неоднорідності. Конкретизацію виразів (4) можна знайти у роботах [14, 18].

Лінійна періодичність. У випадку періодичної системи ідентичних тонких включень чи їхніх груп, а також існування аналогічної повторюваності навантажувальних чинників, унаслідок трансляційної симетрії можна стверджувати, що розриви напружень Σt_i^s та переміщень Δu_i^s є однаковими для кожного включення. Тому систему рівнянь (1) можна записати у формі

$$\begin{gathered}\frac{1}{2}\Sigma u_i^0(\mathbf{y})=\mathrm{RPV}\int_{\Gamma_0^+}U_{ij}^{\mathrm{p}}(\mathbf{x},\mathbf{y})\Sigma t_j^0(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x})-\mathrm{CPV}\int_{\Gamma_0^+}T_{ij}^{\mathrm{p}}(\mathbf{x},\mathbf{y})\Delta u_j^0(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x})+u_i^\infty(\mathbf{y}),\\ \frac{1}{2}\Delta t_i^0(\mathbf{y})=n_j^+(\mathbf{y})\left[\mathrm{CPV}\int_{\Gamma_0^+}D_{ijk}^{\mathrm{p}}(\mathbf{x},\mathbf{y})\Sigma t_k^0(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x})-\mathrm{HPV}\int_{\Gamma_0^+}S_{ijk}^{\mathrm{p}}(\mathbf{x},\mathbf{y})\Delta u_k^0(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x})+\sigma_{ij}^\infty\right],\end{gathered} \tag{5}$$

де ядра $\mathbf{K}^{\mathrm{p}}=\left[U_{ij}^{\mathrm{p}},T_{ij}^{\mathrm{p}},D_{ijk}^{\mathrm{p}},S_{ijk}^{\mathrm{p}}\right]$ мають такий загальний вигляд

$$\mathbf{K}^{\mathrm{p}}(\mathbf{x},\mathbf{y})=\sum_{s=-\infty}^{\infty}\mathbf{K}(\mathbf{x}+s\boldsymbol{\omega},\mathbf{y}). \tag{6}$$

Тут $\boldsymbol{\omega}=\left(\omega_{x_1},\omega_{x_2}\right)$ – вектор періоду.

Відповідно до (2) та (6) у випадку періодичної задачі для системи тонких включень необхідно обчислити суми

$$S_{1\alpha}^{\mathrm{p}} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \ln\left(u_\alpha + s\omega_\alpha\right), \quad S_{2\alpha}^{\mathrm{p}} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{u_\alpha + s\omega_\alpha} = \frac{dS_{1\alpha}^{\mathrm{p}}}{du_\alpha}, \quad S_{3\alpha}^{\mathrm{p}} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\left[u_\alpha + s\omega_\alpha\right]^2} = -\frac{dS_{2\alpha}^{\mathrm{p}}}{du_\alpha}, \quad (7)$$

де $u_\alpha = Z_\alpha\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}\right)$, $\omega_\alpha = Z_\alpha\left(\boldsymbol{\omega}\right)$.

Сума $S_{1\alpha}^{\mathrm{p}}$ розходиться в звичайному сенсі. Проте її можна подати у вигляді головної частини та деякої безмежної сталої $C_{\infty\alpha}^{\mathrm{p}}$. Тому запишемо суму $S_{1\alpha}^{\mathrm{p}}$ у формі

$$S_{1\alpha}^{\mathrm{p}} = \ln\left[\frac{u_\alpha \pi}{\omega_\alpha}\prod_{s=1}^{\infty}\left(1-\left(\frac{u_\alpha}{s\omega_\alpha}\right)^2\right)\right] + C_{\infty\alpha}^{\mathrm{p}}, \quad (8)$$

де

$$C_{\infty\alpha}^{\mathrm{p}} = \ln\left(\frac{\omega_\alpha}{\pi}\right) + \sum_{s\in\mathbb{Z}\backslash 0} \ln\left(s\omega_\alpha\right).$$

Відповідно до формули (4.22.1) [19]

$$\sin z = z\prod_{s=1}^{\infty}\left(1-\left(\frac{z}{s\pi}\right)^2\right),$$

тобто, вираз (8) можна записати так:

$$S_{1\alpha}^{\mathrm{p}} = \ln\sin\left(\frac{u_\alpha \pi}{\omega_\alpha}\right) + C_{\infty\alpha}^{\mathrm{p}}. \quad (9)$$

Диференціюючи двічі вираз (9) за змінною u_α, отримаємо

$$S_{2\alpha}^{\mathrm{p}} = \frac{\pi}{\omega_\alpha}\mathrm{ctg}\left(\frac{u_\alpha \pi}{\omega_\alpha}\right), \quad S_{3\alpha}^{\mathrm{p}} = \left(\frac{\pi}{\omega_\alpha}\right)^2 \mathrm{cosec}^2\left(\frac{u_\alpha \pi}{\omega_\alpha}\right). \quad (10)$$

Отже, для розв’язування періодичних стосовно тонких включень задач в ядрах (2) для скінченної кількості включень необхідно зробити такі заміни:

$$\ln Z_\alpha\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}\right) \to S_{1\alpha}^{\mathrm{p}}, \quad \left[Z_\alpha\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}\right)\right]^{-1} \to S_{2\alpha}^{\mathrm{p}}, \quad \left[Z_\alpha\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}\right)\right]^{-2} \to S_{3\alpha}^{\mathrm{p}}. \quad (11)$$

За виконання умови $\int_{\Gamma_s^+} \Sigma t_i^s \, d\Gamma = 0$ статично урівноваженого навантажування розрізів Γ_s (фактично рівноваги кожного із відокремлених включень) відповідно до (5) стала $C_{\infty\alpha}^{\mathrm{p}}$ не впливатиме на розв’язок задачі, тому при розрахунках її можна не брати до відома.

При числовому розв’язуванні інтегральних рівнянь (5) періодичної задачі можуть виникнути ускладнення із належним обчисленням ядра U_{ij}^{p}, які зумовлені багатозначністю логарифма комплексно-значної функції. Для уникнення подібних явищ слід зафіксувати вибір певної вітки функції логарифма і потім стежити, щоб аргумент функції під логарифмом за її неперервної зміни теж змінювався неперервно.

Розв’язування інтегральних рівнянь задачі за схемою методу граничних елементів. Систему крайових інтегральних рівнянь (5) розв’язуватимемо методом граничних елементів [14, 15, 20]. Для цього криву Γ_0 апроксимуємо за допомогою n прямолінійних відрізків – граничних елементів Γ_q. На кожному елементі виберемо по 3 вузлові точки: одну в центрі, а дві інші – на відстані $1/3$ довжини елемента по обидва боки від центральної (розривний тривузловий граничний елемент). Крайові функції Σt_j^0 та Δu_j^0 апроксимуємо на елементі за їхніми вузловими значеннями:

$$\left[\Sigma t_j^0, \Delta u_j^0\right]\left(\xi\right) \approx \sum_{p=1}^{3}\left[\Sigma t_j^{q,p}, \Delta u_j^{q,p}\right]\phi_p\left(\xi\right). \quad (12)$$

Тут ξ – параметр розташування точки на елементі, означений на проміжку $-1 \le \xi \le 1$ так: $d\Gamma_q = L_q/2\, d\xi = J_q d\xi$, де J_q – модуль якобіана заміни змінних на елементі Γ_q.

У цей спосіб система сингулярних інтегральних рівнянь (5) сумісно з моделлю (4) тонкого включення зводиться до системи лінійних алгебричних рівнянь стосовно шуканих вузлових значень $\Sigma t_j^{q,p}$, $\Delta u_j^{q,p}$ крайових функцій Σt_j^0 та Δu_j^0.

Базові функції для елементів, що не прилягають до торців неоднорідності, виберемо для (12) як і в [20] у вигляді поліномів Лагранжа для системи вузлів $\xi_p = [-2/3; 0; 2/3]$ тривузлового розривного граничного елемента:

$$\phi_1 = \xi\left(\frac{9}{8}\xi - \frac{3}{4}\right),\ \phi_2 = \left(1 - \frac{3}{2}\xi\right)\left(1 + \frac{3}{2}\xi\right),\ \phi_3 = \xi\left(\frac{9}{8}\xi + \frac{3}{4}\right). \tag{13}$$

Для підвищення точності методу та зручності визначення узагальнених коефіцієнтів інтенсивності напружень (КІН) згідно з [14, 15] введемо спеціальні тривузлові розривні граничні елементи, що моделюють приторцеві ділянки тонкого включення, а відповідні їм базові функції задамо у вигляді:

- для розривів переміщень

$$\phi_p^{\Delta u} = \Phi_{p1}^{\Delta u}\sqrt{\rho} + \Phi_{p2}^{\Delta u}\rho + \Phi_{p3}^{\Delta u}\rho^{3/2} \quad (p = 1,2,3); \tag{14}$$

- для стрибків напружень

$$\phi_p^{\Sigma t} = \Phi_{p1}^{\Sigma t}\rho^{-1/2} + \Phi_{p2}^{\Sigma t} + \Phi_{p3}^{\Sigma t}\sqrt{\rho} \quad (p = 1,2,3). \tag{15}$$

Тут $\rho = 1 \pm \xi$; $\Phi_{pj}^{\Delta u}$, $\Phi_{pj}^{\Sigma t}$ – матриці сталих, що визначаються з рівнянь

$$\phi_p(\xi_p) = 1,\ \phi_p(\xi_{j \ne p}) = 0,$$

де ξ_p – координати вузлових точок на граничному елементі.

Запропоновані базові функції (14), (15) дають можливість безпосередньо та з великою точністю визначати узагальнені КІН за формулами [14]

$$\mathbf{k}^{(1)} = \lim_{s \to 0}\sqrt{\frac{\pi}{8s}}\mathbf{L}\cdot\Delta\mathbf{u}(s),\ \mathbf{k}^{(2)} = -\lim_{s \to 0}\sqrt{\frac{\pi s}{2}}\mathbf{S}^{\mathrm{T}}\cdot\Sigma\mathbf{t}(s), \tag{16}$$

де $\mathbf{k}^{(i)} = [K_{2i}, K_{1i}]^{\mathrm{T}}$, $\Delta\mathbf{u} = [\Delta u_1, \Delta u_2]^{\mathrm{T}}$, $\Sigma\mathbf{t} = [\Sigma t_1, \Sigma t_2]^{\mathrm{T}}$; s – відстань до вершини лінії Γ_0; K_{ij} – узагальнені КІН, причому у випадку тріщини $K_{11} = K_{\mathrm{I}}$, $K_{21} = K_{\mathrm{II}}$, $K_{12} = K_{22} = 0$, а K_{I}, K_{II} – класичні КІН теорії тріщин; $\mathbf{L} = -2\sqrt{-1}\mathbf{B}\mathbf{B}^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{S} = \sqrt{-1}\left(2\mathbf{A}\mathbf{B}^T - \mathbf{I}\right)$ – дійсні тензори Barnett–Lothe [16], що залежать лише від властивостей матеріалу і при повертанні осей координат, в яких обчислюються пружні сталі, їхні компоненти теж змінюються за тензорним законом.

Оскільки при підсумовуванні ядер періодичної задачі їхні особливості не змінюються, то для числового визначення слабо-, сильно- і гіперсингулярних інтегралів у цих випадках також можна використовувати запропоновані у роботах [14, 15] квадратури та поліноміальні відображення, що згладжують підінтегральний вираз на кінцях проміжку інтегрування. Тоді результуюча система лінійних алгебричних рівнянь набуде вигляду

$$\begin{cases} \dfrac{1}{2}F_{i0}^u\left(\mathbf{x}^{s,r}\right) = \displaystyle\sum_{q=1}^{n}\sum_{p=1}^{3}\sum_{j=1}^{2}\left[\Sigma t_j^{q,p}U_{ij}^{qpsr} - \Delta u_j^{q,p}T_{ij}^{qpsr}\right] + u_i^{\infty}\left(\mathbf{x}^{s,r}\right), \\ \dfrac{1}{2}F_{i0}^t\left(\mathbf{x}^{s,r}\right) = \displaystyle\sum_{q=1}^{n}\sum_{p=1}^{3}\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{2}n_j^+\left(\mathbf{x}^{s,r}\right)\left[\Sigma t_k^{q,p}D_{ijk}^{qpsr} - \Delta u_k^{q,p}S_{ijk}^{qpsr}\right] + \sum_{j=1}^{2}n_j^+\left(\mathbf{x}^{s,r}\right)\sigma_{ij}^{\infty}\left(\mathbf{x}^{s,r}\right), \end{cases} \tag{17}$$

де інтеграли $\left\{U_{ij}, T_{ij}, D_{ijk}, S_{ijk}\right\}^{qpsr} = \int_{-1}^{1}\left\{U_{ij}^{\mathrm{p}}, T_{ij}^{\mathrm{p}}, D_{ijk}^{\mathrm{p}}, S_{ijk}^{\mathrm{p}}\right\}\left(\mathbf{x}^q(\xi), \mathbf{x}^{s,r}\right)\phi^p(\xi)J_q d\xi$ обчислюються за описаною у працях [14, 15] методикою.

Числовий аналіз прикладів

1. Періодичні системи неоднорідностей в ізотропному матеріалі. Для верифікації розробленого підходу розглянемо плоский напружений стан ізотропної пластини із системами тріщин та жорстких включень, для яких відомі точні чи наближені замкнуті розв'язки. При дослідженні ізотропного матеріалу засобами формалізму Stroh [16] необхідно враховувати, що при розв'язуванні рівнянь (3) отримуємо кратні корені [16] і ядра (2) вироджуються, внаслідок чого за допомогою формального підставляння у побудовані залежності сталих ізотропного матеріалу належні числові результати отримати не вдається. Тому ізотропний матеріал моделюватимемо слабо анізотропним [6] із такими модулями податності:

$$a_{11} = a_{22} = 1/E\,,\;\; a_{12} = -\nu/E\,,\;\; a_{16} = 0\,,\;\; a_{66} = 1/G\,,\;\; a_{26} = 10^{-3}/G\,, \tag{18}$$

де $E = 2G(1+\nu)$ – модуль пружності; G – модуль зсуву; ν – коефіцієнт Пуассона. Ненульове, але й невелике порівняно з іншими сталими значення величини a_{26} забезпечує відмінність коренів p_α характеристичного рівняння (3), а також дає можливість вважати матеріал достатньо близьким до ізотропного.

1.1. Періодична система співвісних тріщин. У випадку періодичної системи співвісних тріщин (вектор періоду $\boldsymbol{\omega} = (d,0)$ паралельний до осі неоднорідності), розташованих уздовж осі Ox_1 обраної системи координат, коефіцієнт інтенсивності напружень $K_{11} = K_{\mathrm{I}}$ за навантаження $\sigma_{22}^{\infty} = p$, $\sigma_{11}^{\infty} = \sigma_{12}^{\infty} = 0$ означений залежністю (III.34) [1]

$$K_{11} = K_{11}^{*} p\sqrt{\pi a}\,,\;\; K_{11}^{*} = \sqrt{\frac{d}{\pi a}\operatorname{tg}\frac{\pi a}{d}}\,, \tag{19}$$

де $2a$ – довжина тріщин; d – відстань між їхніми середніми точками. Зіставимо результати обчислення нормованого КІН K_{11}^{*} за формулою (19) та за допомогою розробленого підходу для різних значень параметра $\lambda = 2a/d$. У МГЕ при цьому використано 21 граничний елемент. Результати розрахунків подано в табл. 1.

Таблиця 1

Нормований КІН K_{11}^{*} для системи співвісних тріщин

λ	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
K_{11}^{*}, (19)	1,0041	1,01698	1,0398	1,0753	1,1284	1,2085	1,3360	1,56497	2,1133
K_{11}^{*}, МГЕ	1,0045	1,01734	1,0402	1,0757	1,1287	1,2089	1,3367	1,56705	2,1254

Табл. 1 засвідчує добру узгодженість результатів розрахунку КІН тріщини запропонованим підходом, оскільки навіть при настільки малій кількості граничних елементів відносна похибка обчислень не перевищує 0,6 %.

1.2. Періодична система співвісних жорстких включень. Відповідно до (VI.38) [7] у разі періодично розташованої уздовж осі Ox_1 системи жорстких плівкових включень узагальнений коефіцієнт інтенсивності напружень K_{12} дорівнює

$$K_{12} = \frac{\kappa-1}{8\kappa}\left[(1-\kappa)\left(\sigma_{22}^{\infty}+\sigma_{11}^{\infty}\right)+2\left(\sigma_{22}^{\infty}-\sigma_{11}^{\infty}\right)\right]\sqrt{d\operatorname{tg}\frac{\pi a}{d}}\,, \tag{20}$$

де $\kappa = (3-\nu)/(1+\nu)$ – стала Мусхелішвілі для плоского напруженого стану. У формулі (20) враховано зв'язок між КІН k_1 [7] та узагальненим КІН K_{12}: $K_{12} = k_1(\kappa-1)\sqrt{\pi}/(2\kappa)$. Результати обчислень нормованого коефіцієнта інтенсивності напружень $K_{12}^{*} = K_{12}/\left(p\sqrt{\pi a}\right)$ для навантаження $\sigma_{22}^{\infty} = p$, $\sigma_{11}^{\infty} = \sigma_{12}^{\infty} = 0$ та сталої Мусхелішвілі $\kappa = 2$ подано в табл. 2. Як і в попередньому прикладі, у МГЕ використано 21 граничний елемент.

Таблиця 2

Безрозмірний узагальнений КІН K_{12}^{*} для системи співвісних жорстких включень

λ	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
K_{12}^{*}, (20)	0,06276	0,06356	0,06499	0,06721	0,07052	0,07553	0,0835	0,0978	0,1321
K_{12}^{*}, МГЕ	0,06276	0,06357	0,06499	0,06721	0,07054	0,07556	0,0836	0,0981	0,1336

Табл. 2 засвідчує, що у випадку дослідження запропонованим підходом періодичних систем жорстких включень похибка обчислень не перевищує 1 %.

2. Періодичні системи співвісних тріщин та жорстких включень в анізотропному матеріалі. Розглянемо періодичну систему розташованих уздовж осі Ox_1 на відстані d ($\boldsymbol{\omega} = (d, 0)$) одне від одного співвісних тріщин (жорстких включень), що перебувають під впливом однорідного поля напружень на нескінченності. У цьому разі інтегральні рівняння (5) набудуть вигляду

- для системи тріщин

$$\frac{1}{\pi}\int_{-a}^{a} \Delta u_{i,1}\left[\frac{\pi}{d}\operatorname{ctg}\left(\frac{\pi(x-\xi)}{d}\right)\right]dx = -2L_{ij}^{-1}\sigma_{j2}^{\infty}, \tag{21}$$

- для системи жорстких плівкових включень

$$\frac{1}{\pi}\int_{-a}^{a} \Delta t_i\left[\frac{\pi}{d}\operatorname{ctg}\left(\frac{\pi(x-\xi)}{d}\right)\right]dx = 2H_{ij}^{-1}c_j, \tag{22}$$

де $c_j = -\delta_{j2}\omega^0 - u_{j,1}^{\infty}$; $u_{j,1}^{\infty}$ – сталі деформації однорідного середовища без включень; ω^0 – малий кут повертання включення (додатний напрям вибрано за стрілкою годинника). Із умови рівності нулю головного момента випливає, що

$$\omega^0 = -H_{2j}^{-1}u_{j,1}^{\infty}\Big/H_{22}^{-1}. \tag{23}$$

Відповідно до [7] розв’язок рівнянь типу (21), (22) має вигляд

$$k_i^{(1)} = \sigma_{i2}\sqrt{\pi a}K^0,\ \ \mathbf{k}^{(2)} = -\sqrt{\pi a}\mathbf{S}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}^{-1}\mathbf{c}K^0,\ \ K^0 = \sqrt{\operatorname{tg}(z)/z}, \tag{24}$$

де $z = \pi\lambda/2$; $\lambda = 2a/d$. Важливо наголосити, що за однорідного навантаження КІН періодичної системи співвісних тріщин не залежить від анізотропії пружних властивостей матеріалу і тотожний розв’язку (19).

3. Періодичні системи тонких пружних включень в анізотропному матеріалі. Розглянемо виготовлену зі склопластику анізотропну пластину з такими пружними характеристиками [21]: $E_1 = 48{,}26$ ГПа; $E_2 = 17{,}24$ ГПа; $\nu_{12} = 0{,}29$; $G_{12} = 6{,}89$ ГПа. У цій пластині наявна періодична система ізотропних тонких включень завдовжки $2a$ та завтовшки $2h$, причому $h = 0{,}01a$. Відносна жорсткість включень характеризується параметром $k = G^{\mathrm{i}}/G_{12}$, де G^{i} – модуль зсуву матеріалу неоднорідності. Коефіцієнт Пуассона включень $\nu^{\mathrm{i}} = \nu_{12}$. Нормовані значення $K_{ij}^{*} = K_{ij}\Big/\left(p\sqrt{\pi a}\right)$ узагальнених КІН K_{11} (вісь ординат ліворуч) та K_{12} (вісь ординат праворуч) для періодичних ($\boldsymbol{\omega} = (d, 0)$) систем співвісних (орієнтованих уздовж осі Ox_1) та паралельних (орієнтованих уздовж осі Ox_2) тонких пружних включень за всебічного розтягу ($\sigma_{11}^{\infty} = \sigma_{22}^{\infty} = p$) зображено на рис. 1. Унаслідок використання на рисунках двох осей ординат для різних узагальнених КІН відповідні графіки зображені до місця виходу на асимптоту. У числовій реалізації схеми МГЕ розбиття серединної поверхні неоднорідності здійснено за допомогою 21 граничного елемента.

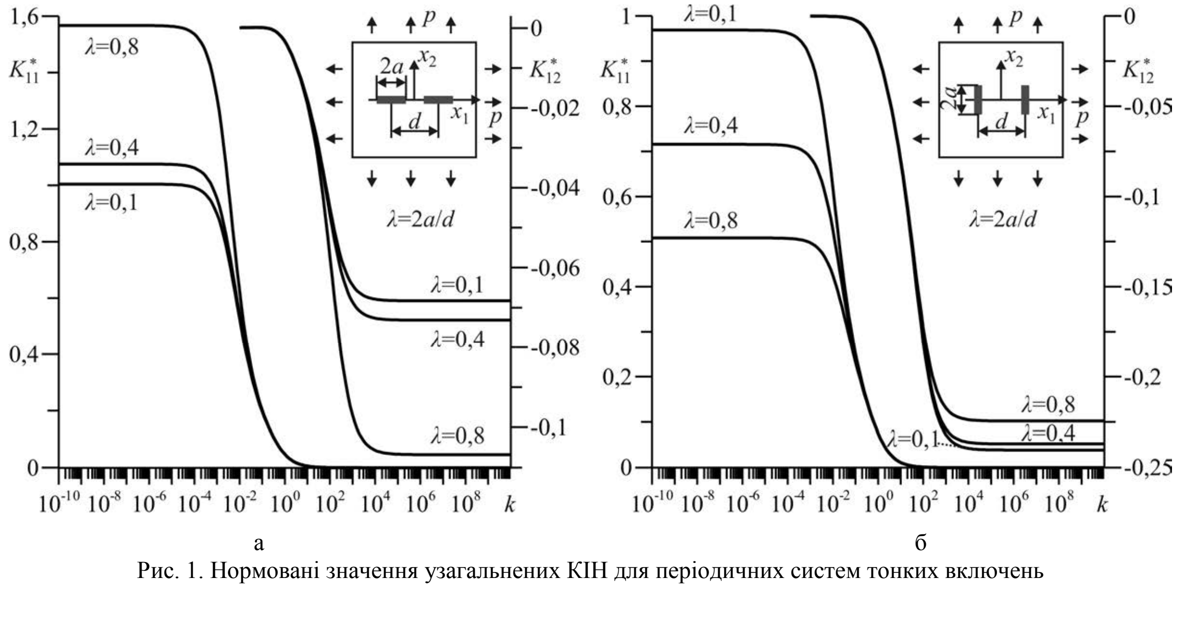
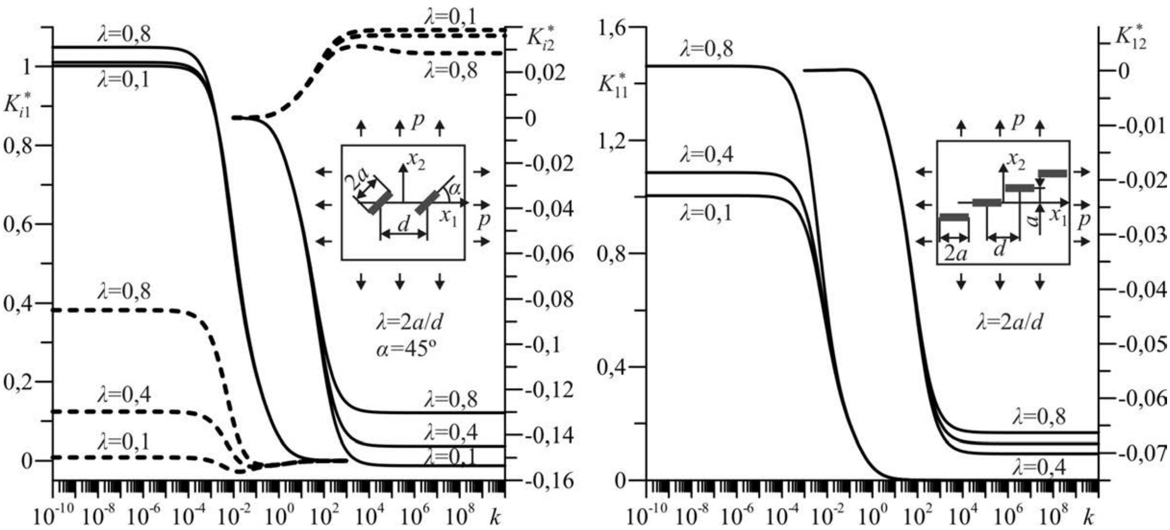


Рис. 1. Нормовані значення узагальнених КІН для періодичних систем тонких включень

У випадку співвісних включень за граничних значень відносної жорсткості k ($k \to 0$, $k \to \infty$) числовий розв'язок задачі відхилявся від заданого рівностями (24) точного не більше як на 0,3 %, що засвідчує високу ефективність розробленого варіанту методу граничних елементів і для класу періодичних задач.

Із рис. 1 видно, що у разі співвісних включень їхнє взаємне зближення сприяє збільшенню значень узагальнених КІН, натомість для системи паралельних податних включень, так само як і для тріщин, за їхнього зближення узагальнені КІН зменшуються (екранувальний ефект). Для доволі розрідженої системи ($\lambda = 0{,}1$) узагальнені КІН паралельних тріщин відрізняються від розв'язку для одної ізольованої тріщини приблизно на 4 %. Натомість для жорсткого включення таке відхилення не перевищує 0,1 %.

На рис. 2 зображено залежність від відносної жорсткості включень узагальнених КІН системи тонких пружних включень у тому разі, коли вектор періоду не є ані паралельним, ані перпендикулярним до осі включення. Зокрема, рис. 2, а стосується включень, розташованих під кутом $\alpha = 45°$ до осі Ox_1 та вектором періоду $\boldsymbol{\omega} = (d, 0)$, а рис. 2, б – паралельних до осі Ox_1 включень, зміщених одне відносно одного у двох ортогональних напрямах ($\boldsymbol{\omega} = (d, a)$). Суцільні лінії відповідають узагальненим КІН K_{1j} моди I, а штрихові – КІН K_{2j} моди II.



а б

Рис. 2. Нормовані узагальнені КІН паралельних включень

Із рис. 2, а видно, що для податних $(k < 1)$ включень, розташованих під кутом $\alpha = 45°$ до осі Ox_1, на якій лежать їхні центри, зміна параметра λ мало впливає на КІН K_{11}. Натомість істотних значень набуває узагальнений КІН K_{21}, причому для випадку тріщини ($k = 10^{-10}$) при $\lambda = 0{,}8$ він приблизно в 1,2 рази, а при $\lambda = 0{,}4$ – в 1,7 разів більший від відповідного, обчисленого для ізотропного середовища із дефектами. Тобто, анізотропія властивостей середовища істотно впливає на коефіцієнти інтенсивності напружень.

Для другої схеми (рис. 2, б) цікавим є поводження узагальненого КІН K_{12}, який на відміну від випадку співвісних включень ($\boldsymbol{\omega} = (d, 0)$) зі збільшенням λ спочатку збільшується, а потім зменшується за абсолютною величиною, що може бути зумовлене анізотропією матеріалу середовища та повертанням включення як жорсткого цілого, оскільки обчислений кут повертання зі зміною λ змінює знак.

Висновки. Побудовані у роботі числові та аналітичні підходи дослідження періодичних задач теорії пружності для систем тонких пружних включень у необмеженому анізотропному тілі дають можливість з високою точністю розрахувати напружено-деформований стан, а також, що дуже важливо для механіки руйнування, надійно оцінити локальний напружений стан біля вершин тонких неоднорідностей за допомогою високоточного обчислення КІН. Це дає можливість здійснювати оптимальний вибір геометричних і механічних параметрів складових композитних матеріалів, напряму армування та об'ємної частки арматури, а також обчислювати граничне навантаження на матеріал із періодичними системами неоднорідностей. Результати роботи можуть бути використані при дослідженні впливу на напружений стан періодичних систем дефектів в геоматеріалах, регулярних систем дефектів чи підкріплень у елементах конструкцій із анізотропних матеріалів.

РЕЗЮМЕ

В работе построена система интегральных уравнений метода граничных элементов для исследования периодических систем тонких включений в анизотропном теле. На их основе получен ряд замкнутых решений задач для периодических систем трещин и жестких включений в анизотропном материале. Реализованы числовые процедуры предложенного метода и получены значения обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений для периодических систем тонких упругих включений.

Ключевые слова: тонкое упругое включение, периодический, анизотропный, метод граничных элементов, обобщенные коэффициенты интенсивности напряжений

SUMMARY

This paper develops the system of integral equations of the boundary element method for studying periodic systems of thin inclusions in the anisotropic solid. Based on these equations some closed-form solutions are obtained for periodic systems of cracks and rigid line inclusions in anisotropic medium. The numerical procedures of the proposed approach are developed and the numerical values of generalized stress intensity factors for periodic systems of thin inclusions are obtained.

Keywords: thin elastic inclusion, periodic, anisotropic, boundary element method, generalized stress intensity factors

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Саврук М.П. Двумерные задачи упругости для тел с трещинами / М.П. Саврук. – К.: Наук. думка, 1981. – 324 с.
2. Линьков А.М. Комплексный метод граничных интегральных уравнений теории упругости / А.М. Линьков. – СПб.: Наука, 1999. – 382 с.
3. Сулим Г.Т. Основи математичної теорії термопружної рівноваги деформівних твердих тіл з тонкими включеннями / Г.Т. Сулим. – Львів: Дослідно-видавничий центр НТШ, 2007. – 716 с.
4. Фильштинский Л.А. Двоякопериодическая задача теории упругости для анизотропной среды с криволинейными разрезами / Л.А. Фильштинский // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1977. – № 6. – С. 116-124.
5. Choi H.J. A periodic array of cracks in a functionally graded nonhomogeneous medium loaded under in-plane normal and shear / H.J. Choi // Int. J. Fract. – 1997. – T. 88. – P. 107-128.
6. Божидарнік В.В. Пружна та гранична рівновага анізотропних пластинок з отворами і тріщинами / В.В. Божидарнік, О.В. Максимович. – Луцьк: ЛДТУ, 2003. – 228 с.
7. Бережницкий Л.Т. Взаимодействие жестких линейных включений и трещин в деформируемом теле / Бережницкий Л.Т., Панасюк В.В., Стащук Н.Г. – К.: Наук. думка, 1983. – 288 с.
8. Chen Y.Z. Periodic rigid line problem in an infinite plate / Y.Z. Chen // Archive of Applied Mechanics (Ingenieur Archiv). – 1993. – Vol. 63, No. 7. – P. 464-471.
9. Грилицкий Д.В. Периодическая задача для упругой плоскости с тонкостенными включениями / Д.В. Грилицкий, Г.Т. Сулим // Прикладная математика и механика. – 1975. – Т. 39, № 3. – С. 520-529.
10. Мартыняк Р.М. Периодическая задача для системы линейных компланарных включений в изотропной плоскости / Р.М. Мартыняк, Г.Т. Сулим // Мат. методы и физ.-мех. поля. – Киев: Наук. думка, 1982. – Вып. 15. – С. 113-117.
11. Опанасович В.К. Периодическая система параллельных тонких упругих включений в плоскости / В.К. Опанасович, М.С. Драган // Вестн. Львов. ун-та. Сер. мех.-мат. – 1985. – Вып. 23. – С. 83-89.
12. Космодамианский А.С. Напряженное состояние анизотропных сред с отверстиями или полостями / А.С. Космодамианский. – К.: Вища школа, 1976. – 200 с.
13. Clouteau D. Periodic BEM and FEM-BEM coupling / D. Clouteau, M.L. Elhabre, D. Aubry // Comp. Mech. – 2000. – Vol. 25, No. 6. – P. 567-577.
14. Pasternak Ia. Coupled 2D electric and mechanical fields in piezoelectric solids containing cracks and thin inhomogeneities / Ia. Pasternak // Engineering Analysis with Boundary Elements. – 2011. – Vol. 35, No. 4. – P. 678-690.
15. Pasternak Ia.M. Thin inclusions theory integral equations numerical solution using the boundary element method procedure / Ia.M. Pasternak, H.T. Sulym // Proc. Int. Conf. "Integral Equations – 2010", 25-27 August 2010 (Lviv). – Lviv: PAIS, 2010. – P. 104-108.
16. Ting T.C.T. Anisotropic elasticity: theory and applications / T.C.T. Ting. – New York: Oxford University Press. – 1996. – 567 p.
17. Лехницкий С.Г. Теория упругости анизотропного тела / С.Г. Лехницкий. – М.: Наука, 1977. – 416 с.
18. Пастернак Я.М. Дуальний метод граничних елементів для задач теорії тонких включень / Я.М. Пастернак, Г.Т. Сулим // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2010. – Т. 53. – № 2. – С. 46–57.
19. NIST Handbook of Mathematical Functions / F.W. Olver, D.W. Lozier, R.F. Boisvert, C.W. Clark. – New York: Cambridge University Press, 2010. – 951 p.
20. Portela A. The dual boundary element method: Effective implementation for crack problems / Portela A., Aliabadi M.H., Rooke D.P. // Int. J. Numer. Meth. Engng. – 1992. – Vol. 33. – P. 1269-1287.
21. Pan E. A general boundary element analysis of 2D linear elastic fracture mechanics / E. Pan // Int. J. Fract. – 1997. – Vol. 88. – P. 41-59.

Надійшла до редакції 21.07.2011 р.

УДК 531.38

АСИМПТОТИЧЕСКИ–ПРЕЦЕССИОННЫЕ ДВИЖЕНИЯ ВТОРОГО ТИПА СФЕРИЧЕСКОГО ГИРОСТАТА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ И ГИРОСКОПИЧЕСКИХ СИЛ

Ю. Ю. Пилпани

С помощью теории параметрического резонанса получены достаточные условия асимптотических прецессионных движений сферического гиростата, предельным движением которого служит прецессия второго типа относительно вертикали.

Ключевые слова: гиростат, гиростатический момент, прецессия второго типа, характеристичное число.

Введение. Прецессионные движения гиростата занимают важное место в классификации движений системы связанных твердых тел, поскольку они имеют наглядное геометрическое истолкование и находят применение в приложениях [1, 2]. К настоящему времени найдены многочисленные классы прецессионных движений гиростата не только в задаче о движении гиростата под действием силы тяжести, но и в её обобщении – задаче о движении гиростата под. действием потенциальных и гироскопических сил [2]. Исследование свойств асимптотичности движений позволило получить общий способ [3] изучения асимптотических прецессионных движений гиростата в обобщенной задаче динамики. Этот способ основывался на использовании достаточного условия А.М. Ляпунова [4] существования положительного характеристичного числа у уравнения класса Хилла и был применен, например, в работе [5]. В статье [6] анализ условий существования асимптотически – прецессионных движений гиростата проводился с помощью теории параметрического резонанса [7]. Данная статья посвящена исследованию свойств асимптотичности движения сферического гиростата в случае, когда предельное движение – прецессия второго типа гиростата под действием потенциальных и гироскопических сил [8].

Постановка задачи. Рассмотрим задачу о движении гиростата под действием потенциальных и гироскопических сил. Используя обозначения, принятые в книге [9], запишем уравнения

$$\mathbf{A}\dot{\boldsymbol{\omega}} = (\mathbf{A}\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\lambda}) \times \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{B}\mathbf{v} + \mathbf{s} \times \mathbf{v} + \mathbf{v} \times \mathbf{C}\mathbf{v} = \mathbf{0}, \tag{1}$$

$$\dot{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\omega}. \tag{2}$$

Здесь $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ – вектор угловой скорости тела – носителя; $\boldsymbol{v} = (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$ – единичный вектор вертикали; $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ – гиростатический момент; $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2, s_3)$ – вектор, сонаправленный с вектором обобщенного центра масс; $\mathbf{A} = (A_{ij})$ – тензор инерции гиростата; $\mathbf{B} = (B_{ij})$ и $\mathbf{C} = (C_{ij})$ – постоянные симметричные матрицы третьего порядка; точка над переменными векторами обозначает относительную производную по времени.

Уравнения (1) и (2) допускают интегралы

$$\boldsymbol{A\omega} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{2}(\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{v}) + \boldsymbol{Cv} \cdot \boldsymbol{v} = 2E, \quad \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} = 1, \tag{3}$$

$$2(\boldsymbol{A\omega} + \boldsymbol{\lambda}) \cdot \boldsymbol{v} - \boldsymbol{Bv} \cdot \boldsymbol{v} = 2k. \tag{4}$$

Положим в уравнениях (1), (2) и интегралах (3), (4) $\mathbf{A} = \operatorname{diag}(\mu_0, \mu_0, \mu_0)$, то есть предположим, что эллипсоид инерции гиростата является сферой. Тогда из (1) – (4) имеем

$$\dot{\boldsymbol{\omega}} = \mu_0^{-1}[\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{Bv} - \boldsymbol{\lambda}) + \boldsymbol{v} \times (\boldsymbol{Cv} - \boldsymbol{s})], \quad \dot{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\omega}, \tag{5}$$

$$\mu_0 \boldsymbol{\omega}^2 + \boldsymbol{v} \cdot (\boldsymbol{Cv} - \boldsymbol{2s}) = 2E, \quad \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} = 1, \quad \boldsymbol{2\mu_0}(\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{v}) + 2\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{v} - (\boldsymbol{Bv} \cdot \boldsymbol{v}) = 2k. \tag{6}$$

В работе исследуется асимптотически-прецессионное движение, для которого предельным движением является полурегулярная прецессия второго типа, указанная в статье [8]. Выпишем решение с учетом равенств $A_{11} = A_{22} = A_{33} = \mu_0$

$$\boldsymbol{\omega}^* = n\boldsymbol{a} + \dot{\psi}\boldsymbol{v}^*, \quad \boldsymbol{v}^* = (a_0' \sin(nt + \varphi_0), a_0' \cos(nt + \varphi_0), a_0), \tag{7}$$

где $n, \dot{\psi}$ таковы

$$n = -\left[C_{13}\mu_0 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_1 a_0 (B_{11} - B_{33})\right]\lambda_1^{-1}\mu_0^{-1} / 2,$$

$$\dot{\psi} = \gamma_0 + \gamma_1 \sin(nt + \phi_0), \ \gamma_0 = (C_{13}a_0 - s_1 - na_0\lambda_1)\lambda_1^{-1}, \quad \gamma_1 = -\lambda_1 a_0' \mu_0^{-1}. \tag{8}$$

Условия существования прецессии (7), (8) имеют вид

$$B_{12} = B_{13} = B_{23} = 0, \quad B_{11} = B_{22}, \quad C_{12} = C_{23} = 0, \quad s_2 = 0, \quad \lambda_2 = 0, \quad \lambda_1^2 = \mu_0 (C_{22} - C_{11}),$$

$$s_3 = \left(\left(C_{13}a_0 - s_1 \right) \lambda_1^{-1} - na_0 \right) \left(B_{33}a_0 - B_{11}a_0 - \lambda_3 - n\mu_0 \right) + a_0 \left(C_{33} - C_{22} \right) - nB_{11}. \qquad (9)$$

Отметим свойства исследуемого решения. Поскольку из (7) вытекает, что $\boldsymbol{v}^* \cdot \boldsymbol{a} = a_0$, то угол между векторами $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{v}^*$ в течении времени остаётся постоянен. Выражение для $\boldsymbol{\omega}^*$ из (7) показывает, что скорость собственного вращения гиростата постоянна. Получим условий асимптотических движений гиростата, предельным движением которых является прецессия (7), (8).

Уравнения в вариациях. Для исследования асимптотических движений введем возмущения $\boldsymbol{\Omega}$, $\boldsymbol{\gamma}$ по формулам

$$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}^* + \boldsymbol{\Omega}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}^* + \boldsymbol{\gamma}. \qquad (10)$$

Внесем выражения (10) в уравнения (5) и учтем то обстоятельство, что функции $\boldsymbol{\omega}^* = \boldsymbol{\omega}^*(t)$, $\mathbf{v}^* = \mathbf{v}^*(t)$ являются решением уравнения (5). Тогда получим систему двух векторных дифференциальных уравнений, из которых вытекает следующая система в вариациях

$$\dot{\boldsymbol{\Omega}} = \mu_0^{-1} \left[\boldsymbol{\Omega} \times \left(\mathbf{B}\mathbf{v}^* - \boldsymbol{\lambda} \right) + \boldsymbol{\omega}^* \times \mathbf{B}\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{s} \times \boldsymbol{\gamma} + \mathbf{v}^* \times \mathbf{C}\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\gamma} \times \mathbf{C}\mathbf{v}^* \right], \qquad (11)$$

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \mathbf{v}^* \times \boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\omega}^* \times \boldsymbol{\gamma}. \qquad (12)$$

Выпишем первые интегралы линейной системы (11), (12), порожденные интегралами (3), (4)

$$\mu_0 \left(\boldsymbol{\omega}^* \cdot \boldsymbol{\Omega} \right) + \gamma \left(\mathbf{C}\mathbf{v}^* - \mathbf{s} \right) = c_1, \quad \mathbf{v}^* \cdot \boldsymbol{\gamma} = c_2, \quad \mu_0 \left(\mathbf{v}^* \cdot \boldsymbol{\Omega} \right) + \left(\mu_0 \boldsymbol{\omega}^* - \mathbf{B}\mathbf{v}^* + \boldsymbol{\lambda} \right) \cdot \boldsymbol{\gamma} = c_3. \qquad (13)$$

В силу периодичности решения (7), система первого приближения (11), (12) является правильной. Поскольку она имеет три первых интеграла (13), то четыре характеристичных числа этой системы равны нулю. Для нахождения остальных характеристичных чисел необходимо с помощью интегралов (13) провести редукцию линейной системы (11), (12) к системе третьего порядка.

На основе [3] эту редукцию осуществим следующим образом. Вначале, вместо $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$ и $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, введем новые переменные u_i

$$u_1 = \mu_0 \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{a}, \quad u_2 = \mu_0 \left(\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{v}^* \right), \quad u_3 = \mu_0 \left[\Omega \cdot \left(\mathbf{a} \times \mathbf{v}^* \right) \right],$$
$$u_4 = \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{a}, \quad u_5 = \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{v}^*, \quad u_6 = \boldsymbol{\gamma} \cdot \left(\mathbf{a} \times \mathbf{v}^* \right), \qquad (14)$$

в которых первые интегралы (13) принимают вид

$$nu_1 + \dot{\psi} u_2 - a_0'^{-2} \left[\boldsymbol{\tau}_4 \cdot \left(u_4 \boldsymbol{\tau}_1 + u_5 \boldsymbol{\tau}_2 + u_6 \boldsymbol{\tau}_3 \right) \right] = c_1, \quad u_5 = c_2, \quad \mathbf{b} \cdot \left(u_4 \boldsymbol{\tau}_1 + u_5 \boldsymbol{\tau}_2 + u_6 \boldsymbol{\tau}_3 \right) = c_3. \qquad (15)$$

где

$$\boldsymbol{\tau_1} = \boldsymbol{a} - a_0 \boldsymbol{v}^*, \quad \boldsymbol{\tau_2} = \boldsymbol{v}^* - a, \quad \boldsymbol{\tau_3} = \boldsymbol{a} \times \boldsymbol{v}^*, \quad \boldsymbol{\tau_4} = \boldsymbol{s} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{v}^*,$$
$$\boldsymbol{\tau}_5 = \boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{v}^*, \quad \boldsymbol{b} = a_0'^{-2} \left[\mu_0 \left(n\boldsymbol{a} + \dot{\psi} \boldsymbol{v}^* \right) + \boldsymbol{\tau}_5 \right]. \qquad (16)$$

Затем в силу (15), (16) выполняется преобразование

$$\boldsymbol{x} = m(t) \boldsymbol{u}. \qquad (17)$$

Здесь

$$\boldsymbol{u} = (u_1, \ldots, u_6)^T, \quad m(t) = \left\| m_{ij}(t) \right\|,$$
$$m_{11} = m_{12} = 0, \quad m_{13} = 1, \quad m_{14} = m_{15} = m_{16} = 0, \quad m_{21} = m_{22} = m_{23} = 0,$$
$$m_{24} = 1, \quad m_{25} = m_{26} = 0, \quad m_{31} = m_{32} = m_{33} = m_{34} = m_{35} = 0, \quad m_{36} = 1,$$
$$m_{41} = n, \quad m_{42} = \dot{\psi}, \quad m_{43} = 0, \quad m_{44} = -a_0'^{-2} \left(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_4 \right), \quad m_{45} = -a_0'^{-2} \left(\boldsymbol{\tau}_4 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 \right), \qquad (18)$$
$$m_{46} = -a_0'^{-2} \left(\boldsymbol{\tau}_4 \cdot \boldsymbol{\tau}_3 \right), \quad m_{51} = m_{52} = m_{53} = m_{54} = 0, \quad m_{55} = 1, \quad m_{56} = 0,$$
$$m_{61} = 0, \quad m_{62} = 1, \quad m_{63} = 0, \quad m_{64} = (\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\tau}_1), \quad m_{65} = (\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\tau}_2), \quad m_{66} = (\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\tau}_3).$$

Выпишем обратное к (17) преобразование

$$u_1 = n^{-1} \left[x_4 - \dot{\psi} \left(x_6 - (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau}_1) x_2 - (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau}_2) x_5 - (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau}_3) x_3 \right) + (a_0')^{-2} (\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_4) x_2 + \right.$$

$$+\left(a_0'\right)^{-2}\left(\boldsymbol{\tau}_4\cdot\boldsymbol{\tau}_2\right)x_5+\left(a_0'\right)^{-2}\left(\boldsymbol{\tau}_4\cdot\boldsymbol{\tau}_3\right)x_3\Big],$$

$$u_2=x_6-(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\tau}_1)x_2-(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\tau}_2)x_5-(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\tau}_3)x_3,\quad u_3=x_1,\quad u_4=x_2,\quad u_5=x_5,\quad u_6=x_3.$$

Используя соотношения (14), получим зависимость исходных переменных

$$\boldsymbol{\Omega}=\mu_0^{-1}\left(a_0'\right)^{-2}\left(u_1\boldsymbol{\tau}_1+u_2\boldsymbol{\tau}_2+u_3\boldsymbol{\tau}_3\right),\quad \boldsymbol{\gamma}=\left(a_0'\right)^{-2}\left(u_4\boldsymbol{\tau}_1+u_5\boldsymbol{\tau}_5+u_6\boldsymbol{\tau}_3\right).$$

На основании замен переменных (14), (17) с учетом соотношений (15), (18), найдем уравнения

$$\dot{x}_i=\sum_{j=1}^{6}h_{ij}(t)x_j\quad\left(i=\overline{1,3}\right),\quad \dot{x}_4=0,\quad \dot{x}_5=0,\quad \dot{x}_6=0. \tag{19}$$

Поскольку $h_{ij}(t)$ в уравнении (19) – периодические функции с периодом $2\pi/n$, а x_4,x_5,x_6 – постоянные, то на основании теории Ляпунова [4] необходимо исследовать характеристичные числа однородной системы третьего порядка относительно переменных x_1,x_2,x_3, вытекающей из (13). С помощью перехода к сопряженной системе изучение характеристичных чисел данной системы сведем к изучению характеристичных чисел уравнения Хилла. Здесь выпишем его в случае $B_{ij}=0\quad\left(i,j=\overline{1,3}\right),\quad s_1=0$

$$\ddot{y}+p(t)y=0, \tag{20}$$

где

$$p(t)=\beta_0+\beta_1\sin(nt+\varphi_0)+\beta_2\sin^2(nt+\varphi_0), \tag{21}$$

$$\beta_0=\frac{\mu^2}{4\mu_0^2}\left[\lambda_3^2-\frac{2C_{13}\mu_0\lambda_3}{\lambda_1}-\frac{15C_{13}^2\mu_0}{C_{22}-C_{11}}+4\mu_0\left(C_{33}-C_{22}\right)\right]+\frac{4C_{13}^2}{\mu_0\left(C_{22}-C_{11}\right)},$$

$$\beta_1=\mu\left(\varepsilon_0+\mu^2\varepsilon_2+\mu^4\varepsilon_4+\ldots\right),\quad \beta_2=-\mu^2\varepsilon_2'',\quad \mu=a_0', \tag{22}$$

$$\varepsilon_0=-\mu_0^{-1}\left(9C_{13}+\lambda_1\mu_0^{-1}\lambda_3\right),\quad \varepsilon_2=-\frac{\varepsilon_0}{2},\quad \varepsilon_4=-\frac{\varepsilon_0}{8},\quad \varepsilon_2''=4\mu_0^{-1}\left(C_{11}-C_{22}\right).$$

Ранее [3] уравнение (20) изучалось на основе достаточного условия Ляпунова [4] существования у него решения с положительным характеристичным числом, которое состояло в том, что предполагалось $p(t)\le 0\quad(p(t)\ne 0)$. Здесь к данному уравнению применим теорию параметрического резонанса [7]. Для этой цели необходимо в (20) – (22) ввести малый параметр и решение уравнения (20) искать в виде ряда по этому малому параметру. В силу свойства прецессионности движения малым параметром может служить параметр a_0', который обозначен через μ. Поскольку в общем случае при таком способе введения малого параметра при вычислениях сталкиваемся со значительными трудностями, то положим

$$\lambda_3^2-2C_{13}\mu_0\lambda_1^{-1}\lambda_3+4\mu_0\left(C_{33}+3C_{22}-4C_{11}\right)-15C_{13}^2\mu_0\left(C_{22}-C_{11}\right)^{-1}=0. \tag{23}$$

Для существования действительных решений уравнения (23) относительно λ_3 считаем, что выполнены неравенства

$$4C_{13}^2-\left(C_{33}+3C_{22}-4C_{11}\right)\left(C_{22}-C_{11}\right)>0,\quad C_{22}-C_{11}>0.$$

Используя в уравнении (20) указанные выше условия, а также равенство $a_0'=\mu$, заменой $\tau=nt+\varphi_0$ приведем его к стандартному виду

$$y''+\lambda^2\left[1+\mu\left(\kappa_1\sin\tau+\mu\kappa_2\cos\tau+\mu^2\kappa_2'\sin\tau+\mu^4\kappa_4\cos 2\tau+\ldots\right)\right]y=0, \tag{24}$$

где

$$\lambda^2=\frac{\eta}{n^2},\quad \kappa_1=\frac{\varepsilon_0}{\eta},\quad \kappa_2'=-\frac{\kappa_1}{2},\quad \kappa_2=\frac{\varepsilon_2''}{\eta},\quad \kappa_4=\frac{\varepsilon_4}{\eta},\quad \eta=\frac{4C_{13}^2}{\lambda_1^2}.$$

Согласно теории параметрического резонанса в окрестности натуральных значений λ появляются интервалы, для которых определяющее уравнение $\rho^2-2A\rho+1=0$ имеет действительные корни ρ_1 и ρ_2, где $A=\left(y_1(\pi)+y_2'(\pi)\right)/2$, а $y_1(t),y_2(\pi)$ – независимые частные решения уравнения (24). Этим корням соответствуют два решения уравнения (24)

$$y_1=\phi_1(\tau)e^{-\beta_1\tau}, \quad y_2=\phi_2(\tau)e^{-\beta_2\tau} \tag{25}$$

с различными знаками характеристичных чисел $\beta_1=-\mathrm{Re}\,\sigma_1$, $\beta_2=-\mathrm{Re}\,\sigma_2$ $\left(\sigma_i=\pi^{-1}\ln\rho_i\right)$. Здесь $\varphi_1(\tau), \varphi_1(\tau)$ – периодические функции τ. Так как $\beta_2=\beta_1$, то в силу (25) система (17) имеет 4 нулевых характеристичных числа, одно положительное и одно отрицательное характеристичное число. Следовательно, к системе уравнений в вариациях, линейной системой которой является (11), (12) применима теорема Ляпунова [4] о существовании у неё решения, которое при $t\to\infty$ стремится к нулю. То есть для этого решения движение гиростата будет асимптотически – прецессионным.

Для применения указанных результатов положим в уравнении (24)

$$\lambda^2=N^2+\alpha_1\mu+\alpha_2\mu^2+\ldots, \quad y(\tau)=\xi_0(\tau)+\mu\xi_1(\tau)+\ldots, \tag{26}$$

где $\xi_i(\tau)$ – периодические функции с периодом π, $N=1,2\ldots$.

После подстановки выражений (26) в уравнение (24), полагая $N=1$, получим систему дифференциальных уравнений, из которой следует

$$\xi_0(\tau)=A_0\cos\tau+B_0\sin\tau, \tag{27}$$

$$\begin{gathered}\ddot{\xi}_1(\tau)+\xi_1(\tau)=\kappa_1\left(B_0\cos 2\tau-A_0\sin 2\tau-B_0\right)/2-\alpha_1\left(A_0\cos\tau+B_0\sin\tau\right),\\ \ddot{\xi}_2(\tau)+\xi_2(\tau)=-\xi_1(\tau)(\kappa_1\sin\tau+\alpha_1)-\xi_0(\tau)(\alpha_1\kappa_1\sin\tau+\kappa_2\cos 2\tau)-\alpha_2\xi_0(\tau),\end{gathered} \tag{28}$$

где A_0, B_0 – произвольные постоянные. Согласно теории параметрического резонанса приравниваем к нулю коэффициенты при $\cos\tau$ и $\sin\tau$ в правой части уравнения для $\xi_1(\tau)$. Так как $A_0^2+B_0^2\neq 0$, то

$$\alpha_1=0. \tag{29}$$

Связь между A_0, B_0 устанавливается при рассмотрении дальнейших приближений. Вычислим эти приближения, используя уравнения (28). На основании условия (29) из уравнения для $\xi_1(\tau)$ имеем:

$$\xi_1(\tau)=\kappa_1\left(A_0\sin 2\tau-B_0\cos 2\tau-3B_0\right)/6. \tag{30}$$

Подставим $\xi_0(\tau)$ и $\xi_1(\tau)$ из (27), (30) в уравнение для $\xi_2(\tau)$ из системы (28)

$$\begin{gathered}12\left(\ddot{\xi}_2(\tau)+\xi_2(\tau)\right)=\left(\kappa_1^2-6\kappa_2\right)\left(B_0\sin 3\tau+A_0\cos 3\tau\right)-\\ -A_0\cos\tau\left(\kappa_1^2+6\kappa_2+12\alpha_2\right)+B_0\sin\tau\left(5\kappa_1^2+6\kappa_2-12\alpha_2\right).\end{gathered} \tag{31}$$

Требование периодичности решения уравнения (31) приводит к равенствам

$$A_0\left(\kappa_1^2+6\kappa_2+12\alpha_2\right)=0, \quad B_0\left(5\kappa_1^2+6\kappa_2-12\alpha_2\right)=0.$$

Так как $A_0^2+B_0^2\neq 0$, то в случае $N=1$ для α_2 получаем два различных значения. Для первого значения

$$\alpha_2=-\left(\kappa_1^2+6\kappa_2\right)/12, \quad A_0=1, \quad B_0=0, \tag{32}$$

для второго значения

$$\alpha_2=\left(5\kappa_1^2+6\kappa_2\right)/12, \quad A_0=0, \quad B_0=1. \tag{33}$$

Аналогично подсчитываются дальнейшие приближения.

Таким образом, в силу (32), (33) с точностью до величин второго порядка относительно μ, найденную область неустойчивости, расположенную вблизи $N=1$ можно охарактеризовать условием

$$1-\left(\kappa_1^2+6\kappa_2\right)\mu^2/12+\ldots\le\lambda^2\le 1+\left(5\kappa_1^2+6\kappa_2\right)\mu^2/12+\ldots. \tag{34}$$

Второй пример существования у уравнения (24) решения относится к случаю $N=2$. Полагаем $\lambda^2=4+\alpha_1\mu+\alpha_2\mu^2+\ldots$. Задавая решение в виде (26), из уравнения (24) получим

$$\xi_0(\tau)=A_0\cos 2\tau+B_0\sin 2\tau, \tag{35}$$

$$\begin{gathered}\ddot{\xi}_1(\tau)+4\xi_1(\tau)=-\xi_0(\tau)(4\kappa_1\sin\tau+\alpha_1)=2\kappa_1\left(B_0(\cos 3\tau-\cos\tau)+A_0(\sin\tau-\sin 3\tau)\right),\\ \ddot{\xi}_2(\tau)+4\xi_2(\tau)=-\xi_1(\tau)(4\kappa_1\sin\tau+\alpha_1)-\xi_0(\tau)(\alpha_1\kappa_1\sin\tau+4\kappa_2\cos 2\tau+\alpha_2),\\ \ddot{\xi}_3(\tau)+4\xi_3(\tau)=-\xi_2(\tau)(4\kappa_1\sin\tau+\alpha_1)-\xi_1(\tau)(\alpha_2+\alpha_1\kappa_1\sin\tau+4\kappa_2\cos 2\tau)-\end{gathered}$$

$$-\xi_0(\tau)\left(\alpha_2\kappa_1\sin\tau+\alpha_1\kappa_2\cos 2\tau+4\kappa_2'\sin\tau+\alpha_3\right), \tag{36}$$
$$\ddot{\xi}_4(\tau)+4\xi_4(\tau)=-\xi_3(\tau)\left(4\kappa_1\sin\tau+\alpha_1\right)-\xi_2(\tau)\left(\alpha_2+\alpha_1\kappa_1\sin\tau+4\kappa_2\cos 2\tau\right)-$$
$$-\xi_1(\tau)\left(\alpha_3+\alpha_2\kappa_1\sin\tau+\alpha_1\kappa_2\cos 2\tau+4\kappa_2'\sin\tau\right)-$$
$$-\xi_0(\tau)\left(\alpha_3\kappa_1\sin\tau+\alpha_2\kappa_2\cos 2\tau+\alpha_1\kappa_2'\sin\tau+\alpha_4\right).$$

В силу теории параметрического резонанса, с учетом $A_0^2+B_0^2\neq 0$, (35) из системы (36) получим $\alpha_1=0$, аналогично равенству (29). На основании равенства $\alpha_1=0$ решение уравнения для $\xi_1(\tau)$ из системы (36) таково

$$\xi_1(\tau)=2\kappa_1\left(3B_0\cos 3\tau+3A_0\sin 3\tau-5B_0\cos\tau+5A_0\sin\tau\right)/15. \tag{37}$$

Подставим $\alpha_1=0$ и равенства (37) во второе равенство из системы (36)

$$15\left(\ddot{\xi}_2(\tau)+4\xi_2(\tau)\right)=6\left(2\kappa_1^2-5\kappa_2\right)\left(A_0\cos 4\tau+B_0\sin 4\tau\right)+$$
$$+\left(8\kappa_1^2-15\alpha_2\right)\left(A_0\cos 2\tau+B_0\sin 2\tau\right)-10A_0\left(2\kappa_1^2+3\kappa_2\right).$$

Из условия периодичности решения (26) следует $A_0\left(8\kappa_1^2-15\alpha_2\right)=0,\quad B_0\left(8\kappa_1^2-15\alpha_2\right)=0.$
То есть, для обоих вариантов имеем

$$\alpha_2=8\kappa_1^2/15,\quad A_0=1,\quad B_0=0,\quad \alpha_2=8\kappa_1^2/15,\quad A_0=0,\quad B_0=1. \tag{38}$$

С учетом (29), (38) решение для $\xi_2(\tau)$ системы (36) примет вид

$$30\xi_2(\tau)=\left(5\kappa_2-2\kappa_1^2\right)\left(A_0\cos 4\tau+B_0\sin 4\tau\right)-5A_0\left(2\kappa_1^2+3\kappa_2\right). \tag{39}$$

Подставляя (29), (37) – (39) в третье уравнение системы (36), имеем

$$\ddot{\xi}_3(\tau)+4\xi_3(\tau)=\frac{\kappa_1}{15}\left(17\kappa_2-2\kappa_1^2\right)\left(B_0\cos 5\tau-A_0\sin 5\tau\right)+$$
$$+\left(\kappa_1\kappa_2+46\kappa_1^3/75+2\kappa_2'\right)\left(B_0\cos 3\tau-A_0\sin 3\tau\right)+\frac{2B_0}{45}\left(2\kappa_1^3+48\kappa_1\kappa_2-45\kappa_2'\right)\cos\tau+ \tag{40}$$
$$+\frac{2A_0}{45}\left(45\kappa_2'-2\kappa_1^3-12\kappa_1\kappa_2\right)\sin\tau-A_0\alpha_3\cos 2\tau-\frac{B_0}{6}\alpha_3\sin 2\tau+A_0\left(2\kappa_1^2+3\kappa_2\right).$$

Приравниваем коэффициенты при $\cos 2\tau, \sin 2\tau$ в уравнении (40). Тогда получим $\alpha_3=0$, то есть

$$\xi_3(\tau)=\frac{\kappa_1}{315}\left(2\kappa_1^2-17\kappa_2\right)\left(B_0\cos 5\tau-A_0\sin 5\tau\right)-\frac{1}{375}\left(75\kappa_1\kappa_2+46\kappa_1^3+150\kappa_2'\right)\times$$
$$\times\left(B_0\cos 3\tau-A_0\sin 3\tau\right)+\frac{2B_0}{135}\left(2\kappa_1^3+48\kappa_1\kappa_2-45\kappa_2'\right)\cos\tau+$$
$$+\frac{2A_0}{135}\left(45\kappa_2'-2\kappa_1^3-12\kappa_1\kappa_2\right)\sin\tau+\frac{A_0}{24}\left(2\kappa_1^2+3\kappa_2\right).$$

С учетом найденных значений $\xi_i(\tau)\ \left(i=\overline{0,3}\right),\quad \alpha_i\ \left(i=\overline{1,3}\right)$, четвертое уравнение из (36) примет вид

$$\ddot{\xi}_4(\tau)+4\xi_4(\tau)=A_0Q\cos 6\tau+B_0Q\sin 6\tau+A_0P\cos 4\tau+B_0P\sin 4\tau+$$
$$+A_0\left(R+4\kappa_1^3\kappa_2/3+2\kappa_2^2-\alpha_4\right)\cos 2\tau+B_0\left(R-16\kappa_1^2\kappa_2/15\right)\sin 2\tau+ \tag{41}$$
$$+8A_0\kappa_1\left(3\kappa_1^4-2\kappa_1^3+6\kappa_1\kappa_2-40\kappa_2'\right)/135,$$

где

$$Q=\left(76\kappa_1^2\kappa_2-4\kappa_1^4-105\kappa_2^2\right)/315,\quad P=\kappa_1^2\left(2837\kappa_1^2-500\kappa_2\right)/7875,$$
$$R=\left(2550\kappa_1^2\kappa_2-788\kappa_1^4-1125\kappa_2^2+3600\kappa_1\kappa_2'\right)/3375. \tag{42}$$

С учетом требования периодичности решения уравнения (41), приравниваем коэффициенты при $\cos 2\tau$, $\sin 2\tau$ в правой части уравнения (41) к нулю. Получим два различных значения для α_4

$$\alpha_4=R+4\kappa_1^3\kappa_2/3+2\kappa_2^2,\quad A_0=1,\quad B_0=0,\ \text{или}\ \alpha_4=R-16\kappa_1^2\kappa_2/15,\quad A_0=0,\quad B_0=1.$$

Аналогично подсчитываются следующие приближения. Таким образом, с точностью до величин четвертого порядка относительно μ область неустойчиивости, расположенная вблизи $N = 2$, может быть охарактеризована условием

$$4+\frac{8}{15}\kappa_1^2\mu^2+\left(R-\frac{16}{15}\kappa_1^2\kappa_2\right)\mu^4+\ldots\le\lambda^2\le 4+\frac{8}{15}\kappa_1^2\mu^2+\left(R+\frac{4}{3}\kappa_1^3\kappa_2+2\kappa_2^2\right)\mu^4+\ldots, \quad (43)$$

где полагаем $10\kappa_1^3+15\kappa_2+8\kappa_1^2>0$.

Итак, если параметры задачи удовлетворяют одному из условий (34), (43), то уравнение (24) допускает решение вида (25).

Вывод. Если параметры задачи удовлетворяют условиям $B_{ij}=0$, (23), (34), (43), то существует такое начальное положение гиростата и начальная скорость, при которых движение гиростата будет обладать свойством асимптотичности движения. Предельным движением гиростата будет служить прецессия второго типа (7). Асимптотически-прецессионное движение будет описываться однопараметрическими рядами Ляпунова.

РЕЗЮМЕ

За допомогою теорії параметричного резонансу отримані достатні умови асимптотичних прецесійних рухів сферичного гіростату, граничним рухом якого є прецесія другого типу відносно вертикалі.

*Ключові слова***:** гіростат, гіростатичний момент, прецесія другого типу, характеристичне число.

SUMMARY

Using the theory of parametric resonance, sufficient terms for asymptotically – precessional motions of a spherical gyrostat were got. Limiting movement of gyrostat is the precession of second type, concerning a vertical.

Keywords: gyrostat, gyrostat moment, precession of second type, characteristic number.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горр Г.В. Прецессионные движения в динамике твердого тела и динамике систем связанных твердых тел / Г.В.Горр // Прикл. математика и механика. – 2003. – Т. 67. – Вып. 4. – С. 573-587.
2. Горр Г.В. Прецессионные движения в динамике твердого тела и в динамике систем связанных тел / Г.В.Горр, А.В. Мазнев, Е.К. Щетинина – Донецк: ДонНУ, 2009. – 222 с.
3. Горр Г.В.Об асимптотически прецессионных движениях гиростата в обобщенной задаче динамики / Г.В.Горр, Д.И. Думбай // Механика твердого тела. – 1974. – Вып. 6. – С. 9-15.
4. Ляпунов А.М. Собрание сочинений: в 5 т / А.М. Ляпунов. – М.: Изд-во АН СССР, 1956. – Т. 2: Общая задача об устойчивости движения. – 264 с.
5. Горр Г.В. Об асимптотически-прецессионных движениях сферического гиростата / Г.В.Горр, Е.М. Миронова // Механика твердого тела. – 2008. – Вып. 38. – С. 56-62.
6. Пилпани Ю.Ю. Об одном классе асимптотически – прецессионных движений сферического гиростат под действием потенциальных и гироскопических сил / Ю.Ю.Пилпани // Тр. ин-та прикл. матем. и мех. НАН Украины. – 2011. – Т. 22. – С. 177-183.
7. Малкин И.Г. Теория устойчивости движения / И.Г. Малкин – М.: Наука, 1966. – 530 с.
8. Горр Г.В. Новые решения обобщенной задачи динамики твердого тела с неподвижной точкой / Г.В. Горр, Е.В. Верховод, А.В. Мазнев // Докл. НАН Украины. Сер. А. Физ.-мат. и техн. наук. – 1992. – № 5. – С. 50-54.
9. Горр Г.В. Динамика гиростата, имеющего неподвижную точку / Г.В.Горр, А.В.Мазнев. – Донецк: ДонНУ, 2010. – 364 с.

Поступила в редакцию 23.01.2012 г.

УДК 539.1:534.1

ИЗЛУЧЕНИЕ АКУСТИЧЕСКОЙ ВОЛНЫ С ДАВЛЕНИЕМ ЗАДАННОГО ПРОФИЛЯ ТОЛСТОСТЕННЫМ ЦИЛИНДРИЧЕСКИМ ПЬЕЗОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕМ

Н. П. Подчасов, И. В. Янчевский
Институт механики им. С.П. Тимошенко НАН Украины, г. Киев

Представлен численно-аналитический метод решения задачи управления радиальными колебаниями бесконечно длинного пьезокерамического полого цилиндра, армированного сплошным тонким металлическим бандажом и погруженного в безграничную жидкую среду. Нестационарные процессы в рассматриваемой гидроэлектроупругой системе моделируются уравнениями линейной теории электроупругости, теории тонких оболочек и акустического приближения. Задача решена с использованием интегрального преобразования Лапласа. Представлены и проанализированы числовые результаты.

Ключевые слова: полый пьезокерамический цилиндр, акустическая среда, управление радиальными колебаниями, преобразование Лапласа, система интегральных уравнений Вольтерра.

Введение. К настоящему времени пьезокерамические элементы стали неотъемлемыми составляющими многих существующих технических устройств, и вместе с тем, имеют большой потенциал и для будущих приложений. Этим обусловлен повышенный интерес к исследованиям динамических процессов в пьезоэлементах. Длинные полые пьезокерамические цилиндры, будучи достаточно распространенной структурной формой пьезопреобразователей, изучаются достаточно интенсивно и к настоящему времени им посвящены многочисленные публикации.

При современном уровне развития технологий особую актуальность приобрели исследования поведения пьезопреобразователей при действии импульсных электромеханических нагрузок. Некоторые результаты работ в этом направлении, полученных на основании вариационно-разностного и конечно-разностного методов, можно найти в [1 – 4]. Аналитически, методом разделения переменных на квазистатическую и динамическую составляющие, нестационарные осесимметричные колебания полого пьезокерамического цилиндра при импульсном электромеханическом нагружении исследовались в публикации [5]. Эти результаты впоследствии были обобщены на цилиндры с эффектом связанности электромагнитоупругих процессов [6]. Нестационарные колебания многослойных цилиндров из пьезоэлектрически активных материалов изучались авторами [7 – 9] с помощью метода конечных элементов. Для прикладной гидроакустики актуальными являются результаты работ [10, 11], в которых для исследования переходных процессов в пьезопреобразователях цилиндрической формы, окруженных акустическими средами, привлекались численные подходы. Не менее эффективная методика решения задач нестационарной гидроэлектроупругости для электрически нагруженного полого пьезокерамического цилиндра, контактирующего с акустическими средами, изложены в [12, 13].

При электрическом возбуждении пьезокерамических преобразователей зачастую предполагается, что функция, определяющая изменение во времени электрической нагрузки, является известной. Однако в ряде практически важных случаев, в частности в гидроакустике, геофизике и медицине, возникает необходимость идентификации конфигурации электрического сигнала для управления упругими деформациями и механическими напряжениями преобразователей. Постановки таких задач сформулированы, например, в работах [14, 15], и получены соответствующие решения в случае преобразователей в виде тонкостенных цилиндрических оболочек. Однако изложенные в них результаты основаны на обобщенных гипотезах Кирхгофа-Лява [16], что не позволяет исследовать волновые процессы в преобразователе.

В настоящей работе рассматривается задача управления радиальными осесимметричными колебаниями полого цилиндра, изготовленного из радиально поляризованной пьезокерамики, с целью формирования акустической волны заданного профиля давления во внешней безграничной жидкой среде. При этом предполагается, что на внешней поверхности преобразователя имеется тонкий слой из упругого материала, используемого в качестве армирующего бандажа (для повышения механической прочности излучателя).

Постановка задачи. Рассматриваемая гидроэлектроупругая система состоит из погруженного в безграничную идеальную сжимаемую жидкую среду полого бесконечно длинного цилиндра из поляризованной вдоль радиуса пьезокерамики со сплошными токопроводящими покрытиями. Внешняя поверхность цилиндра соединена с тонким слоем из пьезоэлектрически пассивного упругого материала, а внутренняя поверхность жестко закреплена.

Геометрические параметры (R_1 и R_2 – внешний и внутренний радиусы цилиндра, h_m – толщина упругого слоя) и физико-механические характеристики материалов биморфного преобразователя и внешней среды (c_*^E , e_* , d_* , ε_*^S – упругие, пьезоэлектрические и диэлектрические константы пьезокерамики; E_m, ν_m – упругие постоянные для тонкого слоя; ρ_* – плотности; c_w – скорость распространения акустических волн) считаются известными.

Задача состоит в определении конфигурации разности потенциалов U_p, которую следует подвести к электродам преобразователя для возбуждения во внешней акустической среде гидродинамического давления заданного профиля p_w.

Исходные уравнения. В рамках линейной теории электроупругости [16], теории изотропных оболочек и акустической теории [17] исходные уравнения осесимметричного движения пьезокерамического цилиндра, цилиндрической оболочки и внешней среды имеют вид [13]:

$$\frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial r}-a_1\frac{u_r}{r^2}+a_2\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+a_3\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}=a_4\frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2}; \tag{1}$$

$$b_1\frac{d^2 w}{dt^2}+b_2 w=q; \tag{2}$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)=0, \tag{3}$$

где $u_r(r,t)$, $w(t)$ – перемещения точек в цилиндре и слое; ψ – электростатический потенциал; q – нормальная к срединной поверхности тонкого слоя механическая нагрузка; ϕ – потенциал акустической среды; r – радиальная координата цилиндрической системы координат; t – время.

Для электрической индукции D_r, нормального напряжения в радиальном направлении σ_r, давления p в акустической среде и скорости ее частиц v справедливы следующие зависимости [13]:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rD_r)=0;\quad D_r=a_5\frac{u_r}{r}+a_6\frac{\partial u_r}{\partial r}-\frac{\partial\psi}{\partial r};\quad \sigma_r=a_7\frac{\partial u_r}{\partial r}+a_8\frac{u_r}{r}+a_9\frac{\partial\psi}{\partial r}; \tag{4}$$

$$v=\frac{\partial\phi}{\partial r};\quad p=-\frac{\partial\phi}{\partial t}. \tag{5}$$

Отметим, что соотношения (1) – (5) записаны с использованием безразмерных переменных: u_r, w, r, h_m, R_1 и R_2 отнесены к R_1; p, q, σ_r – к $\rho_w c_w^2$; D_r – к $\varepsilon_{33}^S/d_{33}$; ψ, U_p – к R_1/d_{33}; v – к c_w; ϕ – к $c_w R_1$, а t – к R_1/c_w. При этом расчетные выражения для постоянных коэффициентов следующие

$$a_1=\frac{c_{11}^E}{c_{33}^E},\quad a_2=\frac{e_{33}}{c_{33}^E d_{33}},\quad a_3=\frac{e_{33}-e_{31}}{c_{33}^E d_{33}},\quad a_4=\frac{\rho_p c_w^2}{c_{33}^E},\quad a_5=\frac{e_{31}d_{33}}{\varepsilon_{33}^S},\quad a_6=\frac{e_{33}d_{33}}{\varepsilon_{33}^S},$$

$$a_7=\frac{c_{33}^E}{\rho_w c_w^2},\quad a_8=\frac{c_{13}^E}{\rho_w c_w^2},\quad a_9=\frac{e_{33}}{d_{33}\rho_w c_w^2};\quad b_1=\frac{\rho_m}{\rho_w}h_m,\quad b_2=\frac{1}{\rho_w c_w^2}\frac{E_m h_m}{1-\nu_m^2}.$$

Дифференциальные уравнения (1) – (3) дополним нулевыми начальными условиями для механических величин и следующими граничными условиями:

$$u_r\big|_{r=R_1}=w;\quad \frac{dw}{dt}=v\big|_{r=R_1};\quad q=-(p+\sigma_r)\big|_{r=R_1};\quad u_r\big|_{r=R_2}=0, \tag{6}$$

обеспечивающие жесткое соединение цилиндра с упругим слоем и постоянство контакта преобразователя с акустической средой ($r=R_1$), а также неподвижность внутренней поверхности цилиндра ($r=R_2$).

Рассматривая задачу управления, гидродинамическое давление на внешней поверхности ($r=R_1$) излучателя считается заданным:

$$p\big|_{r=R_1}=p_w. \tag{7}$$

Методика решения. Задача решается с использованием интегрального преобразования Лапласа по времени (s – параметр преобразования, L – индекс, обозначающий соответствующие трансформанты). Общее решение трансформированного в пространство изображений волнового уравнения (3) с учетом затухания возмущения среды на бесконечности ($r \to \infty$) выражается через функцию Макдональда K_n :

$$\phi^L = D^L e^{-s(r-R_1)} g_{10}^L(s,r),$$

где D^L – произвольная функция параметра s ; $g_{mn}^L(s,r) = s^{-m} e^{sr} K_n(sr)$.

С учетом соотношений (5) выражения для скорости и давления в акустической среде

$$v^L = -D^L e^{-s(r-R_1)} g_{01}^L(s,r); \quad p^L = -D^L e^{-s(r-R_1)} g_{00}^L(s,r),$$

в совокупности с условием управления (7) и вторым условием системы (6) позволяют определить как трансформанту скорости v_w радиального перемещения активной поверхности излучателя ($v_w = v|_{r=R_1}$), так и трансформанту функции w ($w^L = v_w^L / s$):

$$v_w^L \cdot g_{00}^L \big|_{r=R_1} = p_w^L \cdot g_{01}^L \big|_{r=R_1}; \quad w^L \cdot g_{00}^L \big|_{r=R_1} = p_w^L \cdot g_{11}^L \big|_{r=R_1}.$$

Последующая инверсия этих равенств приводит к интегральным уравнениям Вольтерра относительно $v_w(t)$ и $w(t)$:

$$\begin{aligned} &\int_0^t v_w(\tau) g_{00}(t-\tau, R_1) d\tau = \int_0^t p_w(\tau) g_{01}(t-\tau, R_1) d\tau; \\ &\int_0^t w(\tau) g_{00}(t-\tau, R_1) d\tau = \int_0^t p_w(\tau) g_{11}(t-\tau, R_1) d\tau, \end{aligned} \tag{8}$$

подынтегральные функции $g_{mn}(t,r)$ которых получены аналитически [13] с использованием таблиц операционного исчисления [18].

На основании представленных в работах [12, 13] результатов трансформанты перемещения u_r, напряжения σ_r и разности потенциалов U_p могут быть выражены через функции A^L, B^L и C^L параметра преобразования s

$$\begin{aligned} u_r^L &= A^L e^{-s\lambda(R_1 - r)} f_{1\nu}^L(s, \lambda r) + B^L e^{-s\lambda(r-R_2)} g_{1\nu}^L(s, \lambda r) - \\ &\quad - C^L \beta \left[V^L(s,r) g_{1\nu}^L(s,\lambda r) + W^L(s,r) f_{1\nu}^L(s,\lambda r) \right]; \\ \sigma_r^L &= A^L e^{-s\lambda(R_1 - r)} F^L(s,r) + B^L e^{-s\lambda(r-R_2)} G^L(s,r) - \\ &\quad - C^L \left\{ \beta \left[V^L(s,r) G^L(s,r) + W^L(s,r) F^L(s,r) \right] + \frac{\mu}{r} \frac{1}{s} \right\}; \\ U_p^L &= A^L \Phi_1^L(s) + B^L \Phi_2^L(s) + C^L \left(\Phi_3^L(s) - \frac{1}{s} \ln \frac{R_1}{R_2} \right). \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь приняты следующие обозначения:

$$f_{m\nu}^L(s,r) = \frac{e^{-sr}}{s^m} I_\nu(sr); \quad V^L(s,r) = \int_{R_2}^{r} \frac{e^{-s\lambda r}}{x} I_\nu(s\lambda x) dx; \quad W^L(s,r) = \int_{r}^{R_1} \frac{e^{s\lambda r}}{x} K_\nu(s\lambda x) dx;$$

$$F^L(s,r) = \xi f_{0\nu+1}^L(s,\lambda r) + \frac{\zeta}{r} f_{1\nu}^L(s,\lambda r); \quad G^L(s,r) = -\xi g_{0\nu+1}^L(s,\lambda r) + \frac{\zeta}{r} g_{1\nu}^L(s,\lambda r);$$

$$\Phi_1^L = a_6 f_{1\nu}^L(s,\lambda R_1) + a_5 \frac{1}{s} V^L(s,R_1) - a_6 e^{-s\lambda(R_1 - R_2)} f_{1\nu}^L(s,\lambda R_2);$$

$$\Phi_2^L = -a_6 g_{1\nu}^L(s,\lambda R_2) + a_5 \frac{1}{s} W^L(s,R_2) + a_6 e^{-s\lambda(R_1 - R_2)} g_{1\nu}^L(s,\lambda R_1);$$

$$\Phi_3^L = -a_6 \beta \left[V^L(s,R_1) g_{1\nu}^L(s,\lambda R_1) - W^L(s,R_2) f_{1\nu}^L(s,\lambda R_2) \right] - a_5 \beta \frac{1}{s} Z^L;$$

$$Z^L = \int_{R_2}^{R_1} \frac{1}{x} I_\nu(s\lambda x) \int_x^{R_1} \frac{1}{y} K_\nu(s\lambda y) dy dx + \int_{R_2}^{R_1} \frac{1}{x} K_\nu(s\lambda x) \int_{R_2}^{x} \frac{1}{y} I_\nu(s\lambda y) dy dx;$$

$$\xi = \lambda \frac{c_{33}^E \varepsilon_{33}^S + e_{33}^2}{\rho_w c_w^2 \varepsilon_{33}^S}; \quad \zeta = \nu \frac{c_{33}^E \varepsilon_{33}^S + e_{33}^2}{\rho_w c_w^2 \varepsilon_{33}^S} + \frac{c_{13}^E \varepsilon_{33}^S + e_{33} e_{31}}{\rho_w c_w^2 \varepsilon_{33}^S}; \quad \mu = \frac{e_{33}}{\rho_w c_w^2 d_{33}};$$

$$\nu = \sqrt{\frac{c_{11}^E \varepsilon_{33}^S + e_{31}^2}{c_{33}^E \varepsilon_{33}^S + e_{33}^2}}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{\rho_p c_w^2 \varepsilon_{33}^S}{c_{33}^E \varepsilon_{33}^S + e_{33}^2}}, \quad \beta = \frac{-e_{31} \varepsilon_{33}^S}{\left(c_{33}^E \varepsilon_{33}^S + e_{33}^2\right) d_{33}}.$$

Входящие в соотношения (9) неизвестные A^L, B^L и C^L определяются из механических граничных условий (6), которые после исключения нагрузки q ($q^L = b_1 s^2 w^L + b_2 w^L$, см. (2)) в пространстве изображений могут быть записаны следующим образом:

$$\sigma_r^L\Big|_{r=R_1} = -\left(p_w^L + b_1 s v_w^L + b_2 w^L\right); \quad s u_r^L\Big|_{r=R_1} = v_w^L; \quad u_r^L\Big|_{r=R_2} = 0. \tag{10}$$

В результате подстановки формул (9) в равенства (10) получим систему трех алгебраических уравнений относительно указанных неизвестных:

$$\begin{aligned} &A^L \cdot F^L\Big|_{r=R_1} - C^L \cdot \left(\beta V^L G^L + \frac{\mu}{r}\frac{1}{s}\right)\Bigg|_{r=R_1} = \\ &\qquad = -\left(p_w^L + b_1 s v_w^L + b_2 w^L\right) - e^{-s\lambda(R_1 - R_2)} B^L \cdot G^L\Big|_{r=R_1}; \\ &A^L \cdot f_{0\nu}^L\Big|_{r=R_1} - C^L \cdot \left(\beta V^L g_{0\nu}^L\right)\Big|_{r=R_1} = v_w^L - e^{-s\lambda(R_1 - R_2)} B^L \cdot g_{0\nu}^L\Big|_{r=R_1}; \\ &B^L \cdot g_{1\nu}^L\Big|_{r=R_2} = C^L \cdot \left(\beta W^L f_{1\nu}^L\right)\Big|_{r=R_2} - e^{-s\lambda(R_1 - R_2)} A^L \cdot f_{1\nu}^L\Big|_{r=R_2}. \end{aligned} \tag{11}$$

Последующий переход в пространство оригиналов на основании теорем о запаздывании и свертке двух функций:

$$L^{-1}\left\{e^{-sx} X^L\right\} = H(t-x) X(t-x); \quad L^{-1}\left\{X^L Y^L\right\} = \int_0^t X(\tau) Y(t-\tau) d\tau;$$

и представленных в работе [13] выражений для f_{mn}, V и W не вызывает принципиальных математических затруднений. Такая методика позволяет свести рассматриваемую задачу к системе интегральных уравнений Вольтерра с запаздывающими аргументами [12], которая для сокращения изложения в настоящей статье не приводится. Располагая значениями $A(t)$, $B(t)$ и $C(t)$ легко получить как конфигурацию управляющего сигнала $U_p(t)$ через обращение последнего равенства системы (9):

$$U_p = \int_0^t A(\tau)\Phi_1(t-\tau) d\tau + \int_0^t B(\tau)\Phi_2(t-\tau) d\tau + \int_0^t C(\tau)\left[\Phi_3(t-\tau) - \ln\frac{R_1}{R_2}\right] d\tau, \tag{12}$$

так и другие физические характеристики исследуемого переходного процесса.

Отметим, что при отсутствии упругого слоя достаточно положить $h_m = 0$, что соответствует $b_1 = b_2 \equiv 0$ в расчетных выражениях. Если внутренняя поверхность цилиндра свободна от механических нагрузок ($\sigma_r^L\Big|_{r=R_2} = 0$), то последнее соотношение в системе (11) следует заменить на

$$B^L \cdot G^L\Big|_{r=R_2} = C^L \cdot \left(\beta W^L F^L + \frac{\mu}{r}\frac{1}{s}\right)\Bigg|_{r=R_2} - e^{-s\lambda(R_1 - R_2)} A^L \cdot F^L\Big|_{r=R_2},$$

что принципиально не меняет процедуру решения задачи.

Изложенные в публикациях [14, 15] материалы позволяют записать решение рассматриваемой задачи в случае, когда электроупругий слой цилиндрического преобразователя является тонким ($h_p = R_1 - R_2 \ll R_1$) и при моделировании связанных электроупругих процессов допускается привлечение уравнений теории тонких электроупругих оболочек [16]. С использованием принятых ранее обозначений для разности потенциалов, подведение к сплошным электродам биморфной (металл-пьезокерамика) оболочки которого обеспечивает заданное осесимметричное движение w (8) ее поверхности приведения, окончательно получим:

$$U_p(t) = -\frac{d}{dt}\left(\frac{b_3}{b_5}p_w + \int_0^t p_w(\tau)\widetilde{U}_p(t-\tau)d\tau\right), \qquad (13)$$

где $\widetilde{U}_p$ является решением интегрального уравнения Вольтерра I-го рода:

$$\int_0^t \widetilde{U}_p(\tau) g_{10}(t-\tau, R_1)d\tau = \left.\left(\frac{1}{b_5}g_{20} + \frac{b_3}{b_5}(g_{11}-g_{10}) + \frac{b_4}{b_5}g_{31}\right)\right|_{r=R_1},$$

а постоянные коэффициенты равны:

$$b_3 = \frac{\rho_m h_m + \rho_p h_p}{\rho_w}; \quad b_4 = \frac{1}{\rho_w c_w^2}\left(\frac{E_m h_m}{1-\nu_m^2} + \frac{h_p}{s_{11}^E\left(1-\nu_p^2\right)}\right); \quad b_5 = \frac{d_{31}/d_{33}}{\rho_w c_w^2 s_{11}^E\left(1-\nu_p\right)},$$

где s_{11}^E, ν_p – упругая податливость и коэффициент Пуассона пьезокерамики.

Отметим, что равенство (13) записано в предположении, что функция p_w, описывающая профиль давления излучаемой во внешнюю акустическую среду волны, известна (7), а другие, внешние к оболочке механические воздействия, отсутствуют.

Числовые результаты. Числовые результаты получены для погруженных в воду (c_w=1500 м/с; ρ_w=1000 кг/м^3) преобразователей, составленных из слоя пьезокерамики марки PZT-5 и слоя титанового сплава ВТ-6 с относительной толщиной h_m=0.02, физические свойства которых следующие: ρ_p=7600 кг/м^3; c_{11}^E=10.3·10^{10} Н/м^2, c_{13}^E=5.9·10^{10} Н/м^2, c_{33}^E=10.2·10^{10} Н/м^2, s_{11}^E=15.4·10^{-12} м^2/Н; e_{31}= –7.78 Кл/м^2, e_{33}=15.2 Кл/м^2, d_{31}= –178·10^{-12} Кл/Н, d_{33}=3.56·10^{-10} Кл/Н; ε_{33}^S=7.91·10^{-9} Ф/м; ρ_m=4450 кг/м^3, E_m=11.3·10^{10} Н/м^2, ν_m=0.31. При этом для толстостенного излучателя принято $R_1 - R_2 = 0.4$ ($R_1 = 1.0$), для тонкостенного – $h_p = 0.04$.

При численном решении интегральных уравнений и их систем методом квадратур временной интервал разбивался на равные отрезки $\Delta t = 1/415$, что обеспечило приемлемую погрешность счета (в пределах 2 % для максимальных значений по сравнению с $\Delta t = 1/625$).

Конкретные вычисления проведены для задач возбуждения в акустической среде гидродинамического давления продолжительности 0.4 с одночастотным заполнением на частоте 10π (рис. 1, кривая A) и давления знакопеременного прямоугольного профиля (рис. 1, кривая B). Отметим, что при выборе профилей были учтены рекомендации [19] на предмет их практической реализации (не приводящие к разрушению излучателя).

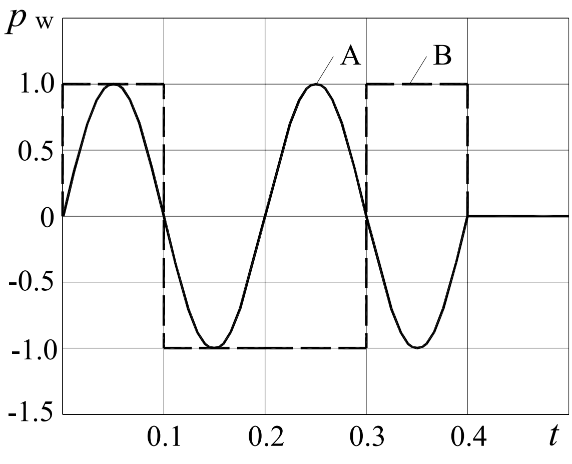


Рис. 1. Профили гидродинамического давления

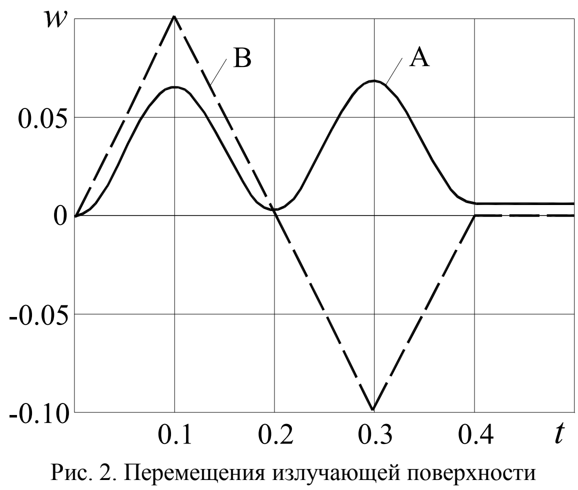


Рис. 2. Перемещения излучающей поверхности

На рис. 2 изображены соответствующие указанным профилям законы изменения во времени движения излучающей поверхности преобразователя, вычисленные из второго интегрального уравнения (8). Характерной особенностью профиля «А» является то, что после прекращения формирования заданной акустической волны ($t > 0.4$) поверхность принимает некоторое постоянное положительное значение радиального перемещения. Этого недостатка лишен профиль «В», для которого как полный импульс давления, так и импульс колебательной скорости активной поверхности, равны нулю, и при $t > 0.4$ эта поверхность возвращается в исходное (недеформированное) состояние. Отметим, что под импульсом физической величины подразумевается интеграл этой величины (переменная интегрирования – t) на временном отрезке [0; 0.4], на котором задан профиль давления.

Чтобы обеспечить перемещение w по закону «А» (рис. 2) необходимо, в соответствии с формулой (12), приложить к сплошным электродам толстостенного пьезокерамического излучателя разность потенциалов U_p, конфигурация которого представлена на рисунке 3,*а* сплошной кривой. Тонкая кривая на этом рисунке иллюстрирует результаты решения задачи управления (13) в случае тонкостенного излучателя.

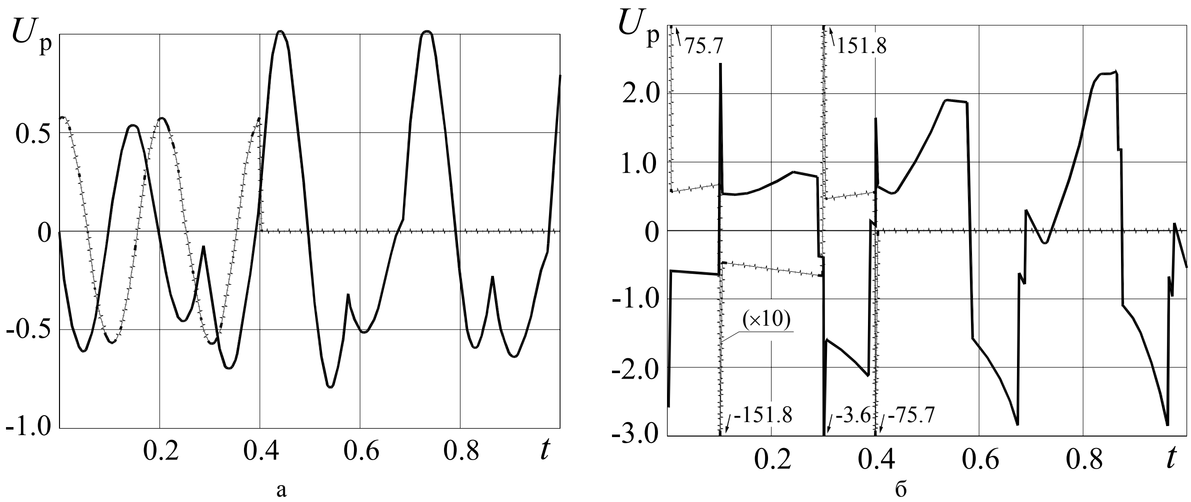


Рис. 3. Конфигурация управляющего электрического сигнала

Согласно рис. 3,*а* конфигурация подводимого к толстостенному преобразователю электрического сигнала на начальном этапе подобна профилю радиальной скорости его излучающей поверхности. В моменты времени $t = 2nT$ ($n = 1,2,...$; $T = \lambda(R_1 - R_2) \approx 0.289$ – время пробега волной толщины стенки цилиндра), когда отраженная от неподвижной цилиндрической поверхности ($r = R_2$) упругая волна достигает внешнюю поверхность ($r = R_1$), график U_p имеет точки излома. Из рисунка также видно, что и после завершения формирования волны заданного профиля (t >0.4) необходимо электрическое возбуждение преобразователя для поддержания постоянного уровня перемещения внешней поверхности (рис. 2, кривая А), что обусловлено волновым характером деформирования электроупругого слоя. При этом полученные максимальные значения функции U_p (t >0.4) несколько больше, чем на этапе управления ($t \le 0.4$). В то же время, по уравнениям теории тонких оболочек для сохранения неподвижности поверхности приведения излучателя при t >0.4 достаточно прикладывать некоторое постоянное значение управляющей разности потенциалов (ввиду малости значения, тонкая кривая практически сливается с осью абсцисс).

Результаты решения рассматриваемой задачи с исходным прямоугольным профилем (рис. 1, кривая В) представлены на рисунке 3,*б* сплошной (для толстостенного излучателя) и волнистой (для тонкостенного) кривыми. Для удобства чтения волнистая кривая построена с масштабным коэффициентом 10. Анализ этих кривых позволяет сделать вывод, что всякое скачкообразное изменение давления в излучаемой волне требует приложения к электродам армированного излучателя электрического напряжения, которое содержит дельта-функцию (при численном счете дельта-функция аппроксимировалась прямоугольником с малым основанием Δt и высотой $1/\Delta t$). При этом скачкообразному изменению радиальных перемещений (рис. 2, кривая В) препятствуют инерционные свойства преобразователей. Отметим, что для неармированного толстостенного излучателя ($h_m = 0$) конфигурация управляющего сигнала практически не отличается от приведенной за тем исключением, что резкие всплески значений U_p отсутствуют. Из рис. 3, *б* также видно, что максимальные значения разности потенциалов для цилиндрической оболочки существенно выше по сравнению с необходимым управлением для толстостенного пьезокерамического излучателя. Однако после окончания формирования заданного акустического импульса и возврата поверхности приведения в начальное состояние (t >0.4) в тонкостенном преобразователе достаточно закоротить электроды ($U_p\big|_{t>0.4} = 0$). Сложный характер изменения сплошной кривой обусловлен как наличием скачков значений в функции $p_w(t)$, так и необходимостью управления волнами деформаций, многократно отражающихся от граничных поверхностей преобразователя.

Из полученных числовых результатов следует, что осциллограмма подводимого к электродам толстостенного цилиндрического преобразователя управляющего сигнала определяется не только конфигурацией гидродинамического давления излучаемой во внешнюю среду волны, но и толщинными колебаниями электроупругого цилиндра. Поэтому даже после окончания формирования заданной эпюры давления необходимо прикладывать управляющий сигнал с достаточно сложным характером изменения во времени. Способствовать скорейшему подавлению электроупругих колебаний цилиндра могли бы следующие подходы: учет диссипативных свойств материалов преобразователя, внесение дополнительных критериев управления и применение неоднородных по толщине материалов.

Заключение. В работе представлено решение нестационарной задачи, постановка которой состоит в определении конфигурации управляющего электрического напряжения, подводимого к сплошным электродам цилиндрического толстостенного пьезокерамического преобразователя с внешним армирующим тонким упругим слоем, для излучения акустической волны давления заданного профиля. С использованием интегрального преобразования Лапласа рассматриваемая задача сведена к системе интегральных уравнений Вольтерра с запаздывающими аргументами. Конкретные расчеты и анализ результатов выполнены для синусоидального и знакопеременного прямоугольного акустических импульсов. Изложенная методика позволяет рассчитывать характеристики переходного процесса в полом электроупругом цилиндре и при других вариантах граничных условий.

РЕЗЮМЕ

Представлен численно-аналитический метод решения задачи управления радиальными колебаниями бесконечно длинного пьезокерамического полого цилиндра, армированного сплошным тонким металлическим бандажом и погруженного в безграничную жидкую среду. Нестационарные процессы в рассматриваемой гидроэлектроупругой системе моделируются уравнениями линейной теории электроупругости, теории тонких оболочек и акустического приближения. Задача решена с использованием интегрального преобразования Лапласа. Представлены и проанализированы числовые результаты.

Ключевые слова: полый пьезокерамический цилиндр, акустическая среда, управление радиальными колебаниями, преобразование Лапласа, система интегральных уравнений Вольтерра.

SUMMARY

The numerically-analytical solution of problem of radial vibration control for infinitely long piezoceramic hollow cylinder which is reinforced by solid thin metal bandage and submerged in boundless liquid environment is presented. Nonstationary processes in the considered hydroelectroelastic system are modelled by equations of linear theory of electroelasticity, the theory of thin shells and acoustic approach. The problem is solved using Laplace integral transform. Numerical results are presented and analysed.

Key words: hollow piezoceramic cylinder, acoustic environment, radial vibration control, Laplace integral transform, system of Volterra integral equation.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gautier F. Vibroacoustics of cylindrical pipes: internal radiation modal coupling / F. Gautier, N. Tahani // J. Sound Vibrat. – 1998. – Vol. 215. – P. 1165-1179.
2. Melnik R.V.N. Computational analysis of coupled physical fields in piezothermoelastic media / R.V.N. Melnik // Computer Physics Communications. – 2001. – Vol. 142. – P. 231-237.
3. Шульга Н.А. Радиальные электромеханические нестационарные колебания полого пьезокерамического цилиндра при электрическом возбуждении / Н.А. Шульга, Л.О. Григорьева // Прикл. механика. – 2009. – Т. 45, № 2. – С. 30-35.
4. Шульга Н.А. Радиальные упругоэлектрические нестационарные колебания пьезокерамического цилиндра при механическом нагружении / Н.А. Шульга, Л.О. Григорьева // Прикл. механика. – 2009. – Т. 45, № 4. – С. 66-71.
5. Ding H.J. The transient responses of piezoelectric hollow cylinders for axisymmetric plane stress problems / H.J. Ding, H.M. Wang, P.F. Hou // Int. J. Sol. and Str. – 2003. – Vol. 40. – P. 105-123.
6. Dai H.L. Dynamic responses of piezoelectric hollow cylinders in an axial magnetic field / H.L. Dai, X. Wang // Int. J. Sol. and Str. – 2004. – Vol. 41. – P. 5231-5246.
7. Chen Y. Double-layered piezo-thermoelastic hollow cylinder under some coupled loadings / Y. Chen, Zh. Shi // Appl. Mech. – 2006. – Vol. 75, No 6-7. – P. 326-337.
8. Saviz M.R. Electroelastic fields in a layered piezoelectric cylindrical shell under dynamic load / M.R. Saviz, M. Shakeri, M.H. Yas // Smart Materials and Structures. – 2007. – Vol. 16, No 5. – P. 1683-1695.

9. Taciroglu E. Analysis of laminated piezoelectric circular cylinders under axisymmetric mechanical and electrical loads with a semi-analytic finite element method / E. Taciroglu, C.W. Liu, S.B. Dong, C.K. Chu // Int. J. Sol. and Str. – 2004. – Vol. 41, Iss. 18-19. – P. 5185-5208.
10. Melnik R.V.N. Numerical analysis of dynamic characteristics of coupled piezoelectric systems in acoustic media / R.V.N. Melnik // Mathematics and Computers in Simulation. – 2003. – Vol. 61. – P. 497-507.
11. Kamath H. Vibration of piezoelectric elements surrounded by fluid media / H. Kamath, M. Willatzen, R.V.N. Melnik // Ultrasonics. – 2006. – Vol. 44. – P. 64-72.
12. Бабаев А.Э. Излучение нестационарных акустических волн радиально поляризованным цилиндрическим пьезопреобразователем / А.Э. Бабаев, В.Г. Савин // Прикл. механика. – 1994. – Т. 31, № 4. – С. 41-48.
13. Бабаев А.Э. Излучение нестационарных акустических волн электроупругим цилиндром с проводной цепью / А.Э. Бабаев, И.В. Янчевский // Теор. и прикл. механика. – 2010. – Вып. 1 (47). – С. 114-125.
14. Бабаев А.Э. Излучение акустических импульсов заданного профиля электроупругой цилиндрической оболочкой / А.Э. Бабаев, В.Г. Савин, Ю.В. Кожемяка // Теор. и прикл. механика. – 2001. – Вып. 33. – С. 186-191.
15. Подчасов Н.П. Управление нестационарными колебаниями цилиндрической полупассивной оболочки при секционированном электродировании пьезослоя / Н.П. Подчасов, И.В. Янчевский // Теор. и прикл. механика. – 2011. – № 3 (49). – С. 93-101.
16. Гринченко В.Т. Механика связанных полей в элементах, конструкций. Т. 5. Электроупругость. / В.Т. Гринченко, А.Ф. Улитко, Н.А. Шульга. – К.: Наук. думка, 1989. – 280 с.
17. Гузь А.Н. Методы расчета оболочек. Т. 5. Теория нестационарной аэрогидроупругости оболочек. / А.Н. Гузь, В.Д. Кубенко. – К.: Наук. думка, 1982. – 400 с.
18. Диткин В.А. Справочник по операционному исчислению. / В.А. Диткин, А.П. Прудников. – М.: Высшая школа, 1965. – 466 с.
19. Моргун И.О. Возбуждение акустических импульсов заданной формы сферическим пьезопреобразователем / И.О. Моргун, В.Г. Савин, А.А. Бабаев // Электроника и связь. – 2007. – №4 (39). – С. 78-85.

Поступила в редакцию 12.12.2011 р.

ФІЗИКА

УДК 539.213; 530.1

ОСОБЕННОСТИ СТАТИСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛЯ ДЕФОРМАЦИИ ФРАКТАЛЬНОЙ ДИСЛОКАЦИИ

В. С. Абрамов
Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины, г. Донецк

Объектом исследования является фрактальная дислокация. Рассматривается модельный образец конечных размеров с объемной решеткой в виде прямоугольного параллелепипеда. Строится двухточечная модель на основе ранее предложенной одноточечной модели, в которой использовалась теория дробного исчисления и концепция фрактала. Исследуются особенности поведения поля деформации фрактальной дислокации и возможные корреляционные связи. Установлено ярко выраженное стохастическое поведение амплитуд и фазы у усредненных функций. Методом численного моделирования показано изменение статистики с типа Ферми-Дирака на статистику типа Бозе-Эйнштейна для отдельных внутренних узловых плоскостей. Это подтверждает теоретический вывод о наличии смешанной статистики.

Ключевые слова: фрактальная дислокация, комплексное поле деформации, двухточечная модель, статистические свойства, смешанная статистика.

Введение. Новым направлением квантовой информатики являются квантовые информационные технологии [1, 2]. В этих технологиях в качестве носителя информации (единиц, битов) используются кванты света – фотоны. Используя принципы квантовой оптики [3], запись и последующее считывание квантовой информации (кодированной в состояниях поляризации фотонов) осуществляется на квантовых состояниях одиночных атомов или на коллективных квантовых состояниях атомного ансамбля. Для реализации оптических квантовых вычислений необходимы источники и детекторы одиночных фотонов (однофотонных фоковских состояний моды излучения). Такие источники можно получать на основе микрорезонаторов различных форм (микроторроиды, микросферы, микродиски, фотонные нанокристаллы), в которых с помощью литографии созданы активные квантовые точки. Также разработаны источники пар перепутанных фотонов (белловские пары), которые получают, например, с помощью оптических волноводов в кристаллах, микроструктурированных периодически поляризованными доменами. В настоящее время имеются фотодетекторы, способные откликаться на однофотонные состояния поля: лавинные фотодиоды, работающие на гейгеровской моде; полупроводниковый счетчик фотонов видимого света; туннельные фотодиоды на квантовых точках. Отмечена основная трудность при обработке квантовой информации: результаты фотодетектирования являются случайными.

В качестве другого носителя информации можно использовать кванты колебательных возбуждений решетки – фононы. Ранее в работах [4-6] были введены фрактоны – колебательные возбуждения на фрактале. В работе [7] было исследовано неупругое рассеяние света на фрактальных колебательных модах в полимерах. В рамках фрактонного описания локализованных колебаний определена фрактонная (спектральная) размерность, найдена характерная частота колебаний, при которой происходит переход от фрактонного к фононному спектру, сделана оценка размеров фрактальных областей. Фрактонные колебательные возбуждения локализованы из-за фрактальной геометрии среды. Их надо отличать от локальных фононов, которые локализованы в андерсоновском смысле из-за рассеяния колебаний на статических несовершенствах решетки. Локализация колебаний и фрактальность геометрии проявляются только на малых масштабах. Для достаточно больших длин волн колебательные возбуждения в любой среде должны вести себя как обычные фононы. Существует характерная длина L. Колебательные возбуждения с длинами волн $\lambda > L$ – это обычные фононы, а с $\lambda < L$ – фрактоны или локальные фононы (в зависимости от того является ли геометрия фрактальной или эвклидовой).

Возможны различные механизмы связей и взаимных преобразований одних носителей информации (фотонов) в другие (фононы) на активных наноструктурных элементах. Так в работе [8] получены и проанализированы инфракрасные и рамановские спектры стеклообразного полиметилметакрилата в области 10-150 см$^{-1}$. Авторы отнесли низкочастотную аномалию спектров («бозонный пик») к либрационным колебаниям на участке основной цепи полимера соизмеримым с ее статистическим сегментом. Установлена связь этих когерентных либрационных возбуждений с релаксационными процессами в полимере. Отмечено, что низкочастотная динамика стеклообразных твердых тел отличается от характерной для кристаллов и обладает рядом универсальных особенностей, которые обусловлены избыточной (относительно дебаевской) плотностью колебательных состояний (ПКС). Появление «бозонного пика» в инфракрасных и рамановских спектрах связывается с избыточной ПКС. Полагают, что избыточная ПКС вызвана существованием квазилокальных колебательных мод. В настоящее время природа этих мод широко обсуждается. Ряд авторов полагают, что указанные моды представляют собой локальные колебания структурных образований: фракталов, доменов, нанонеоднородностей. Другие приписывают их коррелированным колебаниям молекулярных кластеров или молекул.

В работе [9] исследована статистика мезоскопических ансамблей бозонов и фермионов с ограниченным числом частиц, найдены равновесные функции распределения. Показано, что указанные функции распределения чисел частиц в разных квантовых состояниях являются статистически зависимыми и только при большом числе частиц в ансамбле эта зависимость исчезает. При высокой температуре найденные распределения переходят в распределение Больцмана, а при большом числе частиц в ансамбле – в распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака. Отмечено, что ансамбль с небольшим числом частиц в настоящее время привлекает к себе особый интерес в связи с большими надеждами, возлагаемыми на применение запутанных состояний (например, для двух атомов, захваченных в ловушку или квантовую точку) в различных областях квантовой информации – квантовой криптографии, квантовой телепортации и при квантовых вычислениях [10, 11].

В качестве активных наноструктурных элементов обычно выбирают примесные кристаллы с активными рабочими атомами (или группой атомов, агрегатов, кластеров [12]). Одним из неклассических структурных объектов в наноструктурном материале является фрактальная дислокация, которая возникает на дискретной прямоугольной решетке [13, 14]. Под действием внешних воздействий в наноструктурном материале возможно изменение структуры активных наноразмерных элементов, а при некоторых критических значениях параметров – существенная перестройка структуры и возникновение квантового хаоса [15]. В работе [14] показано, что имеет место эффект ветвления, наличие квантовых и необычных статистических свойств поля деформации фрактальной дислокации. Для теоретического описания структурных изменений и особенностей статистических свойств нанообъектов строятся различные математические модели. Одним из наиболее эффективных методов анализа поведения таких нелинейных моделей является использование усредненных функций и числовых характеристик.

Целью данной работы является дальнейшее исследование поведения структурных состояний и особенностей статистических свойств поля деформации фрактальной дислокации. Описание структурных состояний фрактальной дислокации основывается на теории дробного исчисления и концепции фрактала. Поле деформации фрактальной дислокации, в общем случае, является комплексным, стохастическим и дискретным [13, 14]. Наличие дискретности тесно связано с появлением квантовых свойств и квантового хаоса [15], что приводит к существенному изменению поведения поля деформации, усредненных функций и других характеристик фрактальной дислокации.

Постановка задачи. Анализ поведения комплексного поля деформации удобно проводить в терминах усредненных функций. Для этого рассмотрим образец конечных размеров с объемной решеткой $N_1 \times N_2 \times N_3$ в виде прямоугольного параллелепипеда. Отклонения узлов этой решетки от состояния покоя описывается оператором смещения $\hat{u}(z)$. Безразмерная координата z вдоль оси Oz зависит от целочисленного индекса $j = \overline{1, N_3}$. Этому оператору ставится в соответствие прямоугольная матрица с матричными элементами $u_{nm}(z)$, где $n = \overline{1, N_1}$; $m = \overline{1, N_2}$. В работе [14] были получены нелинейные уравнения для оператора $\hat{u}(z)$. Для каждого дискретного значения z элементы $u_{nm}(z)$ находятся при решении этих нелинейных уравнений методом итераций. Сама итерационная процедура моделирует стохастический процесс на прямоугольной дискретной решетке $N_1 \times N_2$. Элементы $u_{nm}(z)$ в общем случае являются случайными комплексными функциями от действительной переменной z, а также зависят от фрактальной размерности α вдоль оси Oz и ряда других внутренних, внешних управляющих параметров. Поэтому для описания комплексного поля деформации фрактальной дислокации используются элементы теории случайных матриц [15] и вводятся усредненные функции в рамках статистического подхода, где усреднение выполняется по узловым индексам n, m [14]. Отметим, что при этом усреднение по z отсутствует. В работе [14] была использована одноточечная модель (на основе теории дробного исчисления и концепции фрактала), в рамках которой координата z определялась зависимостью $z = 0.053 + 0.1(j-1)$, где $j = \overline{1; 67}$. Значения $z \in [0.053;\ 6.653]$ и изменялись с шагом $z_h = 0.1$.

Двухточечная модель. В данной работе с целью установления возможных корреляционных связей строится двухточечная модель, в рамках которой координата z принимает два значения z_1 и z_2, зависимости которых от индекса j определяются соотношениями

$$z_1 = 0.053 + 0.1(j-1); \quad z_2 = 6.653 - 0.1(j-1); \quad j = \overline{1; 67}. \tag{1}$$

При $j = 1$ из (1) следуют граничные значения $z_1 = 0.053$, $z_2 = 6.653$ и при $j = 67$ значения $z_1 = 6.653$, $z_2 = 0.053$. Выбор такой схемы для z_1 и z_2 соответствует прямой и обратной волнам смещений $u_{nm}(z_1)$ и $u_{nm}(z_2)$ внутри объемной решетки $N_1 \times N_2 \times N_3$.

Отклонения узлов решетки от состояния покоя в отдельной плоскости $N_1 \times N_2$ при фиксированных значениях z_1 и z_2 теперь описывается операторами смещений $\hat{u}(z_1)$ и $\hat{u}(z_2)$, которым соответствуют прямоугольные матрицы с размерами $N_1 \times N_2$. Операторам $\hat{u}^+(z_1)$, $\hat{u}^+(z_2)$ соответствуют прямоугольные матрицы с размерами $N_2 \times N_1$, где значок «+» означает операцию эрмитового сопряжения. В общем случае элементы этих матриц являются случайными комплексными функциями от целочисленных индексов n, m, j. С целью описания поля деформации фрактальной дислокации в терминах квадратных матриц вводим операторы

$$\hat{M}_1 = \hat{u}(z_1)\,\hat{u}^+(z_1); \quad \hat{M}_3 = \hat{u}(z_2)\,\hat{u}^+(z_2); \quad \hat{M}_5 = \hat{u}(z_1)\,\hat{u}^+(z_2); \quad \hat{M}_5^+ = \hat{u}(z_2)\,\hat{u}^+(z_1); \tag{2}$$

$$\hat{M}_2 = \hat{u}^+(z_2)\hat{u}(z_2); \quad \hat{M}_4 = \hat{u}^+(z_1)\,\hat{u}(z_1); \quad \hat{M}_6 = \hat{u}^+(z_2)\,\hat{u}(z_1); \quad \hat{M}_6^+ = \hat{u}^+(z_1)\hat{u}(z_2). \tag{3}$$

Операторам из (2) и (3) соответствуют квадратные матрицы с размерами $N_1 \times N_1$ и $N_2 \times N_2$. Выполнив усреднение по узловым индексам n, m с помощью операции вычисления следа Sp квадратных матриц, получим усредненные функции $M_1, M_2, M_3, M_4, M_5, M_6$

$$M_1 = Sp\hat{M}_1; \quad M_3 = Sp\hat{M}_3; \quad M_5 = M_5' + iM_5'' = Sp\hat{M}_5; \quad M_5^* = M_5' - iM_5'' = Sp\hat{M}_5^+; \tag{4}$$

$$M_2 = Sp\hat{M}_2; \quad M_4 = Sp\hat{M}_4; \quad M_6 = M_6' + iM_6'' = Sp\hat{M}_6; \quad M_6^* = M_6' - iM_6'' = Sp\hat{M}_6^+, \tag{5}$$

где $M' = \mathrm{Re}\,M$, $M'' = \mathrm{Im}\,M$ соответствующей комплексной усредненной функции M; Re, Im – операции выделения реальной, мнимой частей; i – мнимая единица; значок «$*$» означает операцию комплексного сопряжения. Отметим, что операторы $\hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_3, \hat{M}_4$ из (2), (3) являются эрмитовыми операторами, т.е. удовлетворяют условиям

$$\left(\hat{M}_1\right)^+ = \hat{M}_1^+ = \hat{M}_1; \quad \hat{M}_3^+ = \hat{M}_3; \quad \hat{M}_2^+ = \hat{M}_2; \quad \hat{M}_4^+ = \hat{M}_4. \tag{6}$$

Выполнив операцию перестановки операторов под знаком Sp в выражениях (4), (5), находим связи для усредненных функций $M_1, M_2, M_3, M_4, M_5, M_6$

$$M_1 = Sp[\hat{u}(z_1)\,\hat{u}^+(z_1)] = Sp[\hat{u}^+(z_1)\hat{u}(z_1)] = Sp\hat{M}_4 = M_4; \qquad M_3 = M_2;$$

$$M_5 = Sp[\hat{u}(z_1)\,\hat{u}^+(z_2)] = Sp[\hat{u}^+(z_2)\hat{u}(z_1)] = Sp\hat{M}_6 = M_6; \qquad M_5^* = M_6^*. \tag{7}$$

На основе выражений (7) вводим матрицы

$$\hat{A}_1 = \begin{pmatrix} M_1 & M_5 \\ M_5^* & M_3 \end{pmatrix}; \quad \hat{A}_2 = \begin{pmatrix} M_2 & M_6 \\ M_6^* & M_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_3 & M_5 \\ M_5^* & M_1 \end{pmatrix}; \quad \hat{A}_1^+ = \hat{A}_1; \quad \hat{A}_2^+ = \hat{A}_2. \tag{8}$$

Из выражений (8) следует, что для описания комплексного поля деформации фрактальной дислокации вместо шести усредненных функций (4), (5) достаточно использовать только три M_1, M_3, M_5. Далее на основе операторов (2), (3) находим усредненные функции $S_1 = S_4; S_3 = S_2; S_5, S_6$

$$S_1 = Sp\left(\hat{M}_1\hat{M}_1\right) = Sp\left(\hat{M}_1^2\right); \quad S_3 = Sp\left(\hat{M}_3\hat{M}_3\right) = Sp\left(\hat{M}_3^2\right); \quad S_5 = Sp\left(\hat{M}_5\hat{M}_5^+\right);$$

$$S_6 = Sp\left(\hat{M}_6\hat{M}_6^+\right); \quad S_1^+ = S_1^* = Sp\left(\left(\hat{M}_1\hat{M}_1\right)^+\right) = Sp\left(\hat{M}_1^2\right) = S_1; \quad S_3^* = S_3; \quad S_5^* = S_5. \tag{9}$$

С учетом выражений (7), (9) вводим корреляционные функции

$$K_1 = S_1 - M_1^2; \quad K_3 = S_3 - M_3^2; \quad K_5 = S_5 - M_5M_5^* = S_5 - |M_5|^2;$$

$$K_6 = S_6 - |M_6|^2; \quad |M_5|^2 = (M_5')^2 + (M_5'')^2 = |M_6|^2. \tag{10}$$

Введенные усредненные функции (7), (9) и корреляционные функции (10) зависят от целочисленного индекса j. Отметим, что в нашем случае функции $S_1(j)$, $S_3(j)$, $S_5(j)$, $S_6(j)$ являются положительными; функции $K_1(j), K_3(j)$ являются отрицательными, а функции $K_5(j)$, $K_6(j)$ – знакопеременными внутри отрезка $j \in [1; N_3]$. Выполнив нормировку указанных функций, получим

$$f_1'(j) = M_1^2(j)/S_1(j); \quad f_{11} = f_1(j) = -K_1(j)/S_1(j); \quad f_1'(j) - f_1(j) = 1; \tag{11}$$

$$f_3'(j) = M_3^2(j)/S_3(j)\,; \quad f_{22} = f_3(j) = -K_3(j)/S_3(j)\,; \quad f_3'(j) - f_3(j) = 1\,; \tag{12}$$

$$f_5'(j) = \left|M_5(j)\right|^2/S_5(j)\,; \quad r_{12} = r_5(j) = K_5(j)/S_5(j)\,; \quad f_5'(j) + r_5(j) = 1\,; \tag{13}$$

$$f_6'(j) = \left|M_6(j)\right|^2/S_6(j)\,; \quad r_{21} = r_6(j) = K_6(j)/S_6(j)\,; \quad f_6'(j) + r_6(j) = 1\,. \tag{14}$$

Функции $f_1(j)$, $f_3(j)$ и $f_1'(j)$, $f_3'(j)$ являются положительными, допускают интерпретацию типа функций распределения Бозе-Эйнштейна в основном и возбужденном состояниях, соответственно. Для тех областей изменения $j \in [1; N_3]$, где функции $K_5(j)$, $K_6(j)$ являются положительными, функции $r_5(j)$, $r_6(j)$, $f_5'(j)$, $f_6'(j)$ – положительны и допускают интерпретацию типа функций распределения Ферми-Дирака. При изменении знаков у функций $K_5(j)$, $K_6(j)$ функции $r_5(j)$, $r_6(j)$ становятся отрицательными, функции $f_5'(j)$, $f_6'(j)$ остаются положительными, что допускает интерпретацию их как функций распределения типа Бозе-Эйнштейна. Таким образом, функции $r_5(j)$, $r_6(j)$, $f_5'(j)$, $f_6'(j)$ описывают состояния со смешанной статистикой внутри отрезка $j \in [1; N_3]$.

Далее находим статистические суммы $f_{1c}, f_{3c}, f_{5c}, f_{6c}$

$$f_{1c} = \sum_{j=1}^{N_3} f_1'(j)\,; \quad f_{3c} = \sum_{j=1}^{N_3} f_3'(j)\,; \quad f_{5c} = \sum_{j=1}^{N_3} f_5'(j)\,; \quad f_{6c} = \sum_{j=1}^{N_3} f_6'(j) \tag{15}$$

и определяем соответствующие вероятности

$$p_{11}(j) = f_1'(j)/f_{1c}\,; \quad p_{12}(j) = f_5'(j)/f_{5c}\,; \quad p_{21}(j) = f_6'(j)/f_{6c}\,; \quad p_{22}(j) = f_3'(j)/f_{3c}\,. \tag{16}$$

По найденным собственным значениям $M_1(j)$, $\left|M_5(j)\right|, \left|M_6(j)\right|, M_3(j)$ и соответствующих им вероятностям $p_{11}(j)$, $p_{12}(j)$, $p_{21}(j)$, $p_{22}(j)$ можно найти математические ожидания M_{1c}, M_{5c}, M_{6c}, M_{3c} и среднеквадратические отклонения $\sigma_{1c}, \sigma_{5c}, \sigma_{6c}, \sigma_{3c}$, используя стандартные формулы теории вероятностей, например

$$M_{1c} = \sum_{j=1}^{N_3} M_1(j) p_{11}(j)\,; \quad D_{1c} = \sum_{j=1}^{N_3} M_1^2(j) p_{11}(j) - M_{1c}^2 .; \quad \sigma_{1c} = \left(D_{1c}\right)^{1/2}. \tag{17}$$

Аналогично находим математические ожидания J_{1c}, J_{5c}, J_{6c}, J_{3c} и среднеквадратические отклонения δ_{1c}, δ_{5c}, δ_{6c}, δ_{3c} для переменной j, например

$$J_{1c} = \sum_{j=1}^{N_3} j\, p_{11}(j)\,; \quad \Delta_{1c} = \sum_{j=1}^{N_3} j^2 p_{11}(j) - J_{1c}^2 .; \quad \delta_{1c} = \left(\Delta_{1c}\right)^{1/2}. \tag{18}$$

Численное моделирование и анализ результатов. В работе [14] получены решения нелинейного уравнения для двух ветвей безразмерной комплексной функции смещения $u(z)$. В данной работе исследуется только первая ветвь, для которой явное выражение имеет вид

$$u(z) = u_{\varepsilon 1}(z) = (g_1 - g_2 + g_4)/2\,; \quad g_4 = [(g_1 + g_2)^2 - g_3]^{1/2}\,. \tag{19}$$

Функции g_1, g_2, g_3 по аналогии с работами [13, 14] моделируем выражениями

$$g_1(u,\alpha) = (1-\alpha)(1 - 2sn^2(u - u_0, k))/(p_0 - p_1 n - p_2 m - p_3 j)\,;$$

$$g_2(z,\alpha) = 2^{-2\alpha} 3^{3\alpha - 1/2} \,|\, z - z_c \,|^{-\alpha}\, \Gamma(\alpha + 1/3)\Gamma(\alpha + 2/3)/\sqrt{\pi}\, \Gamma(\alpha + 1/2)\,;$$

$$g_3(z,\alpha) = 3^{3\alpha - 1/2}\, 2 \,|\, z - z_c \,|^{-2\alpha}\, \Gamma(\alpha + 1/3)\Gamma(\alpha + 2/3)/\pi\,. \tag{20}$$

Здесь p_0, p_1, p_2, p_3 – некоторые управляющие параметры, Γ – гамма функция, k – модуль эллиптического синуса sn. Значения исходных данных: $k = 0.5$; $\alpha = 0.5$; $u_0 = 29.537$; $p_0 = 0.01$; $p_1 = 0.00075$; $p_2 = p_3 = 0$; $z_c = 2.813$. Указанный выбор параметров p_0, p_1, p_2, p_3 соответствует состоянию прямоугольной решетки с фрактальной дислокацией, локализованной внутри области nOm

параллельно оси Om. Начальное условие $u_{1,1} = 0 + 0 \cdot i$; $n = \overline{1;30}$; $m = \overline{1;40}$. Заполнение матрицы $\hat{u}$ осуществляется по строкам. Решение нелинейных уравнений (19), (20) находится методом итераций по индексу m при $z = z_1$ и $z = z_2$, определяемых выражениями (1). Далее находим искомые матрицы $\hat{u}(z_1)$ и $\hat{u}(z_2)$ с элементами $u_{\varepsilon 1}(z_1) = u_{nm}(z_1)$ и $u_{\varepsilon 1}(z_2) = u_{nm}(z_2)$. Характерное поведение функций $\mathrm{Re}\,u_{\varepsilon 1}(z_1)$, $\mathrm{Im}\,u_{\varepsilon 1}(z_1)$ и $\mathrm{Re}\,u_{\varepsilon 1}(z_2)$, $\mathrm{Im}\,u_{\varepsilon 1}(z_2)$ от целочисленных индексов n, m на граничной узловой плоскости $j = 1$ отражено на рис. 1 и рис. 2, соответственно.

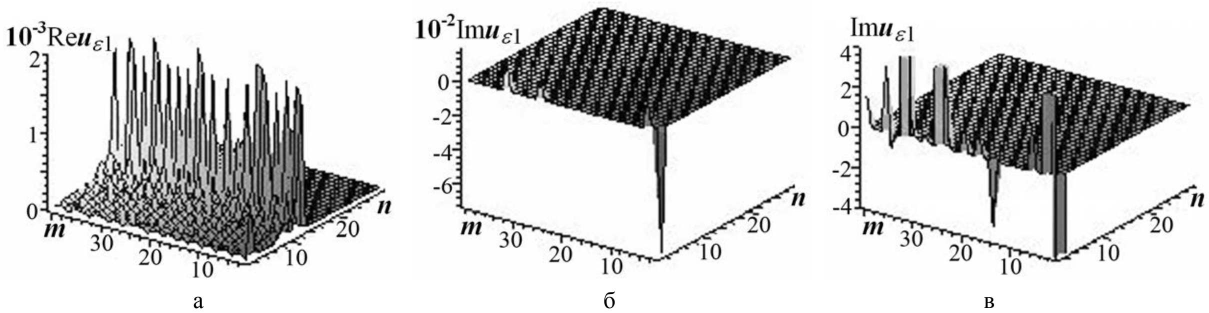


Рис. 1. Зависимости реальной (а) $\mathrm{Re}\,u_{\varepsilon 1}(z_1)$ и мнимой (б, в) $\mathrm{Im}\,u_{\varepsilon 1}(z_1)$ частей безразмерной функции смещения от целочисленных индексов n, m при $j = 1$; в) фрагмент $\mathrm{Im}\,u_{\varepsilon 1}(z_1) \in [-4, 4]$.

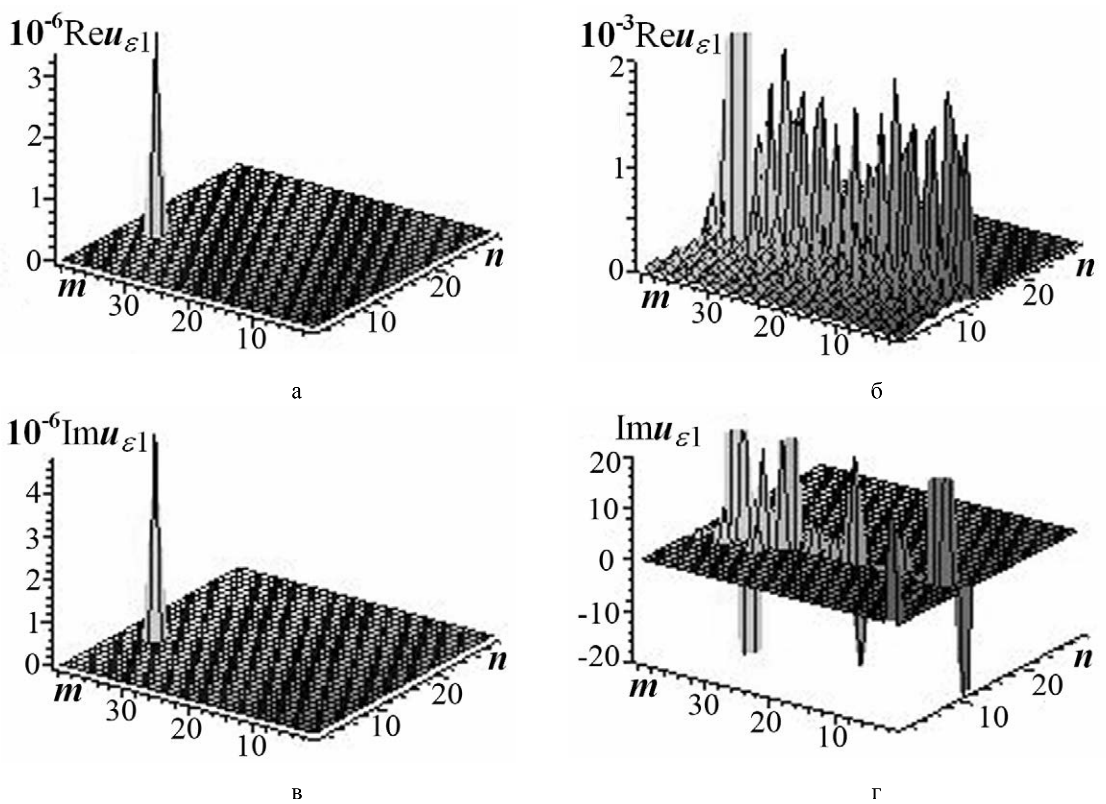


Рис. 2. Зависимости реальной (а, б) $\mathrm{Re}\,u_{\varepsilon 1}(z_2)$ и мнимой (в, г) $\mathrm{Im}\,u_{\varepsilon 1}(z_2)$ частей безразмерной функции смещения от целочисленных индексов n, m при $j = 1$; б) фрагмент $\mathrm{Re}\,u_{\varepsilon 1}(z_2) \in [-1, 1000]$; г) фрагмент $\mathrm{Im}\,u_{\varepsilon 1}(z_2) \in [-20, 20]$.

На другой граничной узловой плоскости $j = 67$ поведение указанных функций такое, что рис. 1 переходит в рис. 2 и наоборот, что следует также из соотношений (1). Анализ указанного поведения показывает, что поле деформации в общем случае является стохастическим, комплексным. Ядро дислокации (плоскости особых точек) локализовано внутри области nOm параллельно оси Om вблизи $n \approx 14$ (рис. 1,а; рис. 2,а,б). Смещения узлов в плоскостях особых точек (в ядре дислокации) имеют стохастические амплитуды. Это связано с выбором критического значения $z_c = 2.813$, не совпадающего с соседними узловыми значениями $z(j)$. Узлы решетки при $n \in [1;14]$ находятся в стохастическом возбужденном состоянии, при $n > 14$ – в смещенном состоянии (смещения узлов практически постоянные со значениями $\mathrm{Re}u_{\varepsilon 1}(z_1) \approx -0.55$, рис. 1,а; $\mathrm{Re}u_{\varepsilon 1}(z_2) \approx -0.48$, рис. 2,б). Отличные от нуля значения $\mathrm{Im}u_{\varepsilon 1}(z_1)$ (рис. 1,б) локализованы практически в узкой области $n \in [1;3]$, а $\mathrm{Im}u_{\varepsilon 1}(z_2)$ (рис. 2,г) – практически во всей области $n \in [1;14]$, что свидетельствует о наличие эффективного затухания смещений указанных узлов решетки. Амплитуды смещений узлов решетки в ядре дислокации (рис. 2,а) существенно больше (реально наблюдается пик) соответствующих амплитуд (рис. 1,а).

Получены также зависимости функций $\mathrm{Re}u_{\varepsilon 1}(z_1)$, $\mathrm{Im}u_{\varepsilon 1}(z_1)$ и $\mathrm{Re}u_{\varepsilon 1}(z_2)$, $\mathrm{Im}u_{\varepsilon 1}(z_2)$ от целочисленных индексов n, m для внутренних узловых плоскостей $j \in (1; N_3)$, но в данной работе они не приводятся. Однако, далее анализ поведения поля деформации от j проводится в терминах усредненных функций по целочисленным индексам n, m (рис. 3).

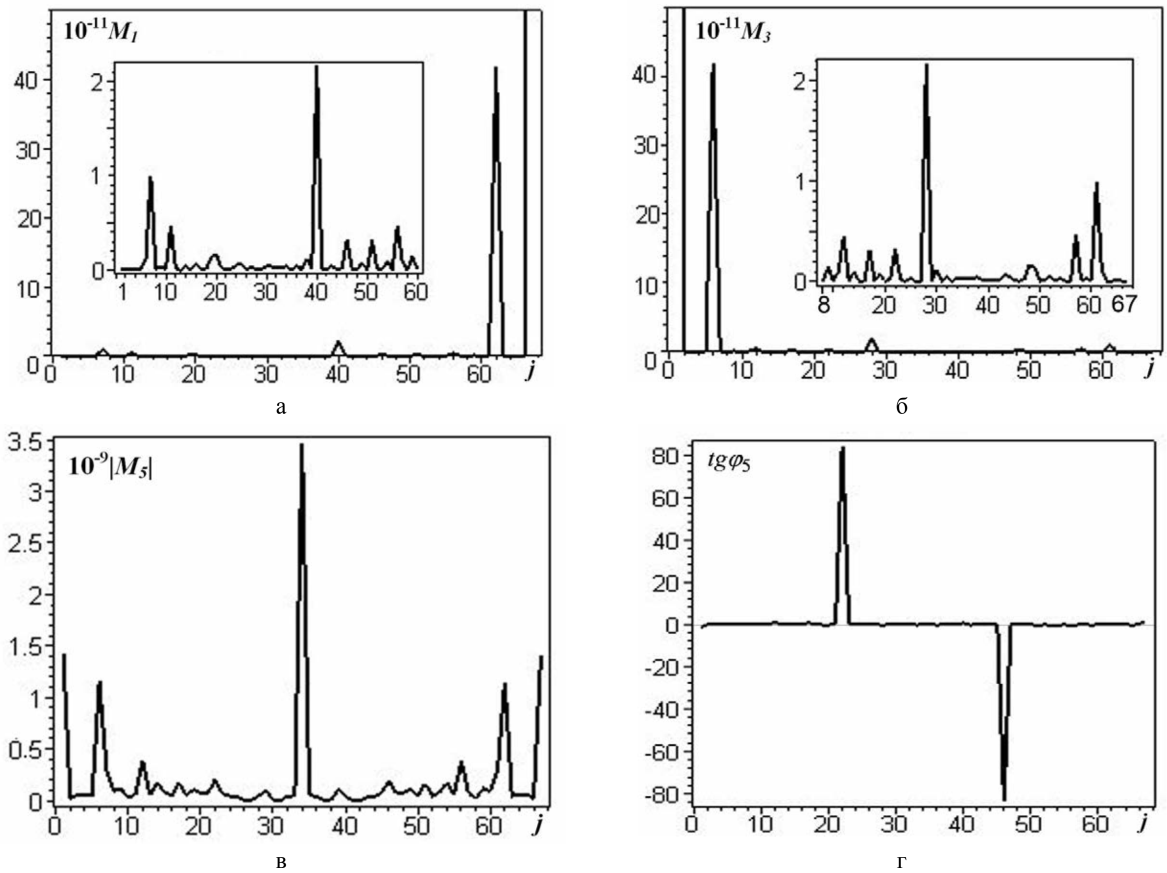


Рис. 3. Зависимости усредненных функций от целочисленного индекса j узловой плоскости:
а) M_1; б) M_3; в) $|M_5|$; г) $tg\varphi_5 = M_5'' / M_5'$. Вставки даны на а) для $j \in [1;60]$ и на б) для $j \in [8;67]$.

Данные рис. 3 можно интерпретировать как возможные собственные значения случайных величин $M_1(j)$ (рис. 3,а), $M_3(j)$ (рис. 3,б), $|M_5(j)| = |M_6(j)|$ (рис. 3в). Для граничных узловых плоскостей с $j = 1$ и $j = 67$ получены следующие значения усредненных функций (рис. 3,а,б,в) $M_1(1) = M_3(67) = 7.886 \cdot 10^7$; $M_1(67) = M_3(1) = 3.415 \cdot 10^{13}$; $|M_5(1)| = |M_5(67)| = 1.409 \cdot 10^9$. На внутренних узловых плоскостях наблюдаются основные (с максимальной амплитудой) пики: при $j = 40$ со значениями $M_1(40) = 2.163 \cdot 10^{11}$ (рис. 3,а); при $j = 28$ – $M_3(28) = 2.163 \cdot 10^{11}$ (рис. 3,б); при $j = 34$ – $|M_5(34)| = M_5'(34) = 3.456 \cdot 10^9$ и $M_5''(34) = 0$ (рис. 3,в), что свидетельствует об отсутствии эффективного затухания. Рис. 3,в и вставки (рис. 3,а; 3,б) демонстрируют наличие дополнительных пиков для других значений j. На рис. 3,г приведена зависимость $tg\varphi_5 = M_5'' / M_5'$ от целочисленного индекса j узловой плоскости. Для граничных узловых плоскостей получены значения: $j = 1$, $M_5' > 0$,

$M_5'' < 0$, $tg\varphi_5 = -1.39$, $\varphi_5 = 125.70^\circ$; $j = 67$, $M_5' > 0$, $M_5'' > 0$, $tg\varphi_5 = 1.39$, $\varphi_5 = 54.30^\circ$. На рис. 3,г наблюдаются пики на зависимости $tg\varphi_5(j)$ для индексов $j = 22$ (со значениями $M_5' > 0$, $M_5'' > 0$, $tg\varphi_5 = 83.25$, $\varphi_5 = 89.31^\circ$) и $j = 46$ (со значениями $M_5' > 0$, $M_5'' < 0$, $tg\varphi_5 = -83.25$, $\varphi_5 = 90.69^\circ$). Для остальных внутренних узловых плоскостей наблюдается стохастическое поведение $tg\varphi_5(j)$, что связано со стохастической сменой знаков у функции M_5'', при этом $|tg\varphi_5(j)| < 1$ и $0 < \varphi_5 < 45^\circ$ или $135^\circ < \varphi_5 < 180^\circ$. Полученные результаты свидетельствуют о стохастическом поведении фазы $\varphi_5(j)$.

На основе выражений (11)-(14) были получены усредненные функции $f_{11}, r_{12}, r_{21}, f_{22}$ (рис. 4).

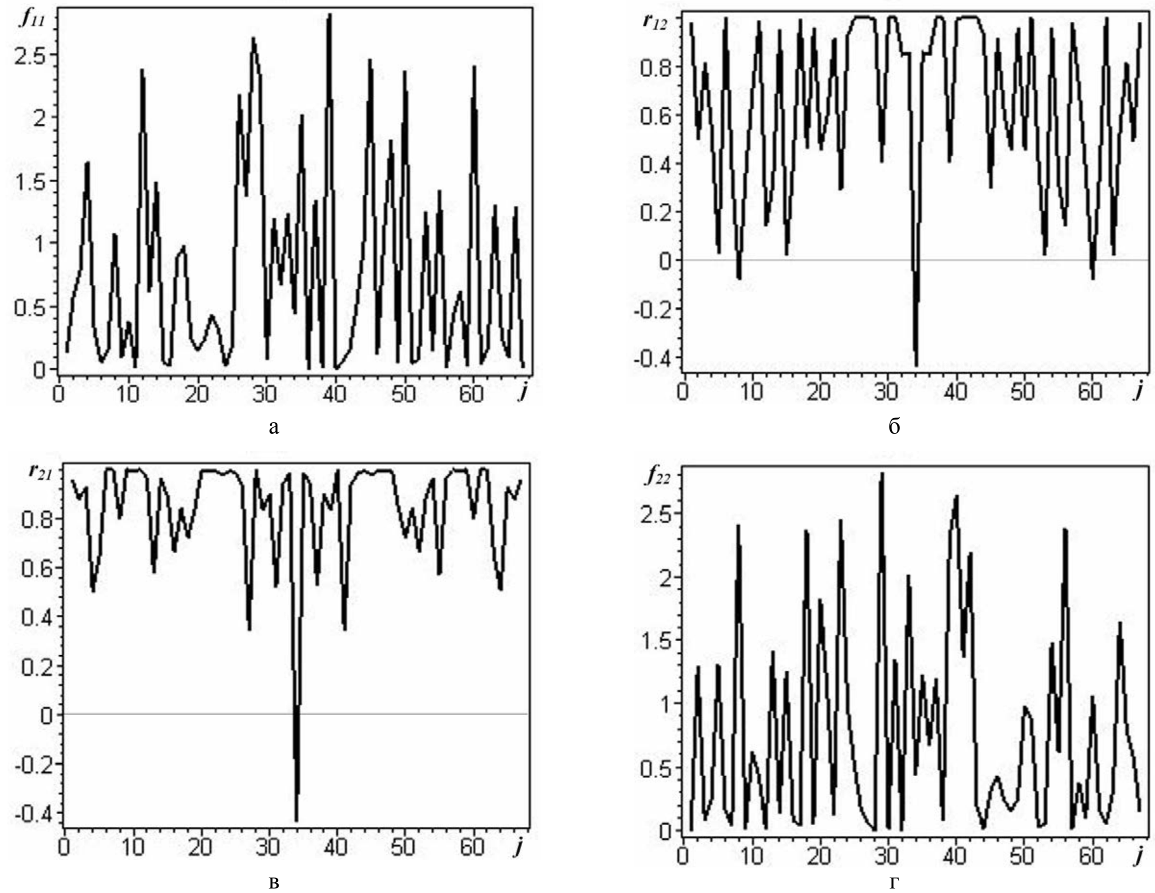


Рис. 4. Зависимости усредненных функций $f_{11}, r_{12}, r_{21}, f_{22}$ от целочисленного индекса j узловой плоскости.

Функции f_{11}, f_{22} являются положительными и принимают значения в интервале $(0;\ 2.9)$ во всей области изменения j (рис. 4,а,г). Функции r_{12}, r_{21} являются знакопеременными (рис. 4,б,в) и принимают значения в интервале $(-0.44;\ 1.0)$. Функция r_{12} становится отрицательной для трех внутренних узловых плоскостей с $j = 8;\ 34;\ 60$ (в этом случае выполняется условие $S_5 < |M_5|^2$), при этом $r_{12}(8) = $ $= r_{12}(60) = -0.077$, $r_{12}(34) = -0.437$. Функция r_{21} становится отрицательной для одной внутренней узловой плоскости с $j = 34$ (выполняется условие $S_6 < |M_6|^2$), при этом $r_{21}(34) = -0.437$.Поведение функций r_{12}, r_{21} от j (рис. 4,б,в) демонстрирует изменение статистики с типа Ферми-Дирака на статистику типа Бозе-Эйнштейна для отдельных внутренних узловых плоскостей, что подтверждает теоретический вывод о наличии смешанной статистики внутри отрезка $j \in [1; N_3]$.

На основе выражений (16) были получены вероятности $p_{11}, p_{12}, p_{21}, p_{22}$ (рис. 5), как функций от целочисленного индекса j. Найденные вероятности соответствуют возможным собственным значениям случайных величин $M_1(j)$ (рис. 3,а), $M_3(j)$ (рис. 3,б), $|M_5(j)| = |M_6(j)|$ (рис. 3, в).

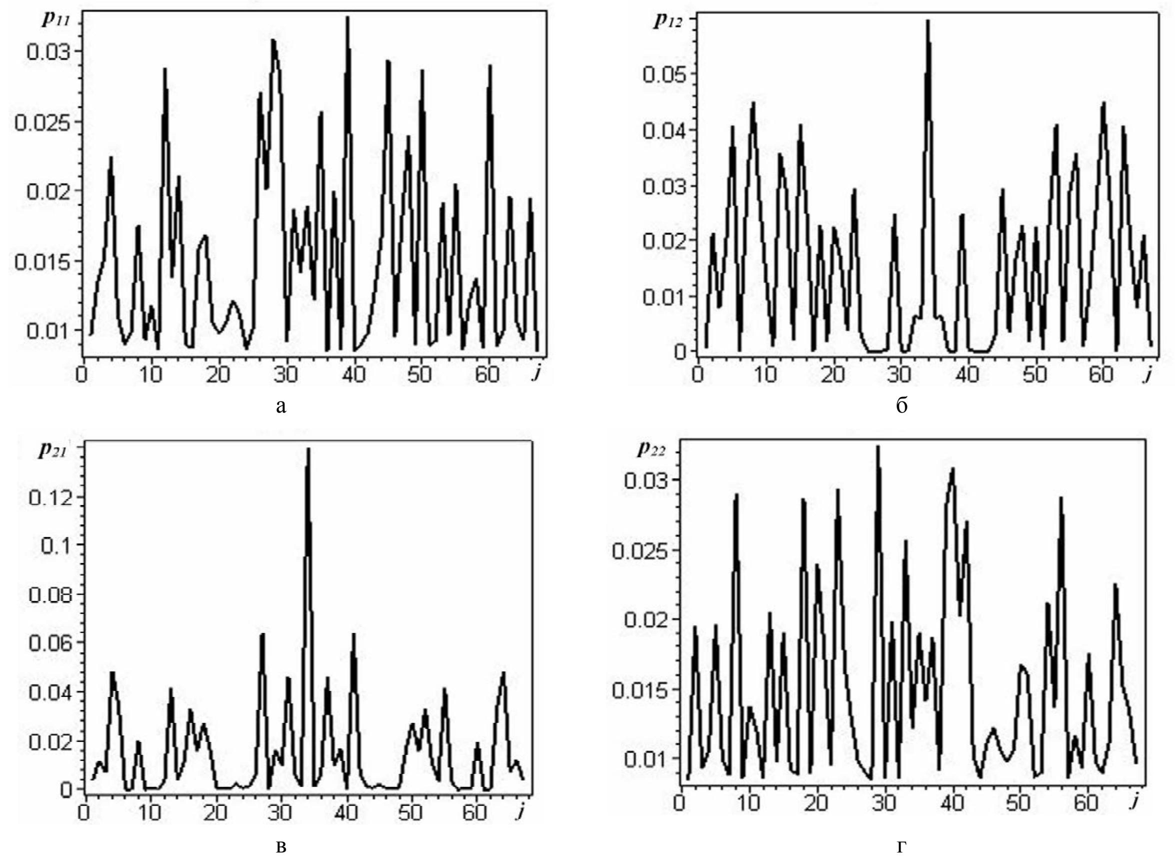


Рис. 5. Зависимости вероятностей $p_{11}, p_{12}, p_{21}, p_{22}$ от целочисленного индекса j узловой плоскости.

Далее на основе выражений (17), (18), данных рис. 3 и рис. 5 выполняем дополнительное усреднение по переменной z и находим числовые характеристики: математические ожидания $M_{1c} = M_{3c} = 3.376 \cdot 10^{11}$, $M_{5c} = 3.065 \cdot 10^{8}$, $M_{6c} = 5.350 \cdot 10^{8}$; среднеквадратические отклонения $\sigma_{1c} = \sigma_{3c} = 31.560 \cdot 10^{11}$, $\sigma_{5c} = 8.022 \cdot 10^{8}$, $\sigma_{6c} = 11.840 \cdot 10^{8}$. Аналогично получим математические ожидания $J_{1c} = 34.22$, $J_{5c} = J_{6c} = 34.00$, $J_{3c} = 33.78$ и среднеквадратические отклонения $\delta_{1c} = \delta_{3c} = 18.58$, $\delta_{5c} = 21.33$, $\delta_{6c} = 18.15$ для переменной j. Полученные числовые характеристики хорошо согласуются с поведением функций на рис. 3.

Выводы. Поле деформации фрактальной дислокации в общем случае является стохастическим, комплексным. Отклонения узлов в плоскостях особых точек (в ядре дислокации) имеют ярко выраженные стохастические амплитуды. Анализ поведения поля деформации в терминах усредненных функций по целочисленным индексам n, m выявляет наличие основных (с максимальной амплитудой) и дополнительных пиков на зависимостях усредненных функций от j, а также стохастическое поведение фазы $\varphi_5(j)$. Показано изменение статистики с типа Ферми-Дирака на статистику типа Бозе-Эйнштейна для отдельных внутренних узловых плоскостей, что подтверждает теоретический вывод о наличии смешанной статистики внутри отрезка $j \in [1; N_3]$. Числовые характеристики, полученные при дополнительном усреднении по переменной z (или j), хорошо согласуются с характерным поведением усредненных функций.

РЕЗЮМЕ

Об'єктом дослідження є фрактальна дислокація. Розглядається модельний зразок кінцевих розмірів з об'ємною решіткою у вигляді прямокутного паралелепіпеда. Будується двухточечная модель на основі раніше запропонованої одноточечної моделі, в якій використовувалася теорія дробового обчислення і концепція фрактала. Досліджуються особливості поведінки поля деформації фрактальної дислокації і можливі кореляційні зв'язки. Встановлено яскраво виражена стохастична поведінка амплітуд і фази у усереднених функцій. Методом чисельного моделювання

показано зміну статистики з типу Фермі-Дірака на статистику типу Бозе-Ейнштейна для окремих внутрішніх вузлових площин. Це підтверджує теоретичний висновок про наявність змішаної статистики.

Ключові слова: фрактальна дислокація, комплексне поле деформації, двухточечная модель, статистичні властивості, змішана статистика.

SUMMARY

The object of this study is the fractal dislocation. A model sample of a finite size with the volumetric lattice in the form of a rectangular parallelepiped is being considered. We are constructing a two-point model based on the previously proposed one-point model in which a theory of fractional calculus and the concept of fractal were used. The features of the behaviour of the fractal dislocation deformation field and the possible correlation connections are investigated. The strongly pronounced stochastic behaviour of amplitudes and a phase of average functions are established. The change of the statistics from Fermi-Dirac type to the statistics of Boze-Einstein type for separate internal nodal planes is shown by the method of numerical modeling. This confirms the theoretical conclusion that there is mixed statistics.

Keywords: fractal dislocation, complex deformation field, two-point model, statistical properties, mixed statistics.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Башаров А.М. Когерентный контроль квантовых корреляций в атомных системах / А.М. Башаров, А.А. Башкеев, Э.А. Маныкин // ЖЭТФ. – 2005. – Т. 127, вып. 3. – С. 536-550.
2. Мирошниченко Г.Г. Дискретное фотодетектирование для протоколов линейных оптических квантовых вычислений и коммуникаций / Г.Г. Мирошниченко // ЖЭТФ. – 2011. – Т. 139, вып. 6. – С. 1055-1065.
3. Скалли М.О. Квантовая оптика: Пер. с англ. / М.О. Скалли, М.С. Зубайри / Под ред. В.В. Самарцева. – М.: Физматлит, 2003. – 512 с.
4. Alexander S. Relaxation and nonradiative decay in disordered systems. I. One-fracton emission / S. Alexander, O. Entin-Wohlman, R. Orbach // Phys. Rev. B. – 1985. – Vol. 32, No 10. – P. 6447-6455.
5. Alexander S. Relaxation and nonradiative decay in disordered systems. II. Two-fracton inelastic scattering / S. Alexander, O. Entin-Wohlman, R. Orbach // Phys. Rev. B. – 1986. – Vol. 33, No 6. – P. 3935-3946.
6. Alexander S. Relaxation and nonradiative decay in disordered systems. III. Statistical character of Raman (two-quanta) spin-lattice relaxation / S. Alexander, O. Entin-Wohlman, R. Orbach // Phys. Rev. B. – 1987. – Vol. 35, No 3. – P. 1166-1173.
7. Неупругое рассеяние света на фрактальных колебательных модах в полимерах / В.А. Багрянский, В.К. Малиновский, В.Н. Новиков и др. // Физика твердого тела. – 1988. – Т. 30, вып. 8. – С. 2360-2366.
8. Рыжов В.А. Низкоэнергетические либрационные возбуждения в стеклообразном полиметилметакрилате / В.А. Рыжов // Физика твердого тела. – 2002. – Т. 44, вып. 12. – С. 2229-2233.
9. Алексеев В.А. Статистика мезоскопических ансамблей бозонов и фермионов / В.А. Алексеев // ЖЭТФ. – 2011. – Т. 139, вып. 6. – С. 1066-1073.
10. Nielsen M.A. Quantum Computation and Quantum Information / M.A Nielsen and I.L. Chuang. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000. – 676 p.
11. Bouwmeester D. The Physics of Quantum Information / D. Bouwmeester, A. Ekert and A. Zeilinger. – Berlin: Springer-Verlag, 2000. – 314 p.
12. Шпак А.Н. Кластерные и наноструктурные материалы. Т. 1 / А.Н. Шпак, Ю.А. Куницкий, В.Л. Карбовский. – К.: издательский дом «Академпериодика», 2001. – 588 с.
13. Абрамов В.С. Фрактальная дислокация как один из неклассических структурных объектов в наноразмерных системах / В.С. Абрамов // Металлофизика и новейшие технологии. – 2011. – Т. 33, № 2. – С. 247-251.
14. Абрамов В.С. Поведение поля деформации фрактальной дислокации при наличии бифуркаций / В.С. Абрамов // Вісн. Донецьк. нац. ун-у. Сер. А: Природничі науки. – 2011. – № 2. – С. 23-29.
15. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос / Х.-Ю. Штокман. – М.: Физматлит, 2004. – 376 с.

Поступила в редакцию 31.01.2012

УДК 621.1

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕНСИФИКАЦИИ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛООБМЕНА ПРИ ИМПУЛЬСНОЙ ПОДАЧЕ ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ

А. Б. Бирюков
Донецкий национальный технический университет, г. Донецк

Экспериментально изучены некоторые аспекты интенсификации конвективного теплообмена при поперечном обтекании цилиндрического тела и импульсном режиме течения среды, создаваемом при вращении круглой заслонки в полости подводящего трубопровода.

Ключевые слова: конвективный теплообмен, течение среды, обтекание тела, критериальное уравнение.

Введение. В настоящее время сохранение предприятиями устойчивых позиций на рынке возможно только при постоянной работе над снижением уровня энергопотребления и повышением качества продукции. Данная задача требует для своего решения не только привлечения инвестиционных средств, но и постоянного проведения научных исследований и внедрения их результатов. Актуальным является поиск путей интенсификации теплообменных процессов с участием газообразных сред. Применительно к металлургической теплотехнике, данное направление исследований обусловлено тем, что сравнительно низкие значения коэффициентов конвективной теплоотдачи от газообразных сред или к ним определяют значительную продолжительность операций низкотемпературного нагрева или воздушного охлаждения материалов в печах, что снижает их технико-экономические показатели.

Теоретические аспекты различных подходов интенсификации конвективного теплообмена проанализированы в работах [1, 2]. Среди публикаций на тему интенсификации теплообмена в камерах печей за счет реализации импульсных режимов преобладают исследования практического характера, дающие представление об уровне экономии топлива, достигнутом авторами в конкретном случае [3 – 5]. Для целенаправленного достижения эффекта интенсификации теплообмена необходимо наличие расчетных зависимостей, позволяющих оценивать достигаемые значения коэффициента теплоотдачи в зависимости от параметров пульсации.

В данной работе решается задача экспериментальной проверки возможности интенсификации конвективного теплообмена при поперечном обтекании цилиндра и импульсном режиме течения среды. В результате обработки экспериментальных данных выводится критериальное уравнение, описывающее конвективный теплообмен для случая пульсации, созданной при вращении круглой заслонки в полости подводящего патрубка.

Постановка и решение задачи. Конвективный теплообмен при поперечном обтекании цилиндрических тел и стационарном течении среды описывается при помощи следующих критериальных уравнений [1]:

$$\mathrm{Nu} = 0{,}56\,\mathrm{Re}^{0{,}5}\cdot \mathrm{Pr}_{ж}^{0{,}36}\left(\mathrm{Pr}_{ж}/\mathrm{Pr}_{\text{ст}}\right)^{0{,}25}, \text{ при Re<1000}$$

$$\mathrm{Nu} = 0{,}28\,\mathrm{Re}^{0{,}6}\cdot \mathrm{Pr}_{ж}^{0{,}36}\left(\mathrm{Pr}_{ж}/\mathrm{Pr}_{ст}\right)^{0{,}25}, \text{ при Re≥1000.} \quad (1)$$

Здесь *Nu* – критерий Нуссельта; *Re* – критерий Рейнольдса; *Pr* – критерий Прандтля; индексы «ж» и «ст» обозначают, что значение критерия берется при температуре среды в ядре потока и при температуре обтекаемой поверхности соответственно.

Критерий Нуссельта и Рейнольдса определяются так:

$$\mathrm{Nu} = \alpha_{\text{к}} \cdot \mathrm{d}/\lambda, \quad \mathrm{Re} = w \cdot d/\nu,$$

где $\alpha_{\text{к}}$ – коэффициент конвективной теплоотдачи, Вт/(м^2·К); *d* – характерный для рассматриваемого вида конвективного теплообмена размер твердой поверхности, м; λ – коэффициент теплопроводности греющей или охлаждающей среды при ее температуре, Вт/(м·К); *w* – характерная скорость потока газа или жидкости, м/с; ν – кинематическая вязкость потока, вычисленная при его температуре, м^2/с.

Критерий Прандтля может быть найден в справочной литературе в зависимости от характерной температуры газового потока. По вычисленному при помощи соответствующего критериального уравнения значению критерия Нуссельта определяется искомое значение коэффициента конвективной теплоотдачи. Очевидно, что вид критериального уравнения, описывающего конвективный теплообмен при импульсном течении сред, должен быть изменен или расширен за счет введения дополнительных критериев.

С использованием основных положений теории размерностей установлено, что рассматриваемая задача с одним определяемым параметром (значение коэффициента конвективной теплоотдачи) и семью определяющими независимыми факторами (характерный размер тела, средняя скорость течения среды, коэффициент теплопроводности среды, теплоемкость среды, плотность среды, коэффициент динамической вязкости, частота пульсации расхода среды) может быть описана при помощи (1+7- 4) четырех независимых критериев.

Для импульсного режима обтекания тел принято решение взять за основу базовое критериальное уравнение (1) с набором известных экспериментальных коэффициентов при критериях Nu, Re, Pr. Влияние импульсности учитывается за счет введения критерия Sr (Струхаль) с двумя неизвестными коэффициентами:

$$\mathrm{Nu}_{\text{имп}} = 0{,}28 \cdot \mathrm{a} \cdot \mathrm{Re}^{0,6} \cdot \mathrm{Pr}_{\text{ж}}^{0,36} \left(\mathrm{Pr}_{\text{ж}} / \mathrm{Pr}_{\text{ст}}\right)^{0,25} \cdot (\mathrm{Sr})^{\mathrm{b}}, \tag{2}$$

где a и b – неизвестные коэффициенты, значения которых определяются из эксперимента.

Для экспериментального изучения влияния импульсного характера подачи газообразной среды на значение коэффициента конвективной теплоотдачи был создан экспериментальный комплекс, включающий в себя: 1 – дутьевой вентилятор, 2 – главная регулирующая заслонка, 3 – расходомер, 4 – узел прерывания течения воздуха, 5 – диффузор для истечения воздуха, 6 – изучаемое тело, 7 – штатив с консолью, 8 – блок питания для нагрева изучаемого тела, 9 – подвод напряжения к телу, 10 – термопара (рис. 1).

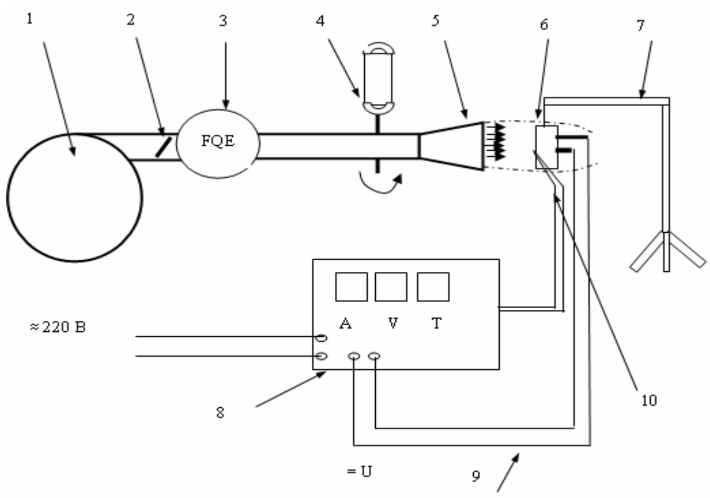


Рис. 1. Схема установки для изучения конвективного теплообмена

Созданный лабораторный комплекс включает в себя: штатив с подвешенным телом цилиндрической формы, подогреваемым электрическим токов и охлаждаемым за счет конвекции; блок питания, выдающий постоянное напряжение, регулируемое в диапазоне от 0 до 20 В, снабженный амперметром и вольтметром; хромель-алюмелевая термопара и цифровой прибор, снабженный функцией обработки сигнала от термопары и выдачи значения термопары в цифровом формате; устройство для создания пульсаций (рис. 2), принцип действия которого основан на вращении круглой заслонки в полости трубки круглого сечения (диаметр трубки 30 мм, диаметр заслонки 26 мм, выходной диаметр диффузора 60 мм).

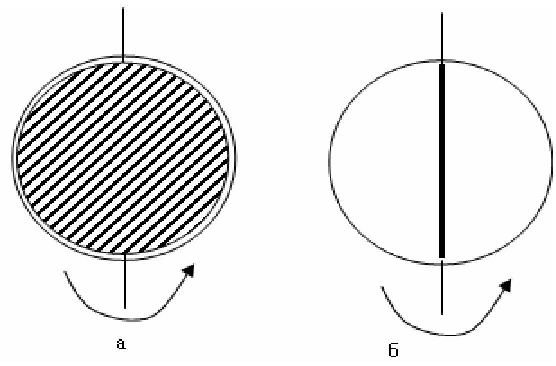


Рис. 2. Крайние положения устройства для создания пульсаций (а – полностью закрыто, б – полностью открыто)

Для проведения экспериментов использовалось сопротивление ПЭВ-20, имеющее цилиндрическую форму (высота 36 мм, наружный диаметр 13 мм). Внутренние отверстия были заглушены теплоизолирующими пробками. В середине тела по высоте к его поверхности приклеен рабочий спай термопары (ТХА) и вся поверхность в один слой обернута изоляционной лентой толщиной 0,1 мм.

В основу работы экспериментального комплекса положен известный подход, согласно которому при подогреве тел электрическим током и охлаждении отдачей тепла в окружающую среду через некоторое время наступает тепловое равновесие. При этом тепловая мощность, отводимая от тела, равна подводимой тепловой мощности. Эта ситуация характеризуется определенной температурой поверхности исследуемых тел. Измеряя эту температуру и подводимую тепловую мощность, можно вычислить значение коэффициента конвективной теплоотдачи

$$\alpha_{\text{конв}} = \left(\mathrm{k} \cdot \mathrm{Q}\text{-}\mathrm{F} \cdot \varepsilon \cdot \mathrm{C}_0 \cdot \left[\left(\frac{\mathrm{t}_{\text{изм}} + 273}{100} \right)^4 - \left(\frac{\mathrm{t}_{\text{ос}} + 273}{100} \right)^4 \right] \right) \Big/ \left(\mathrm{F} \cdot (\mathrm{t}_{\text{изм}} - \mathrm{t}_{\text{ос}}) \right), \tag{3}$$

где Q – подводимая тепловая мощность, Вт; F – боковая поверхность охлаждаемого тела, $м^2$; k – тарировочный коэффициент, учитывающий утечку тепла от нагреваемого тела через подвеску; ε – степень черноты поверхности изучаемого тела; C_0=5,67 – коэффициент излучения абсолютно черного тела, Вт/($м^2 \cdot К^4$); $t_{изм}$ – измеренная температура поверхности изучаемого тела, °C; $t_{ос}$ – температура окружающей среды вокруг изучаемого тела, °С.

Вначале проведены исследования по определению значения тарировочного коэффициента установки для безымпульсных режимов поперечного обтекания цилиндрических тел. Для каждой скорости обдува, устанавливаемой при помощи главной заслонки, фиксируются установившееся значение равновесной температуры поверхности тела, температура среды, истекающей из диффузора. При помощи выражения (1) вычисляется соответствующее скорости течения среды значение коэффициента теплоотдачи. Далее определяется такое значение тарировочного коэффициента, при котором обе части выражения (3) становятся равными.

В результате проведения ряда опытов (табл. 1), установлено значение тарировочного коэффициента установки в проведенных опытах. Значения этой величины в различных опытах колебались от 0,903 до 0,916; максимальная относительная разница между тарировочными коэффициентами составляла не более 1,6%. Отличие полученных значений тарировочного коэффициента от единицы определяется рассеиванием части тепла от обдуваемого тела через поддерживающую систему. Расхождение между значениями тарировочных коэффициентов в различных опытах обусловлено колебаниями напряжения в сети, изменениями мощности, выделяемой на нагреваемом теле, а также конечной ценой деления расходомера и возможными ошибками, связанными с округлением расходов среды.

Таблица 1

Результаты экспериментов по определению тарировочного коэффициента для созданной экспериментальной установки

№ эксп.	Подводимое напряжение, В	Выделяющаяся тепловая мощность, Вт	Скорость вытекания среды из диффузора, м/с	Значение равновесной температуры поверхности тела, °С	Значение коэффициента конвективной теплоотдачи по критериальному уравнению, Вт/(м^2·К)	Значение тарировоного коэффициента
1	10	5,29	4,835	69	69,635	0,916
2	10	5,29	4,095	72	63,034	0,9012
3	10	5,29	2,844	81	50,684	0,903

Для изучения возможности усиления конвективного теплообмена при импульсном режиме подачи теплоносителя принято значение тарировочного коэффициента 0,91. В рамках проведенных экспериментальных исследований изучались импульсные режимы при изменении расхода, определяемом конструкцией устройства для создания пульсации. Всего было проведено 9 экспериментов, в которых варьировались средняя скорость течения среды и частота пульсации (частота вращения заслонки). Данные о значениях факторов, установленных в эксперименте, и значениях искомого параметра приведены в табл. 2.

Таблица 2

Условия проведения экспериментов по изучению теплообмена при импульсном течении среды и их результаты.

№ эксп.	Характеристика подачи среды		Значение коэффициентов теплоотдачи, Вт/(м^2·К)		Значения характерных критериев в эксперименте			
	Средняя скорость среды у тела, м/с	Частота вращения заслонки, об/мин	в эксперименте	В аналог. безимпульсном режиме	Re	$Pr_{ст}$	Sr	$Nu_{имп}$
1	4,266	90	81,29	64,71	3760	0,694	0,0306	43,33
2	4,266	69	78,68	64,71	3760	0,694	0,0239	41,94
3	4,266	51	77,44	64,71	3760	0,694	0,0172	41,28
4	3,754	105	78,68	59,99	3309	0,694	0,0402	41,94
5	3,754	75	73,91	59,99	3309	0,694	0,0287	39,40
6	3,754	51	71,71	59,99	3309	0,694	0,0200	38,23
7	2,218	105	59,08	43,71	1955	0,692	0,0689	31,49
8	2,218	75	57,59	43,71	1955	0,692	0,0488	30,70
9	2,218	39	54,79	43,71	1955	0,692	0,0258	29,21

Отношение коэффициентов теплоотдачи при импульсном и безымпульсном режимах отопления может быть определено как отношение соответствующих критериев Нуссельта, взятых по критериальным уравнениям (1) и (2):

$$\alpha_{имп}/\alpha = Nu_{имп}/Nu = a(Sr)^b .$$

Получая для каждого конкретного эксперимента на основании экспериментальных замеров и их обработки $\alpha_{имп}$ и вычисляя по критериальному уравнению (1) α, соответствующее средней скорости течения среды, получаем возможность определения коэффициентов a и b. Наиболее удобно эта задача может быть решена при отображении экспериментальных точек в логарифмических координатах $\ln\left(\alpha_{имп}/\alpha\right), \ln(Sh)$.

Тогда неизвестные коэффициенты b и ln(a) определяются как параметры прямой (множитель перед аргументом и свободный член), проведенной через массив экспериментальных точек при помощи метода наименьших квадратов. Графическое представление обработки экспериментальных данных и нанесенная аппроксимирующая прямая представлены на рис. 3. Таким образом, конвективный теплообмен при поперечном обтекании тел и импульсном характере течения среды с изменением расхода, достигаемым путем вращения круглой заслонки в полости подводящего патрубка, описывается уравнением вида:

$$\mathrm{Nu} = 0.494 \cdot \mathrm{Re}^{0,6} \cdot \mathrm{Pr}_{ж}^{0,36} \left(\mathrm{Pr}_{ж}/\mathrm{Pr}_{ст}\right)^{0,25} \cdot (\mathrm{Sr})^{0.0971}.$$

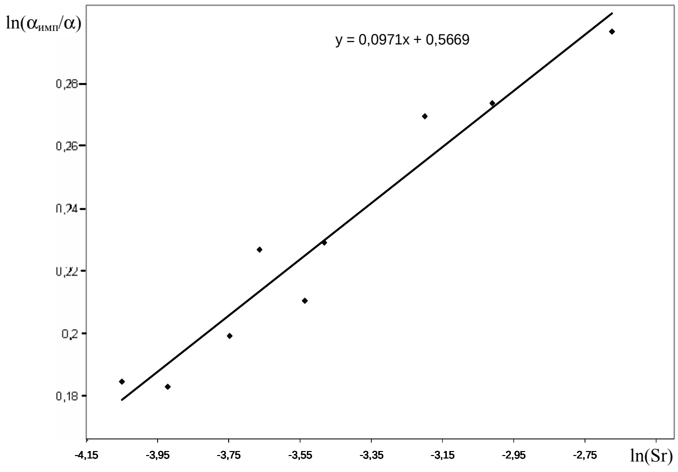


Рис. 3. Экспериментальные данные по изучению теплообмена при импульсном обтекании тел и аппроксимирующая прямая, полученная при помощи метода наименьших квадратов

Значение частоты пульсации для определения значения критерия Sr взята учетверенная частота вращения заслонки, так как за один ее оборот имеет место четыре полуволны смены скорости. В качестве характерного размера условно выбрана полудлина периметра обтекаемого тела. Выбор любого значения частоты пульсации, пропорционального частоте вращения заслонки и диаметру тела поменяет лишь значения коэффициентов b и a с сохранением значения выражения $a(Sr)^b$.

Анализ результатов исследования. В строгом смысле, полученное уравнение описывает конвективный теплообмен для конкретного пульсатора, использованного в лабораторной установке (определенное соотношение диаметров трубопровода и заслонки, относительно расстояние от заслонки до среза диффузора). Полученное уравнение справедливо в диапазоне изменения критерия Sr от 0,017 до 0,068. Следует отметить, что для пульсаторов, действие которых основано на вращающейся заслонке или схожем принципе, результат будет зависеть от соотношения диаметров трубопровода и заслонки. В данной работе выбрано рациональное соотношение достаточное для обеспечения большой амплитуды колебаний (согласно специальным исследованиям она может достигать 50%). Зазор два миллиметра в канале ((30-26)/2=2) позволяет избежать заклинивания устройства и обеспечивает его свободное вращение даже при некоторых смещениях заслонки на оси.

Установленное критериальное уравнение позволяет управлять импульсными режимами теплообмена на количественном и качественном уровнях. Согласно известным представлениям, установленная закономерность усиления теплообмена при импульсном течении среды, объясняется тем, что при волнообразном изменении ее расхода происходит разрушение пограничного гидродинамического слоя, который формируется на значительной части периметра обтекаемых тел и определяет сопротивление теплопередаче.

Интересной особенностью полученного критериального уравнения является достаточно слабое влияние частоты пульсации (показатель степени при критерии *Sr* порядка 0,1) на итоговое значение коэффициента теплоотдачи. В то же постоянная составляющая, связанная с переходом на импульсное отопление, достаточно значительна (1,764). По мнению автора, эта ситуация объясняется противоречивым влиянием частоты пульсации: с одной стороны при увеличении частоты разрушение пограничного слоя происходит более часто, с другой стороны, степень разрушения пограничного слоя с ростом частоты снижается из-за влияния инерционных явлений.

Усиление конвективной составляющей теплообмена на 20-30%, зафиксированное в экспериментах, является достаточно существенным и позволяет, например, достичь примерно такого же ускорения нагрева в низкотемпературных печах или аналогичное ускорение воздушного охлаждения в печах. Что касается нагрева материалов в высокотемпературных печах, указанный уровень усиления конвективного теплообмена, приведет к незначительному усилению итогового теплообмена.

Подобие явлений тепло- и массообмена делает возможным, с некоторой условностью, применение этой закономерности для усиления и осознанного управления интенсивностью массообмена, что особенно важно в технологиях химического синтеза, как классических, так и недавно возникших и динамично развивающихся, например, нанотехнологиях.

Выводы. Определен набор критериев для описания конвективного теплообмена при импульсном режиме течения сред. По сравнениию с уравнением, описывающим безымпульсный теплообмен, должен быть добавлен критерий Струхаля.

Для экспериментального изучения данного явления создана лабораторная установка, создающая пульсацию среды за счет вращения круглой заслонки в полости подводящего патрубка. Тарировочный коэффициент для установки был определен на основании анализа ряда экспериментальных точек, снятых для безымпульсного режима, описываемого известным экспериментальным уравнением.

На основании ряда экспериментов для импульсного режима течения среды и анализа их результатов получено критериальное уравнение, описывающее конвективный теплообмен при поперечном обтекании цилиндрических тел и создании пульсации расхода среды путем вращения круглой заслонки в полости подводящего патрубка.

РЕЗЮМЕ

Експериментально досліджено деякі аспекти інтенсифікації конвективного теплообміну при поперечному обтіканні циліндричного тіла та імпульсному режимі течії середи, який утворюється завдяки обертанню круглої заслонки в порожнині трубопроводу, що підводить середу

Ключові слова: конвективний теплообмін, течія середи, обтікання тіла, критеріальне рівняння

SUMMURY

Some aspects of convective heat transfer intensification on cylindrical body cross-flow and medium impulse flow regime caused by cut-off plate in supply pipe rotation are experimentally studied.

Keywords: convective heat exchange, medium flow, body cross-flow, criteria equation

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Михеев М.А. Основы теплопередачи / М.А. Михеев, И.М. Михеева. – М.: Энергия, 1973. – 265с.
2. Кутателадзе С.С. Основы теории теплообмена / С.С. Кутателадзе. – Новосибирск: Наука, 1970. – 659 с.
3. Пилипенко Р.А. Интенсификация тепловой работы камерных печей, отапливаемых природным газом / Р.А. Пилипенко // Металлургическая теплотехника. – Днепропетровск, 2002. – Т. 8. – С. 99-105.
4. Губинский В.И. Нагревательные печи металлургии – сегодня и завтра / В.И. Губинский // Теория и практика металлургии. – 2004. – № 6. – С.56-60.
5. Новые схемы импульсного отопления нагревательных и термических печей / М.П. Ревун, А. И. Баришенко, А.И. Чепрасов и др. // Металлургическая и горнорудная промышленность. – 2005.– № 3. – С. 97-100.

Поступила в редакцию 22.02.2012 г.

УДК 537.226.4; 537.226.82

РЕЛАКСАЦИЯ СВОЙСТВ И СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ПЬЕЗОКЕРАМИКЕ Pb(Zr,Ti)O_3 ПОСЛЕ ОТЖИГА

Д. В. Кузенко, А. И. Бажин, Н. Г. Кисель, В. В. Дорофеева*, Н. А. Спиридонов**

**Государственное учреждение научно-технологический центр «Реактивэлектрон» НАН Украины, г. Донецк*

Экспериментально исследовано поведение диэлектрических и структурных параметров поляризованных пьезокерамических образцов состава $(Pb_{0.95}Sr_{0.05})(Zr_{0.48}Ti_{0.52})O_3$ тетрагональной симметрии после температурного отжига. Особое внимание уделено температурной области ниже точки Кюри ($T_C = 330^\circ C$). Введено понятие критической температуры $T_{кр.}$ ($T_{кр.} < T_C$) – температуры, отжиг при которой приводит к необратимым изменениям структуры и свойств образцов. Построена концентрационная (по содержанию ионов Zr и Ti) зависимость температуры $T_{кр.}$. Установлена взаимосвязь релаксационного поведения материала после отжига с необратимым изменением структуры (с - доменизация) в интервале температур $T_{кр.} < T < T_C$.

Ключевые слова: пьезокерамика, старение, деполяризация, цирконат-титанат свинца.

Введение. Исследование поведения сегнетоэлектрических материалов при различных температурных условиях представляет интерес как для фундаментальной, так и для прикладной науки. Несмотря на практически построенную теорию сегнетоэлектричества, остаются открытыми такие вопросы: поведение доменной структуры при воздействиях на сегнетоэлектрический материал [1, 2], влияние дефектов на стабильность доменной структуры [3], причины старения и усталости [4], вклад доменов в диэлектрические свойства сегнетоэлектриков [5, 6], релаксационные процессы [7 – 9].

В работе исследуется поведение диэлектрических и структурных параметров поляризованных пьезокерамических образцов состава $(Pb_{0.95}Sr_{0.05})(Zr_{0.48}Ti_{0.52})O_3$ (тетрагональной симметрии, сегнетожестких за счет введения соответствующих примесей) после температурного отжига. Особое внимание уделено температурной области ниже точки Кюри ($T_C = 330^\circ C$). Обсуждается взаимосвязь температурного поведения диэлектрических свойств и структуры с точки зрения обратимых и необратимых воздействий на пьезокерамические материалы.

Методика эксперимента. Образцы в виде дисков 9мм×1мм приготовлены по керамической технологии: $T_{синтеза} = 980^\circ C$ в течение 2 часов, $T_{спекания} = 1320^\circ C$ в течение 2 часов. На поверхность образцов нанесены серебряные электроды. Поляризация в постоянном электрическом поле напряженностью 3 кВ/мм при 140 $^\circ C$ в течение 1 часа с последующим охлаждением до $T_{комн.}$ в поле. После поляризации образцы находились 3 суток в закороченном состоянии. Перед отжигом измерялась емкость образцов на частоте 1кГц при напряжении не более 4,3В (L,C,R измеритель Е7-8). Образцы в закороченном состоянии отжигались в течение 10 минут при постоянной температуре (225, 250, 275, 300, 315, 330, 360 $^\circ C$); после отжига охлаждались до $T_{комн.}$ за 1 минуту. На протяжении суток измерялась емкость образцов C через постоянные интервалы времени. Т.е. проводились измерения релаксации свойств в процессе старения. Для отжига при каждой температуре был взят отдельный поляризованный образец. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости определена на точном полуавтоматическом мосте ВМ 484 ($U = 0.3В$, $f = 1592Гц$) и температурной приставке.

Рентгеноструктурные исследования проводились на дифрактометре ДРОН-3 ($Cu - k_\alpha$ излучение) в интервале углов Θ: 10-40°. Исследования проводились по схеме: образец в закороченном состоянии выдерживался 10 минут при постоянной температуре (245, 290, 325, 335 $^\circ C$), затем охлаждался до $T_{комн.}$ за 1 минуту. Спустя сутки стравливались серебряные электроды в разбавленной кислоте HNO_3 и проводились рентгеновские измерения. Съемка во всех случаях проводилась со стороны, имеющей отрицательный знак поляризации. Проведенные эксперименты показали, что у поляризованного образца поверхностные слои отличаются структурно (различные доли а- и с-доменов).

Результаты эксперимента. Анализ зависимостей величины $\varepsilon(t)/\varepsilon(0)$ ($\varepsilon(t)$ – диэлектрическая проницаемость, измеренная в процессе старения; $\varepsilon(0)$ – диэлектрическая проницаемость, измеренная до отжига) от времени показал, что при всех температурах отжига релаксация подчиняется закону близкому к логарифмическому:

$$\varepsilon(t)/\varepsilon(0) = -A \cdot \ln(t) + B \qquad (1)$$

где коэффициент A характеризует скорость релаксации свойств во времени, B – постоянная, зависящая от значения диэлектрической проницаемости образца до и после отжига. На рис.1 показана температурная зависимость коэффициента A – скорости релаксации диэлектрической проницаемости в процессе старения после температурного отжига. Температурная зависимость скорости релаксации A проходит через максимум. Температура отжига, соответствующая этому максимуму обозначена как $T_{кр.}$ (критическая), T_C – температура точки Кюри.

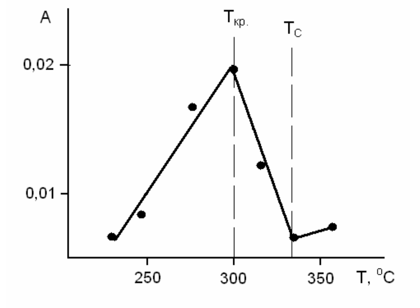


Рис. 1

Обозначения $T_{кр.}$ на всех рисунках соответствуют одной температуре (300 ^0C). Одновременно с этим температура $T_{кр.}$ является граничной для процессов обратимого и необратимого отжигов: свойства образцов отожженных при температуре ниже $T_{кр.}$ в процессе старения возвращались к значению свойств до отжига, а отожженных в интервале $T_{кр.} < T < T_C$ – нет – релаксировали к новому равновесному значению.

На температурной зависимости обратной диэлектрической проницаемости (рис. 2) температура $T_{кр.}$ является характерной – происходит изменение угла наклона зависимости $1/\varepsilon(T)$ – возрастает относительное изменение величины $1/\varepsilon$ с ростом температуры.

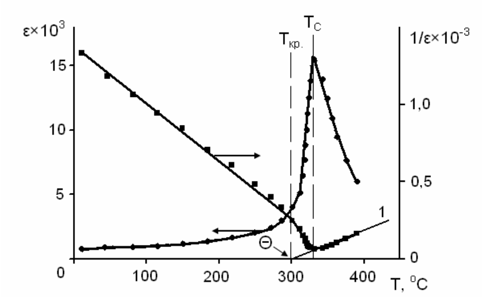


Рис. 2. Температурная зависимость диэлектрической и обратной проницаемостей. Прямая 1 – экстраполяция температурной зависимости обратной диэлектрической проницаемости в парафазе к нулевому значению

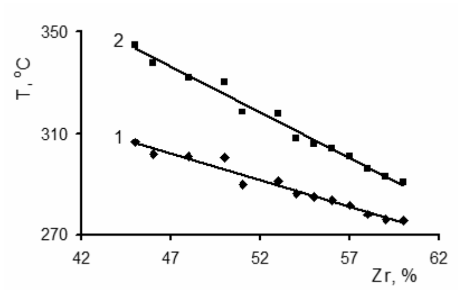


Рис. 3. Зависимость температур $T_{кр.}$ (1) и T_C (2) от относительного содержания ионов Zr в твердом растворе $(Pb_{0.95}Sr_{0.05})(Zr_xTi_{1-x})O_3$

Анализ температурных зависимостей обратной диэлектрической проницаемости для образцов с различным содержанием ионов Zr и Ti ($Zr/Ti = 45/55 - 60/40$) позволил определить концентрационную зависимость критической температуры $T_{кр.}$ и температуры точки Кюри T_C (рис. 3). Хорошо видно, что при изменении симметрии элементарной ячейки твердого раствора (с тетрагональной на ромбоэдрическую) происходит уменьшение температурного интервала $T_C - T_{кр.}$

Для установления причин смены линейного процесса деполяризации нелинейным при температуре $T_{кр.}$ проведены рентгеноструктурные исследования. Анализ результатов рентгеноструктурных исследований проводился следующим образом. Сравнивались интенсивности дублетов (001) и (100), (101) и (110), (002) и (200), (112) и (211) для образцов с различными температурами отжига. На рис. 4 приведена температурная зависимость отношений интенсивностей двойных рентгеновских линий (дублетов): 1 – $I(101)/I(110)$; 2 – $I(001)/I(100)$; 3 – $I(002)/I(200)$; 4 – $I(112)/I(211)$.

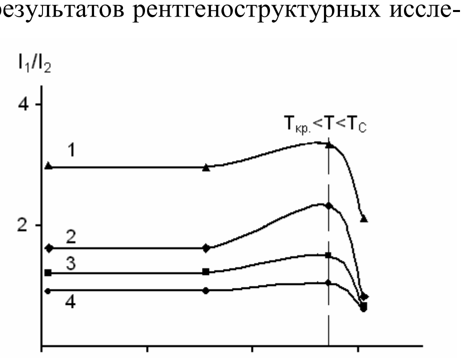


Рис. 4

Обсуждение результатов. Ранее нами была исследована релаксация пьезо – и диэлектрических свойств в процессе старения после отжига пьезокерамических образцов следующих двух составов:

1) $(Pb_{0.95}Sr_{0.05})(Zr_{0.53}Ti_{0.47})O_3$ (марка ЦТССт-3, $T_C = 290^\circ C$ =290°С) с высокой степенью сегнетожесткости

(за счет введения соответствующих примесей); состав расположен в двухфазной области фазовой диаграммы $Pb(Zr,Ti)O_3$ (содержит тетрагональную и ромбоэдрическую фазы) [10];

2) $(Pb_{0.8}Sr_{0.1}Ba_{0.1})(Zr_{0.56}Ti_{0.44})O_3$ (марка ЦТСтБС-3, $T_C = 150^0C$) и $(Pb_{0.86}Sr_{0.1}Ba_{0.04})(Zr_{0.555}Ti_{0.445})O_3$ (марка ЦТССт-2, $T_C = 190^0 C$) с низкой степенью сегнетожесткости (за счет введения соответствующих примесей); составы расположены в ромбоэдрической области фазовой диаграммы $Pb(Zr,Ti)O_3$ [11].

Релаксация свойств к равновесному состоянию длилась в течение суток и также описывалась законом близким к логарифмическому (1). Значения коэффициентов A и B различны для составов с различной степенью сегнетожесткости и симметрии кристаллической решетки, однако качественно зависимость $A(T)$ повторяет приведенную на рис. 1, т.е. проходит через максимум при температуре ниже T_C.

Зависимость вида (1) является феноменологическим проявлением эффекта старения материала после снятия внешних воздействий [12]. Как показано в [13], логарифмический закон старения может следовать из экспоненциального при наличии в исследуемом материале дефектных объектов структуры с различными временами релаксации и эффективными массами. В реальных поликристаллических материалах такими объектами могут выступать дефекты структуры: доменные и межфазные границы, дислокации, вакансии, границы зерен, приэлектродные слои.

Измерения температурной зависимости обратной диэлектрической проницаемости (рис. 2) показало, что на данной зависимости можно также выделить характерную температуру, численно совпадающую с $T_{кр.}$ (для данного состава – 300 ^0C). Здесь практически линейная зависимость (ниже T_C) терпит излом – возрастает изменение обратной диэлектрической проницаемости с ростом температуры. При этой температуре диэлектрическая проницаемость также начинает резко возрастать с ростом температуры образца – возрастает податливость заряженных структурных элементов по отношению к измерительному электрическому поля.

При экстраполяции температурной зависимости обратной диэлектрической проницаемости в параэлектрической фазе до нулевого значения ($1/\varepsilon \to 0$, $\varepsilon \to \infty$), прямая пересекает температурную ось в точке Θ, расположенной в сегнетоэлектрической фазе. Численно значения температур Θ и $T_{кр.}$ совпадают. Согласно [14] Θ – температура, определяющая закон возрастания диэлектрической проницаемости в параэлектрической фазе. В связи с этим можно предположить, что одной из причин наличия температуры $T_{кр.}$ (или Θ согласно [14]) является конкуренция между возникающей параэлектрической фазой и исчезающей сегнетоэлектрической.

Концентрационные зависимость критической температуры $T_{кр.}$ и точки Кюри T_C ($Zr/Ti = 45/55 - 60/40$) приведены на Рис.3. С ростом относительного содержания ионов Zr (уменьшения количества ионов Ti) температура $T_{кр.}$ (как и T_C) линейно снижается. Одновременно с этим уменьшается температурный интервал $\Delta T = T_{кр.} - T_C$ (с 45 до 15 $^\circ C$). Причиной указанного поведения интервала ΔT может являться более высокая температурная стабильность составов с тетрагональным искажением кристаллической решетки за счет присутствия большего числа 90^o-ных доменов и более высокое значение спонтанной деформации элементарной ячейки δ по сравнению с образцами с ромбоэдрическим искажением [15].

Анализ рентгенограмм показал, что для образцов, отожженных при температуре $T_{кр.} < T < T_C$, происходит заметное перераспределение в интенсивностях дублетных линий: (101) и (110), (001) и (100), (002) и (200) (рис.4). Согласно общепризнанной терминологии домены, у которых плоскости (00l) и (h00) расположены параллельно поверхности образца, называются а – и с – доменами соответственно [16]. Увеличение интенсивности максимумов линий (001), (002) и уменьшение интенсивности максимумов линии (100), (200) может свидетельствовать о переориентации а – доменов в с – домены, т.е. о с – доменизации образца.

Выводы. Таким образом, для состава $(Pb_{0.95}Sr_{0.05})(Zr_{0.48}Ti_{0.52})O_3$ однозначно установлена взаимосвязь необратимого изменения электрофизических свойств и структурных преобразований после отжига в температурной интервале $T_{кр.} < T < T_C$. Показано, что отжиг образцов при температуре, которая характеризуется максимальной скоростью релаксации свойств после отжига, приводит к структурным изменениям в образце – возможна с – доменизация. Концентрационная зависимость температуры $T_{кр.}$ и интервала ($T_C - T_{кр.}$), по-видимому, обусловлена влиянием степени искажения кристаллической решетки. Показана связь температуры $T_{кр.}$ с температурой Θ, определяющей закон возрастания диэлектрической проницаемости в параэлектрической фазе. Температурный интервал $T_{кр.} < T < T_C$ предшествует фазовому переходу из сегнетоэлектрической фазы в параэлектрическую – образуется устойчивое предпереходное состояние.

РЕЗЮМЕ

Експериментально досліджено поведінку діелектричних і структурних параметрів поляризованих п'єзокерамічних зразків складу $(Pb_{0.95}Sr_{0.05})(Zr_{0.48}Ti_{0.52})O_3$ тетрагональної симетрії після температурного відпалу. Особливу увагу приділено температурній області нижче точки Кюрі ($T_C = 330^0 C$). Введено поняття критичної температури $T_{кр.}$ ($T_{кр.} < T_C$) - температури, відпал при якій призводить до незворотних змін структури і властивостей зразків. Побудована концентраційна (за змістом іонів Zr та Ti) залежність температури $T_{кр.}$. Встановлено взаємозв'язок релаксаційної поведінки матеріалу після відпалу зі зміною структури (c - доменізація) в інтервалі температур $T_{кр.} < T < T_C$.

Ключові слова: п'єзокераміка, старіння, деполяризація, цирконат-титанат свинцю.

SUMMARY

Experimentally studied the behavior of dielectric and structural parameters of the polarized piezoelectric ceramic $(Pb_{0.95}Sr_{0.05})(Zr_{0.48}Ti_{0.52})O_3$ tetragonal symmetry after thermal annealing. Particular attention is paid to the temperature range below the Curie point ($T_C = 330^0 C$). Introduced the concept of the critical temperature $T_{kr.}$ ($T_{kr.} < T_C$) - the temperature at which the annealing leads to irreversible changes in the structure and properties of the samples. Constructed concentration (content of ions of Zr and Ti) the dependence of temperature $T_{kr.}$. The interrelation between the relaxation behavior of the material after annealing, the irreversible change in the structure (c - domenizatsiya) in the temperature $T_{kr.} < T < T_C$.

Keywords: piezoceramic, depolarization, aging, lead zirconate titanate.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Domain switching under cyclic mechanical loading in lead zirconate titanate / S. Pojprapai, J. L. Jones, M. Hoffman, S. C. Vogel // Journal of the American Ceramic Society. – 2006. – No 89(11). – P. 3567-3569.
2. Domain switching in polycrystalline ferroelectric ceramics / J. Y. Li, R. C. Rogan, E. Ustundag, K. Bhattacharya // Nature Materials. – 2005. – No 4. – P. 776-781.
3. Gopalan V. Defect–domain wall interactions in trigonal ferroelectrics / V. Gopalan, V. Dierolf, D. A. Scrymgeour // Annual Review of Materials Science. – 2007. – No 37. – P. 449-489.
4. Lou X. J. Polarization fatigue in ferroelectric thin films and related materials / X. J. Lou // Journal of Applied Physics. – 2009. – № 105. – P. 024101–024101-24.
5. О вкладе различных механизмов движения доменных границ в эффективную диэлектрическую проницаемость кристаллов триглицинсульфата в средних (промежуточных) низко- и низкоинфрачастотных полях / А.В. Шильников, А. П. Поздняков, В. Н. Нестеров и др. // Физика твердого тела. – 2001. – № 43(8). – С. 1516-1519.
6. Matyjasek K. Dynamics of the domain structure in non-uniform ferroelectric crystals / K. Matyjasek, R. Rogowski // Condensed Matter Physics. – 2007 – No 10(1(49)). – P. 95-99.
7. Evolution of a stable polarization state in lead zirconate titanate ceramics by repeated partial switching / T. Granzow, N. Balke, D. C. Lupascu, J. Rödel // Applied Physics Letters. – 2005. – № 87. – P. 212901–212901-3.
8. Evaluation of domain wall motion in lead zirconate titanate ceramics by nonlinear response measurements / J. E. García, R. Pérez, D. A. Ochoa et al.// Journal of Applied Physics. – 2008. – № 103. – P. 054108–054108-8.
9. Polarization relaxation kinetics and 180° domain wall dynamics in ferroelectric thin films / C. S. Ganpule, A. L. Roytburd, V. Nagarajan et al. // Physical Review B. – 2001. – № 65. – P. 014101–014101-7.
10. Relaxation processes in hard piezoelectric ceramics / D. V. Kuzenko, V. M. Ishchuk, A. I. Bazhin, N. A. Spiridonov // Functional Materials. – 2009. – №4(16). – P. 436-441.
11. Влияние возбуждающего напряжения на стабильность свойств пьезокерамических материалов / Д. В. Кузенко, А. И. Бажин, В. В. Дорофеева и др.// Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2010. – № 1(85). – С. 58-61.
12. Яффе Б. Пьезоэлектрическая керамика / Б. Яффе, У. Кук, Г. Яффе. – М.: Мир, 1974. – 288 с.
13. Крупичка С. Физика ферритов и родственных им магнитных окислов /С. Крупичка. - М.: Мир, 1976. – 504 с.
14. Сонин А. С. Введение в сегнетоэлектричество / А. С. Сонин, Б. А. Струков. – М.: Высшая школа, 1970. – 272 с.
15. Фесенко Е. Г. Доменная структура многоосных сегнетоэлектрических кристаллов / Е. Г. Фесенко, В. Г. Гавриляченко, А. Ф. Семенчев. – Ростов н/Д.: Ростовский университет, 1990. – 192 с.
16. Фесенко Е. Г. Поляризация пьезокерамики / Е. Г. Фесенко, А. Я. Данцигер, В. З. Бородин. – Ростов н/Д.: Ростовский университет, 1968. – 135 с.

Поступила в редакцию 01.06.2011 г.

УДК 537.611.3+537.622+538.221+539.216.2

РОЛЬ ЗАРОДЫШЕЙ В СПИН-ПЕРЕОРИЕНТАЦИОННОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ ПЕРВОГО РОДА

Ю. А.Мамалуй, Ю. А. Сирюк, А. В. Безус

Изучен механизм спин-переориентационного фазового перехода (СПФП). Исследовано изменение структуры доменных границ при фазовом переходе. Предложены соответствующие эксперименту модели доменной структуры (ДС). Показано, что фазовый переход путем зародышеобразования в доменной границе вызывает СПФП I рода из осевой фазы в угловую фазу. Механизм СПФП не зависит от величины соотношения между константами анизотропии.

Ключевые слова: доменная структура, доменная граница, анизотропия, спин-переориентационный фазовый переход.

Введение. В настоящее время спин-переориентационные фазовые переходы (СПФП) хорошо изучены только в кубических феррогранатах. В отличие от кубических феррогранатов феррит-гранатовые пленки обладают смешанной анизотропией: наряду с кристаллографической кубической (K_1) существует одноосная ростовая анизотропия (K_u). Ось ростовой одноосной анизотропии $<111>$ ориентирована перпендикулярно плоскости пленки. Три оси кристаллографической анизотропии типа $<111>$ ориентированы под углом к плоскости пленки. Отношение констант одноосной и кубической анизотропии и намагниченность насыщения зависят от температуры: $K_u/K_1(T)$ и $M_S(T)$. При температуре магнитной компенсации T_C и температуре Нееля T_N намагниченность насыщения равна нулю. Влияние смешанной анизотропии на поведение доменной структуры (ДС) изучено еще недостаточно. ДС очень чувствительна к изменению магнитных характеристик пленок и отражает все изменения анизотропии и намагниченности. В связи с этим поведение ДС вблизи критической температуры, где равны магнитные моменты подрешеток (T_C) или изменяется анизотропия (T спиновой переориентации), вызывает особый интерес исследователей. Благодаря оптической прозрачности эпитаксиальных пленок ДС можно визуально наблюдать с помощью эффекта Фарадея, а при спиновой переориентации применять метод цветовой регистрации. Поэтому пленки ферритов-гранатов могут служить модельным объектом для изучения фазовых переходов (ФП) и спин-переориентационных фазовых переходов.

В работе [1] экспериментально изучены СПФП в феррит-гранатовой пленке. В [2] теоретически исследован механизм СПФП. Показано, что зародышем СПФП I рода является дефект пленки в виде 0-градусной границы. В [3] изучена структура 0-градусной границы и найден энергетический порог перехода из 0-градусной границы в 180-градусную границу.

Задачей настоящей работы является определение механизма СПФП на основе экспериментальных исследований [1]. Для решения этой задачи использован метод моделирования доменных границ (ДГ). Как для фундаментальной науки, так и для прикладной очень важно знать, что происходит с ДС при изменении анизотропии, как изменяется доменная граница. Это актуальные исследования. Во-первых, СПФП можно использовать при термомагнитной записи в точке спиновой переориентации [4]. Во-вторых, вблизи СПФП многие физические величины (теплоемкость, магнитная восприимчивость, модуль Юнга, коэффициент затухания и т.д.) испытывают аномалии [5]. Поэтому такой магнитный материал может ограничивать диапазон работы технического устройства.

Описание результатов исследования. Для решения поставленной задачи исследуется влияние смешанной анизотропии на особенности доменных структур пленок ферритов-гранатов с разной величиной одноосной анизотропии в температурном интервале 90К–T_N. В работе приведены результаты исследования двух пленок. Обе пленки имеют развитую поверхность $<111>$ и фактор качества $Q > 5$. Пленка №1 со слабой одноосной анизотропией состава $(YBi)_3(FeGa)_5O_{12}$ ($T_N = 421K$, точка магнитной компенсации $T_C = 223K$ и намагниченность насыщения при комнатной температуре $4\pi M_S = 11\cdot 10^{-3}$ Т) имеет осевую фазу в узком температурном интервале при $T > 360K$. Пленка №2 с сильной одноосной анизотропией состава $(TmBi)_3(FeGa)_5O_{12}$ ($T_N = 437K$, $T_C = 120K$, $4\pi M_S = 17.5\cdot 10^{-3}$ Т при комнатной температуре) имеет осевую фазу в широком температурном интервале при $T > T_C$. Изучены особенности СПФП в этих пленках. На основе экспериментальных данных построены модели доменных структур и доменных границ.

Особенности ДС пленки № 1 при изменении температуры. В интервале температур $T_1 - T_2$ (рис. 1) импульсным магнитным полем, перпендикулярным плоскости пленки, формируется решетка ЦМД (рис. 2, А), затем магнитное поле выключается. Формирование ЦМД свидетельствует о наличии в этой области температур осевой фазы. На оранжевом поле наблюдаются темно-зеленые ЦМД. Это две осевые фазы. При T_2 некоторые участки доменной границы уширяются, и от этих участков в обе стороны наблюдается изменение цвета поля (от оранжевого к желтому) и ЦМД (от темно-зеленого к зеленому) (рис.2, Б). Происходит СПФП первого рода из осевой фазы в угловую фазу [6]. Зародышем спин-переориентационного фазового перехода является доменная граница. Тот участок доменной границы ЦМД, ширина которого увеличилась, является зародышем угловой фазы. В самой ДГ произошел фазовый переход, который и вызвал СПФП во всем образце. Эти два фазовых перехода взаимосвязаны. Сосуществование осевой и угловой фаз наблюдается в интервале температур $\Delta T = 15^\circ$. Следует особо подчеркнуть, что визуально граница между осевой и угловой фазами не наблюдается.

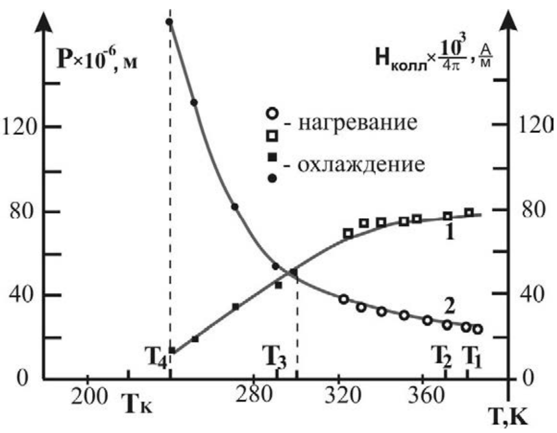


Рис.1. Температурные зависимости пленки №1: 1– поле коллапса; 2– период ДС

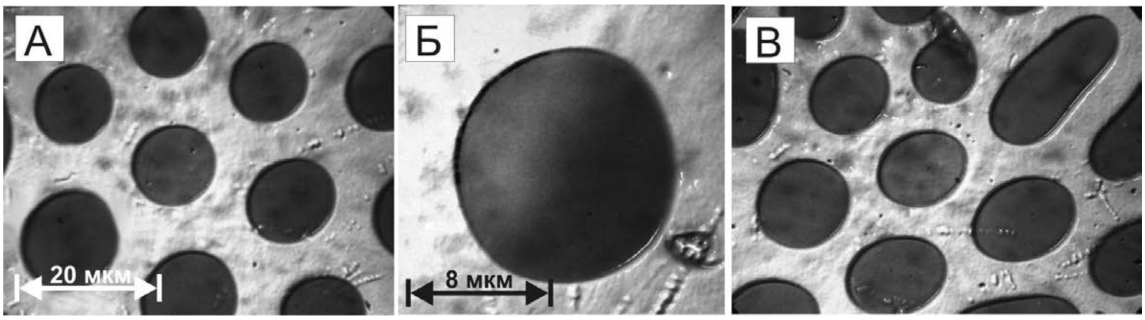


Рис.2. Виды ДС пленки №1 при изменении Т: А– Решетка ЦМД, 370К; В– ЦМД, 365К; С– ДС, 290К

Особенности ДС пленки № 2. Решетка ЦМД сформирована при 215К. Получены две осевые фазы Φ_1 и Φ_2: оранжевые ЦМД на коричневом поле. При 185К некоторые участки круглых границ ЦМД стали более широкими. Вблизи этих участков изменился цвет поля с коричневого на зеленый, а ЦМД с оранжевого на белый. Это свидетельствует о начале процесса спиновой переориентации и появлении двух новых фаз, вектора намагниченности которых направлены под углом к плоскости пленки: $\Phi_3 < 1\bar{1}\bar{1} >$ – белый цвет ЦМД и $\Phi_4 < \bar{1}11 >$ – зеленое поле. В пленке с сильной одноосной анизотропией происходит безгистерезисный СПФП из осевой фазы в угловую фазу. Это СПФП первого рода [6]. Как и в образце №1, зародышем угловой фазы является 180^0-ная доменная граница. Фазовый переход в ДГ вызывает СПФП. Область сосуществования осевых и угловых фаз 25К. Граница между осевой и угловой фазами не наблюдается.

Анализ фазовых переходов в доменной структуре. Для объяснения экспериментальных результатов проведено моделирование доменных границ. Поскольку эксперимент показал, что СПФП из осевой фазы в угловую фазу происходит одинаково в пленках с разной осевой анизотропией, то приведены модели доменных структур только одной пленки – пленки № 1.

Предложенные модели ДС объясняют ее особенности в интервале $400 - T_C$ (рис. 3). В области $T_1 - T_2$ (рис. 1) наблюдаются осевые фазы $\Phi_1^{ось} < 111 >$ и $\overline{\Phi}_1^{ось} < \bar{1}\bar{1}\bar{1} >$. Доменная граница 180^0-наяблоховская (рис. 3, А). При охлаждении до T_2 уменьшается одноосная анизотропия. Под влиянием кубической анизотропии на некоторых участках границ ЦМД изменяется ориентация спинов. Это приводит к изменению ориентации спинов в прилежащих к доменной границе областях, т.е. наблюдается изменение цвета поля и ЦМД (рис. 2, Б). Появляются угловые фазы $\Phi_1 < \bar{1}11 >$ (желтая) и $\overline{\Phi_1} < 1\bar{1}\bar{1} >$ (зеленая). Таким образом, под влиянием кубической анизотропии происходит фазовый переход в доменной границе, который в свою очередь вызывает СПФП из осевой фазы в угловую фазу во всем образце. В этом случае доменная граница осевой фазы выступает зародышем угловой фазы. СПФП из осевой фазы в

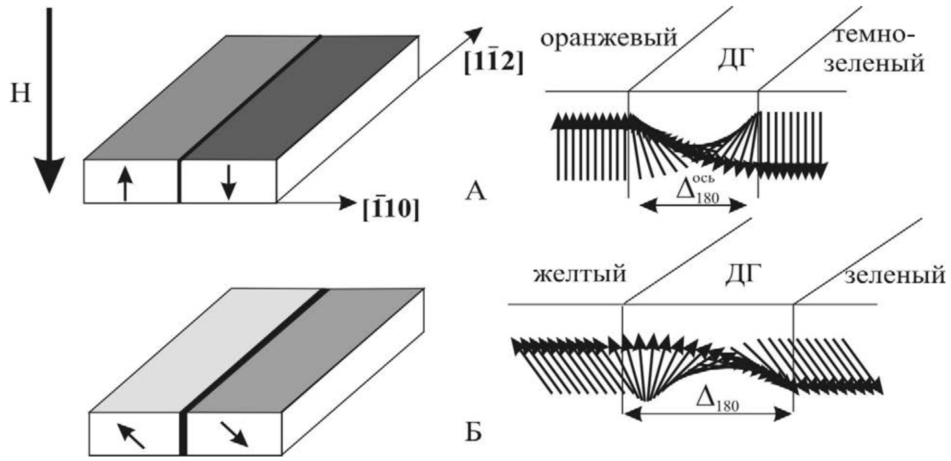


Рис.3. Модели доменных структур и распределение намагниченности в доменной стенке:
А– 180^0 осевая; Б– 180^0 угловая

угловую фазу происходит путем зародышеобразования. После фазового перехода доменная граница осталась 180^0-ной, но ее плоскость ориентирована под углом к оси $<111>$. В этом случае разворот спинов на 180 градусов происходит в более широкой ДГ (рис.3, Б). Такой переход в доменной границе соответствует минимуму ее энергии.

Обсуждение результатов. Результаты исследований показали, что в связи с изменением соотношения между константами анизотропии K_u/K_1 при изменении температуры изменяется структура доменных границ и вид доменной структуры, т.е. происходят фазовые переходы в доменных границах и спин-переориентационные фазовые переходы. Выяснено, что доменные границы наиболее чувствительны к температурному изменению K_u/K_1. Доменную границу можно рассматривать как магнитную неоднородность, в которой существует большой набор спинов разной ориентации. При определенной температуре соответствующая ориентация спинов в доменной границе оказывается энергетически наиболее выгодной. Это и вызывает процесс перестройки, т.е. фазовый переход. Фазовый переход в доменной границе вызывает спин-переориентационный фазовый переход во всем образце. Характер фазового перехода в доменной границе определяет механизм СПФП.

Особенности спин-переориентационного фазового перехода из осевой фазы в угловую фазу объяснены представлением о зародыше новой фазы как о статическом солитоне, размеры которого растут с изменением соотношения между константами анизотропии (рис. 4). В [2, 7] статический солитон представлен как магнитная неоднородность, плотность распределения спинов в которой убывает с расстоянием по экспоненте. Такая неоднородность с определенной ориентацией спинов, соответствующей угловым фазам, возникает в центре доменной границы. Поскольку плотность распределения спинов убывает с расстоянием по экспоненте, то на границе раздела осевой и угловой фаз нет скачка плотности спинов угловой фазы. Поэтому визуально граница между осевой и угловой фазами не наблюдается. Представление о зародыше новой фазы как о статическом солитоне позволяет понять характер фазового перехода в доменной границе и объяснить визуальное отсутствие границы между осевой и угловой фазами. Изучение механизма СПФП в образцах с разной величиной одноосной анизотропии показали, что механизм спин-переориентационного фазового перехода из осевой фазы в угловую фазу не зависит от величины соотношения между константами анизотропии.

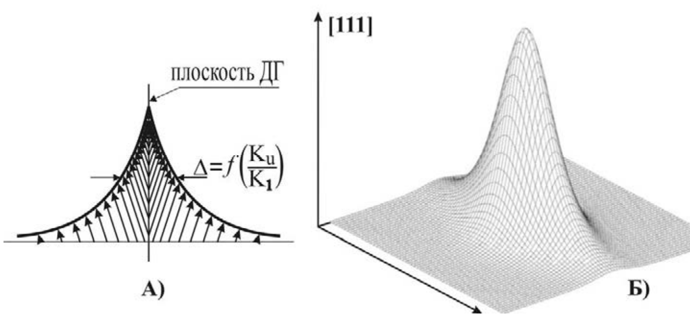


Рис.4. Статический солитон: А– распределение спинов,
В– трехмерное изображение.

Выводы. Визуально доказано, что механизм безгистерезисного спин-переориентационного фазового перехода первого рода из осевой фазы в угловую фазу происходит путем зародышеобразования. Зародышем «новой» фазы является граница исходной фазы. Имеется температурный интервал сосуществования осевой и угловой фаз. Граница между осевой и угловой фазами не наблюдается. Отсутствие границы между осевой и угловой фазами впервые объяснено представлением о зародыше новой фазы как о статическом солитоне, размеры которого растут с изменением соотношения между константами анизотропии. Экспериментально показано, что спин-переориентационный фазовый переход из осевой фазы в угловую фазу происходит одинаково в пленках с разной величиной одноосной анизотропии. Механизм СПФП не зависит от величины соотношения между константами анизотропии.

РЕЗЮМЕ

Вивчено механізм спін-переорієнтаційного фазового переходу (СПФП). Досліджено зміну структури доменних меж при фазовому переході. Запропоновані відповідні до експерименту моделі доменної структури (ДС). Показано, що фазовий перехід шляхом зародкоутворення у доменній межі призводить до СПФП I роду із осьової фази у кутову фазу. Механізм СПФП не залежить від величини співвідношення між константами анізотропії.

Ключові слова: доменна структура, доменна межа, анізотропія, спін-переорієнтаційний фазовий перехід.

SUMMARY

The mechanism of spin-reorientation phase transition (SRPT) has been studied. Changes in structure of domain boundaries during phase transition have been investigated. Domain structure (DS) models appropriate for the experiment are proposed. It has been shown that the phase transition through nucleation in the domain boundary induces the first-order phase transition from axial to angular phase. The SRPT mechanism does not depend on the value of ratio between anisotropy constants.

Keywords: domain structure, domain boundary, anisotropy, spin-reorientation phase transition.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bezus A.V. Spin-reorientation phase transitions in thin magnetic film of different anisotropy / A.V.Bezus, Ju.A.Mamalui, Ju.A.Siryuk // Functional Materials. – 2008. – Vol. 15, No 2. – P. 218-222.
2. Вахитов Р.М. Процессы зародышеобразования при спин-переориентационных фазовых переходах в реальных кристаллах / Р.М.Вахитов, Е.Р.Гареева, М.М.Вахитова // Физика низких температур. – 2006. – Т. 32, № 2. – С. 169-175.
3. Магадеев Е.Б. Магнитные неоднородности уединенного типа в тонкой ферромагнитной пленке / Е.Б.Магадеев, Р.М.Вахитов // Доклады РАН. – 2011. – Т. 439, № 3. – С. 329-332.
4. Балбашов А.М. Магнитные материалы для микроэлектроники / А.М. Балбашов, А.Я. Червоненкис. – М.: Энергия, 1979. – 216 с.
5. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках / К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин. – М.: Наука, 1979. – 320 с.
6. Фазовые переходы в ЦМД-структурах при спиновой переориентации в феррит-гранатовых пленках / Ю.А.Мамалуй, Ю.А.Сирюк, А.В.Безус, А.А.Леонов // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, № 2. – С. 277-281.
7. Вахитов Р.М. Об одном механизме зародышеобразования в кристаллах с комбинированной анизотропией / Р.М.Вахитов, А.Р.Юмагузин // Физика твердого тела. – 2001. – Т. 43, № 1. – С. 65-71.

Поступила в редакцию 22.02.2012 г.

УДК 530.1:536.2

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ, МАССЫ И ИМПУЛЬСА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ПУЧКА ЭЛЕКТРОНОВ С АТОМНОЙ РЕШЕТКОЙ НА БАЗЕ МОЛЕКУЛЯРНО-РАДИАЦИОННОЙ ТЕОРИИ

Н. И. Никитенко
Институт технической теплофизики НАН Украины, г. Киев

Представлен механизм дифракционных явлений, возникающих при падении пучка электронов на дифракционную решетку. Согласно этому механизму дифракционная картина электронов является следствием дифракции фотонов. Для случая взаимодействия пучка электронов с одномерной атомной решеткой приведены формулы для массы, энергии и импульса электронов и фотонов, которые согласуются с известными опытными данными.

Ключевые слова: дифракционные картины электронов и фотонов, механизм столкновения частиц, молекулярно-радиационная теория переноса.

Введение. Явления дифракции, возникающие при взаимодействии пучка электронов или нейтронов с дифракционной решеткой, достаточно широко используются для изучения структуры вещества и молекул [1]. Единство корпускулярных и волновых характеристик излучения выражается следующими соотношениями между энергией E_f, массой m_f, импульсом p_f, скоростью c фотонов, с одной стороны, и длиной волны λ и частоты ν, с другой стороны:

$$E_f = m_f c^2 = h\nu = hc/\lambda; \quad \lambda = h/(m_f c) = h/p_f. \tag{1}$$

В 1924 г. де Бройль предложил гипотезу о том, что движение любых частиц или макроскопических тел может рассматриваться как волновой процесс, в котором длина волны определяется соотношением $\lambda = h/(mw)$. Возникновение интерференционных картин при взаимодействии пучков электронов, протонов, нейтронов и т. д. с дифракционной решеткой рассматривается [2] как подтверждение справедливости гипотезы де Бройля. В связи с этим для расчета дифракционной картины электронов используется «без каких-либо изменений теория рассеяния рентгеновских лучей» [3], т.е. вместо взаимодействия электронов с дифракционной решеткой рассматривается взаимодействие фотонов, импульс которых равен импульсу электрона. При этом не учитывается различие массы, энергии и скорости движения электрона и фотона, а также то, что при столкновении электронов с атомами возникают рентгеновские лучи.

Расчет дифракционной картины, базирующийся на принципе суперпозиции волн, позволяет определить только вероятность движения частицы вещества в заданном направлении. Такой подход означает отказ [4] от попыток определить точно, что произойдет при заданных внешних условиях, каков механизм возникновения дифракции частиц. Экспериментальные данные [4] свидетельствуют о том, что при прохождении через дифракционную решетку электроны не могут накладываться друг на друга подобно электромагнитным волнам. Идей, объясняющих дифракцию как результат сложного движения электронов, было «сфабриковано немало» [4], но они оказались безуспешными. В связи с этим в [4] содержится заключение: «Стало быть, в настоящее время приходится ограничиваться расчетом вероятностей».

Ниже показано, как можно объяснить дифракционную картину электронов на основе построенной в работах автора [5-9] молекулярно-радиационной теории переноса. Она базирующейся на концепции переноса энергии материальными носителями, непрерывно испускаемыми и поглощаемыми частицами вещества. Эта теория позволяет получить как уравнения переноса различных субстанций (массы, энергии, импульса), так и выражения для параметров переноса в зависимости от температуры и характеристик частиц тела. Получено интегро-дифференциальное уравнение теплопереноса, которое переходит в классическое уравнения теплопроводности Фурье [6] при стремлении скорости носителей энергии к бесконечности. Найдены формулы: теплоемкости многокомпонентного тела, которая в пределе переходит в формулу Дебая [6]; коэффициента диффузии в конденсированных средах [7], из которой вытекают эмпирические формулы Аррениуса для твердого тела и Эйнштейна для жидких сред; интенсивности испарения [8] в зависимости от температуры и толщины испаряющегося слоя вещества; равновесной толщины конденсированного слоя [8]; коэффициента электронной, фотонной и диффузионной теплопроводности [9]; равновесного давления пара для однокомпонентных [8] и многокомпонентных [10] сред, из которой вытекают эмпирические законы Рауля и Генри. Эти формулы хорошо согласуются с экспериментальными данными. Построен [6] потенциал межатомного взаимодействия, который является функцией энергии частиц, и уравнение состояния конденсированных тел, из которого вытекают законы Гука, термического расширения и Грюнейзена.

В рамках молекулярно-радиационной теории найден [5,6,11] закон интенсивности спектрального излучения частиц тела, согласно которому частицы единичного объема тела, находящиеся на энергетическом уровне i по частоте колебаний ν, излучают за единицу времени квантами энергию $q_{i\nu}$, величина которой пропорциональна энергии кванта $h\nu$, энергетическому уровню i и плотности частиц $n_{i\nu}$, находящихся на этом уровне

$$q_{i\nu} = \varepsilon_\nu i h\nu n_{i\nu} . \qquad (2)$$

Частицы в момент излучения переходят на нулевой энергетический уровень $i = 0$ в системе координат, связанной с частицей. Отношение коэффициента излучения ε_ν частицы к ее эффективному сечению поглощения не зависит от вида частиц и является функцией частоты ν. Из закона (2) вытекают [6,12] формула Планка для спектрального излучения абсолютно черного макроскопического тела. На базе (2) получена функция распределения частиц по энергиям для активационных процессов [7], когда энергия активации стремится к бесконечности, переходит в закон распределении частиц тела по энергиям Максвелла-Больцмана.

Ниже излагается механизм процессов переноса массы энергии и импульса в дифракционных явлениях, происходящих при падении пучка электронов на цепочку атомов. Согласно этому механизму дифракционная картина электронов является следствием дифракции фотонов. Указанная цепочка атомов является простейшим одномерным фрагментом структуры кристалла. Переход от расчета дифракции на цепочке атомов к расчету дифракции на плоском поверхностно слое атомов и на кристалле в целом не вызывает принципиальных затруднений. Подход, который используется для расчета дифракционных картин электронов и фотонов близок к тому, который применялся Комптоном для изучения изменения частоты волны фотонов при их рассеянии электронами и нуклонами [1].

Механизм излучения фотона при столкновении частиц вещества. Источником электронов обычно служит электронная пушка, которая состоит из металлической нити, нагреваемой током. Вылетающие из нити электроны ускоряются разностью электрических потенциалов V_e, составляющей несколько десятков тысяч вольт. Для нахождения массы m_e, скорости w_e и импульса p_e электронов, вылетающих из пушки, воспользуемся релятивистским уравнением баланса энергии. Общая энергия быстрого электрона $E_e = m_e c^2$ складывается из энергии электрона $E_{e0} = m_{e0} c^2$ при выходе из нити со скоростью, которую для простоты можно положить равной нулю, и энергии, полученной электроном вследствие воздействия электростатического поля. Последняя равна произведению заряда электрона e на разность потенциалов V_e в начальной и конечной точках пути его перемещения при ускорении. Отсюда следует, что

$$E_e = m_e c^2 = m_{e0} c^2 + eV_e , \quad m_e = m_{e0} + eV_e / c^2 \qquad (3)$$

Импульс $\mathbf{p}_e$ и скорость w_e электрона на выходе из электронной пушки определяются по соотношениям

$$\mathbf{p}_e = eV_e / c = m_e \mathbf{w}_e , \quad w_e = eV_e /(cm_e) . \qquad (4)$$

Решение динамической задачи столкновения частиц в трехмерной постановке при некоторых допущениях приводится [13]. При столкновении частиц сферической формы с массами m_e и m_a, которые ведут себя как вполне упругие тела, угол отклонения χ между векторами относительной скорости до, и после столкновения соответствует зеркальному отражению частиц друг от друга:

$$\chi = \pi - 2\vartheta = 2\arccos(b/\sigma) \text{ при } b \le \sigma \quad \text{и} \quad \chi = 0 \text{ при } b \ge \sigma , \qquad (5)$$

где ϑ - угол наклона относительной вектора скорости электрона к поверхности атома в точке их столкновения; b – прицельное расстояние; σ – среднее арифметическое значение диаметров сталкивающихся частиц.

При соударении частиц происходит торможение электрона. Его скорость снижается, инертная масса возрастает, а его энергия и абсолютная величина импульса в системе координат, связанной с центром масс, остаются неизменными [13]. В момент $t = \tilde{t}$, когда расстояние между центрами масс частиц становится минимальным, сталкивающиеся частицы имеют одинаковую скорость. При этом можно считать, что скорость электрона по отношению к атому равна нулю, а абсолютная скорость центра масс системы электрон–атом согласно закону сохранения импульса равна $w'' = (m_e w_e + m_a w_a)/(m_e + m_a)$. Если атом неподвижен и его масса $m_a >> m_e$, или он входит в состав кристаллической решетки, тогда можно считать, что $w'' = 0$. Далее мы ограничимся рассмотрением именно этого случая.

Торможение частиц является одним из условий возникновения и излучения фотонов [1]. В момент $t = \tilde{t}$ состояние заторможенного электрона аналогично состоянию свободного электрона после поглощения фотона $h\nu$, энергия которого равна eV_e [6]. Согласно закону спектрального излучения частиц (2) электрон, находящийся на некотором энергетическом уровне $h\nu$, через время, величина которого равна $1/\varepsilon_{e\nu'}$, где $\varepsilon_{e\nu'}$ – коэффициент излучения электроном фотон частоты ν', испускает фотон $h\nu'$ и переходит на нулевой энергетический уровень в системе координат, связанных с электроном. Максимальные значения энергии $h\nu$ и импульса $\mathbf{p}_f$ фотона излучаемого электроном при прямом столкновении с атомом, определяются выражениями:

$$h\nu = eV_e, \qquad \mathbf{p}_f = h\boldsymbol{\nu}/c = \mathbf{p}_e. \tag{6}$$

$$m_e c^2 = h\nu' + m'_e c^2, \ m'_e = m_{e0}/\sqrt{1 - w'^2_e/c^2}, \tag{7}$$

где m'_e и w'_e – масса и скорость электрона после излучения фотона $h\nu'$.

Из (3), (4), (6), (7) вытекают следующие зависимости скорости w'_e, импульса p'_e и энергии E'_e электрона отдачи, а также энергии $E'_f = h\nu'$, импульса p'_f излучаемого электроном фотона, от одной неизвестной величины – массы m'_e :

$$w'_e = c\sqrt{1-(m_{e0}/m'_e)^2}, \quad p'_e = m'_e\, w'_e = c\sqrt{m'^2_e - m^2_{e0}}, \quad E'_e = m'_e c^2 . \tag{8}$$

$$E'_f = h\nu' = m_{e0}c^2 + h\nu - m'_e c^2, \quad p'_f = p_f - c(m'_e - m_{e0}) \tag{9}$$

Для нахождения m'_e используется закон сохранения импульса для процесса излучения фотона $h\nu'$ электроном после столкновения с неподвижным атомом:

$$\mathbf{p}_e = \mathbf{p}'_f + \mathbf{p}'_e. \tag{10}$$

Векторное уравнение (10), согласно (6), можно записать в виде

$$p'^2_e = p_e^2 + p'^2_f - 2p_e p'_f \cos(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f). \tag{11}$$

При малых углах $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$ величина $|\mathbf{p}'_f| >> |\mathbf{p}'_e|$ и тогда из (10) следуют выражение $\mathbf{p}_e \approx \mathbf{p}'_f$ или $m_e w_e \approx h\nu'/c = h/\lambda'$, которое аналогично формуле де Бройля. После подстановки в уравнение (11) выражений (8) для w'_e и p'_e и (9) для p'_f приходим к уравнению, содержащему одно неизвестное - m'_e. Из этого уравнения следует

$$m'_e = m_{e0}\frac{1 + V_{eo}(1+V_{eo})[1-\cos(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)]}{1 + V_{eo}[1-\cos(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)]}, \tag{12}$$

где $V_{eo} = eV_e/(m_{e0}c^2)$. Инертная масса m'_e зависит от ускоряющего напряжения V_e и угла $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$.

Импульс p'_f фотона $h\nu'$ согласно (9), (12) определяется формулой

$$p'_f = \frac{h\nu'}{c} = \frac{eV_e}{c\{1 + V_{eo}[1-\cos(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)]\}}, \tag{13}$$

которую можно записать в виде

$$\nu' = \nu/\{1 + E_V[1-\cos(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)]\}. \tag{14}$$

Здесь $E_V = h\nu/(m_{e0}c^2) = V_{eo}$. Соотношение (14) совпадает с формулой Комптона, подтвержденной многочисленными экспериментальными данными [1], для изменения частоты фотона $h\nu$ при его взаимодействии со свободным электроном. Из соотношений (13) и (14) следует, что электрон, имеющий после столкновения с атомом энергию $E_e = m_{e0}c^2 + eV_e$, ведет себя так же [3], как первоначально неподвижный электрон после поглощения фотона с энергией $h\nu = eV_e$.

Углы $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$, $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)$ и $(\mathbf{p}'_f, \mathbf{p}'_e)$ между векторами $\mathbf{p}_e$, $\mathbf{p}'_f$ и $\mathbf{p}'_e$ находятся по формулам

$$\mathbf{p}'_e/\sin(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f) = \mathbf{p}_e/\sin(\mathbf{p}'_f, \mathbf{p}'_e) = \mathbf{p}'_f/[c\sin(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)]. \tag{15}$$

Если величины $\mathbf{p}_e = eV_e$ $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$ заданы, то углы $(\mathbf{p}'_f, \mathbf{p}'_e)$ и $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)$ находятся из уравнений

$$\sin(\mathbf{p}'_f, \mathbf{p}'_e) = \mathbf{p}_e \sin(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)/\mathbf{p}'_e, \tag{16}$$

$$\sin(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e) = \mathbf{p}'_f \sin(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f) / \mathbf{p}'_e. \tag{17}$$

Итак, все параметры, характеризующие состояние электрона и фотона после столкновения электрона с атомом в результате решения уравнений сохранения (7) и (10) полностью определены.

При проведении экспериментальных исследований, связанных с использованием пучка электронов для определения структуры молекул или кристаллов, пучок электронов и коллектор располагаются под определенными углами к объекту исследования, а энергия электронов варьируется. В этом случае вместо уравнения (11) целесообразно воспользоваться уравнением сохранения импульса в виде

$$p'^2_f = p_e^2 + p'^2_e - 2 p_e p'_e \cos(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e). \tag{18}$$

В результате совместного решения (7), (8), (9) и (18) находится формула для инертной массы m'_e электрона для случая, когда задан угол $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)$

$$m'_e = m_{e0} \frac{(V_{eo} + 1)^2 + V_{eo}^2 \cos^2(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)}{(V_{eo} + 1)^2 - V_{eo}^2 \cos^2(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)}. \tag{19}$$

Располагая величиной m'_e по соотношениям (8), (9), (16) и (17) последовательно находятся величины p'_e, E'_e, p'_f, E'_f, $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$ и $(\mathbf{p}'_f, \mathbf{p}'_e)$. В рассматриваемом процессе каждому фотону, испускаемому под углом $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$, отвечает электрон отдачи, движущийся под углом $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)$.

Дифракционные явления при падении пучка электронов на цепочку атомов. Пусть пучок электронов, каждый из которых обладает энергией $m_{e0}c^2 + eV_e$, падает под некоторым углом ϑ_e на цепочку из N неподвижных атомов, расположенных на одинаковом расстоянии l один от другого на прямой линии ς. В период столкновения электрона с атомом вначале происходит согласно соотношению (5) изменение направления импульса электрона, которое определяется прицельным расстоянием между электроном и атомом. Затем электрон, обладающий импульсом $\mathbf{p}_e$, излучает фотон $h\mathbf{v}'$ и приобретает новое значение импульса $\mathbf{p}'_e$. Направление излучаемого электроном фотона $h\mathbf{v}'$ относительно вектора $\mathbf{p}_e$ при взаимодействии пучка электронов с дифракционной решеткой не является равновероятным, поскольку между лучами фотонов $h\nu'$, которые возникают вследствие столкновения электронов с различными атомами цепочки, имеется определенная разность хода. Это обстоятельство приводит к явлению дифракции когерентных лучей, обладающих разными фазами.

Поскольку фотоны испускаются электронами и характеристики фотонов и электронов связаны уравнениями сохранения субстанции, то электроны отдачи также образуют дифракционную картину. Расчет дифракционных картин для фотонов и электронов, возникающих при падении пучка электронов на цепочку, проводится в такой последовательности. Принимается для простоты, что разность фаз лучей, отвечающих двум соседним атомам, создается из-за того, что линия наблюдения дифракционной картины находится под некоторым углом $\theta = (\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$ к направлению движения электронов непосредственно перед излучением фотона $h\nu'$. Это допущение реализуется, в частности при $\vartheta_e = \pi/2$. Вследствие разности хода лучей $\delta = l \sin\theta$ для двух соседних атомов возникает сдвиг фазы φ [4]

$$\varphi = 2\pi l \sin\theta / \lambda' = 2\pi l p'_f \sin\theta / (hc). \tag{20}$$

Уравнение электромагнитной волны, которая возникает при столкновении электрона с атомом, имеющим на линии ς порядковый номер j, в соответствии с решением волнового уравнения имеет вид

$$x_j = A\sin(\omega t + j\varphi), \quad j = 0, 1, ..., N-1. \tag{21}$$

где $\omega = 2\pi c/\lambda'$, $\lambda' = c/\nu'$. В результате наложения когерентных волн, линейно поляризованных в одной плоскости, происходит ослабление или усиление интенсивности света в зависимости от соотношения фаз складываемых световых волн.

Для нахождения напряженности результирующей электромагнитной волны, создаваемой N атомами, вычислим сумму R_φ всех волн, которые описываются уравнениями (21):

$$R_\varphi = \sum_{j=0}^{N-1} A\sin(\omega t + j\varphi) = A\frac{\sin(N\varphi/2)}{\sin(\varphi/2)} \sin[\omega t + (N-1)\varphi/2]. \tag{22}$$

Согласно (22) результирующая волна имеет ту же угловую частоту, что и волны (21). Ее фаза представляет собой среднее арифметическое значение фаз составляющих волн. Амплитуда результирующей волны равна $A_\varphi = A\sin(N\varphi/2)/\sin(\varphi/2)$. Интенсивность электромагнитной волны пропорциональна квадрату напряженности электрического вектора световой волны. С точки зрения фотонной теории интенсивность волны с круговой частотой $\omega = 2\pi\nu'$ пропорциональна плотности потока I_f фотонов в направлении распространения этой волны. Таким образом

$$I_f = I_{f0}\sin^2(N\varphi/2)/\sin^2(\varphi/2), \tag{23}$$

где I_{f0} – плотности потока фотонов от отдельного атома цепочки. При $N=1$ величина $I_f = I_{f0}$. Аналогичные выражения для амплитуды и интенсивности результирующей волны получены в [4]. Из (23) следует, что при $\varphi \to 0$ отношение I_f / I_{f0} возрастает в N^2 раз. Согласно (23) при $\phi = 0, 2\pi, 4\pi, 6\pi$, когда разность хода когерентных лучей для двух соседних атомов равна нулю или целому числу длин волн, возникают главные максимумы, в которых результирующая плотность потока энергии фотонов в N^2 раз превышает величину I_{f0}. С учетом (20) условие возникновения главного максимума $\varphi = 2\pi k$ можно записать в виде

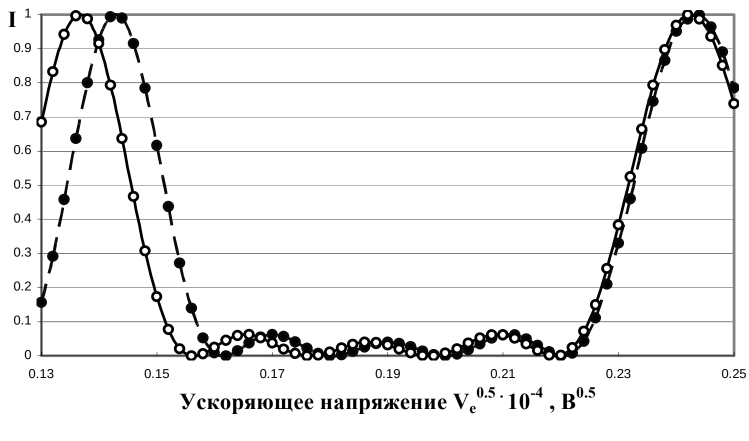
$$l\sin\theta = k\lambda, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{24}$$

а выражение (23) запишется так

$$I_\theta = N^{-2}\sin^2(N\pi l p'_f \sin\theta / h)\sin^{-2}(\pi l p'_f \sin\theta / h) \tag{25}$$

Выше было показано, что каждому рассеянному фотону $h\nu'$, направленному под углом $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$ к вектору $\mathbf{p}_e$ при данном значении V_e отвечает строго определенный рассеянный электрон с импульсом $\mathbf{p}'_e$, который образует с вектором $\mathbf{p}_e$ угол $\theta_e = (\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)$. Поток I_θ фотонов $h\nu'$, рассеянных под углом $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$, должен равняться потоку электронов отдачи I_e с импульсом $\mathbf{p}'_e$, рассеянных под углом $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$, т. е. $I_e = I_\theta$. Это позволяет из (25) найти относительную плотность потока электронов, которые попадают в коллектор с осью, образующей с вектором $\mathbf{p}_e$ угол $\theta_e = (\mathbf{p}'_e, \mathbf{p}_f)$.С этой целью по формуле (19) вычисляется масса электронов m'_e, которые рассеяны под углом θ_e при некотором текущем значении V_e. По формуле (8) находится импульс электрона p'_e,из (9) – импульс фотона p'_f а из (17) –угол $\theta = (\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$. Далее по формуле (25) находится функция относительной плотности потока фотонов I_θ, рассеянных под углом $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$. Наконец, исходя из условия $I_e = I_\theta$, вычисляется относительная плотности потока электронов I_e под углом $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)$.

На рисунке в координатах I , $\sqrt{V_e}$ представлены кривые зависимости относительных плотностей потоков $\mathbf{I}$ электронов $I_e/(N^2 I_0)$ для $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f) = \pi/8$ (сплошная линия) и фотонов $I_f/(N^2 I_0)$ для $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e) = \pi/8$ (штриховая линия) в зависимости от ускоряющего напряжения при фиксированном положении пучка электронов, коллектора и цепочки из 5 атомов. Вид этих кривых аналогичен построенным на базе экспериментальных данных Девиссона - Джермера [2]. Следует отметить, что при небольших и равных углах $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_f)$, $(\mathbf{p}_e, \mathbf{p}'_e)$ относительные функции плотности потоков фотонов и электронов отличаются незначительно. Увеличение этих улов приводит к возрастанию расхождений указанных функций.



Представленный алгоритм решения задачи о взаимодействии пучка электронов с цепочкой атомов может быть применен для изучения дифракционных явлений при падении пучка частиц вещества на плоскую ортогональную дифракционную решетку, на кристаллы или на молекулы с целью выявления их структуры. Ортогональная двумерная решетка может рассматриваться, как совокупность из M цепочек атомов, параллельно расположенных в одной плоскости на одинаковых расстояниях друг от друга. Если направление пучка электронов нормально к прямой линии, на которой расположены атомы цепочки, тогда плотность потока фотонов $h\nu'$ от плоской решетки возрастает по сравнению с потоком от одной цепочки в M^2 раз.

Известны методы расчета дифракции света на многомерных структурах [1,2], в частности при произвольном направлении электромагнитной волны относительно плоской ортогональной решетки и трехмерной кристаллической решетки. Если получено решение задачи дифракции электромагнитных волн, возникающих при падении пучка электронов на многомерную структуру, тогда можно также, как это было показано выше для цепочки атомов (одномерной дифракционной структуры), определить дифракционную картину электронов для многомерных решеток.

РЕЗЮМЕ

Представлений механізм дифракційних явищ, що виникають при падінні пучка електронів на дифракційну решітку. Відповідно до цього механізму дифракційна картина електронів є наслідком дифракції фотонів. Для випадку взаємодії пучка електронів з одномірною атомною решіткою наведені формули для маси, енергії та імпульсу електронів і фотонів, які узгоджуються з відомими єксперіментальними даними.

Ключові слова: дифракційні картини електронів і фотонів, механізм зіткнення частинок, молекулярно-радіаційна теорія переносу.

SUMMARY

The mechanism of diffraction phenomena arising from the incident electron beam on the grating. According to this mechanism the diffraction pattern onnaya electrons is a consequence of the diffraction of photons. In the case of the interaction of an electron beam with a one-dimensional atomic lattice are the formulas for mass, energy and momentum of electrons and photons, which are consistent with the known experimental data.

Keywords: Diffraction pattern of electrons and photons, the mechanism of particle collisions, the molecular radiative transfer theory.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Яворский Б. М. Справочник по физике / Б.М. Яворский ,А.А Детлаф– М.: Наука, 1974. – 942 с.
2. Карякин Н.И. Краткий справочник по физике / Н.И. Карякин, К.Н. Быстров, П.С. Киреев. – М.: Высшая школа, 1962.– 573 с.
3. Карапетянц М.Х. Строение вещества / М.Х. Карапетянц, С.И Дракин. – М.: Высшая школа, 1978. – 310 с.
4. Фейнман Р. Феймановские лекции по физике / Р. Фейнман, Р. Лейтон,М. Сендс. – Москва: Мир, 1997, – Т. 3. – 496 с.
5. Никитенко Н. И. Температурная зависимость межатомного потенциала и уравнние состояния конденсированных тел / Н.И. Никитенко // Журн. физ. химии.– 1978.–Т. 52, № 4.– С. 866-870.
6. Никитенко Н.И.Теория тепломассопереноса / Н.И. Никитенко. – Киев: Наук. Думка, 1983. – 350 с.
7. Никитенко Н. И. Проблемы радиационной теории тепло - и массопереноса в твердых и жидких средах / Н.И. Никитенко // Инженерно-физ. журнал.– 2000. – Т. 73, № 4. – С. 851–860.
8. Никитенко Н. И. Исследование динамики испарения конденсированных тел на основе закона интенсивности спек трального излучения частиц / Н.И. Никитенко// Инженерно-физ. журнал.– 2002. – Т. 75, № 3. – С. 28-134.
9. Никитенко Н. И. Исследование механизмов теплопроводности в диэлектриках и металлах на базе молекулярно-радиационная теория переноса / Н.И. Никитенко // Инженерно-физ. журнал. – 2010. – Т.83, № 2. – С. 284-294.
10. Никитенко Н. И. Исследование механизмов теплопроводности в диэлектриках и металлах на базе молекулярно–радиационная теория переноса / Н.И. Никитенко, Ю.Ф. Снежкин, Н.Н. Сороковая // Инженерно-физ. журнал. – 2008. –Т. 81, № 6. – С. 1111–1124.
11. Никитенко Н. И. Закон интенсивности спектрального излучения частиц и связанные с ним проблемы тепло – и массопереноса./ Н.И. Никитенко// Пятый Минский международный форум по тепло- и массообмену. – Т.1. Тез. Докладов. Минск. – 2004. – С. 204-206.
12. Никитенко Н. И. О взаимосвязи между радиационными характеристиками частиц тела и поля теплового излучения /Н.И. Никитенко // Доповіді НАН України. – 2004. – № 10. – С. 100-108
13. Гиршфельдер Дж. Молекулярная теория газов и жидкостей / Дж. Гиршфельдер.,Ч. Кертисс, Р Берд. – Москва: ИЛ, 1961. – 930 с.

Поступила в редакцию 28.09.2011 г.

УДК 538.95+945

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ИНДУКЦИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ В СВЕРХПРОВОДНИКЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ТЕРМОМАГНИТНЫХ ЛАВИН В РЕЖИМЕ ЗАХВАТА МАГНИТНОГО ПОТОКА

В. Ф. Русаков, В. В. Чабаненко, С. В. Васильев*, I. S. Abalyosheva**, A. Nabiałek**, Е. И. Кучук**

*Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, г. Донецк
**Institute of Physics, Polish Academy of Sciences al. Lotników 32/46, 02-668 Warsaw, Poland

На основе результатов магнитооптического исследования термомагнитных неустойчивостей в жестких сверхпроводниках второго рода проведено изучение распределения индукции магнитного поля на поверхности сверхпроводящего диска, возникающее в результате последовательного выхода лавин магнитного потока. Показано, что при уменьшении внешнего магнитного поля до нуля в образце возникают, так называемые, мейснеровские полости. Величина локального тока (обусловленная z – компонентой магнитного поля), протекающего на границе области вышедшего потока, практически одинакова для всех исследованных лавин.

Ключевые слова: жесткий сверхпроводник второго рода, критический ток, магнитная визуализация, мейснеровская полость, лавина магнитного потока.

Введение. В работах [1 – 2] рассмотрено преобразование индукции магнитного поля на поверхности однородных и неоднородных жестких сверхпроводников второго рода в результате термомагнитных лавин. Лавинное проникновение магнитного потока происходило в *режиме экранирования внешнего* магнитного поля, т.е. в случае, когда после охлаждения сверхпроводника в нулевом магнитном поле (ZFC режим) оно нарастало от нуля вплоть до критического значения – поля первого скачка потока. Экспериментальные данные были получены с использованием магнитооптической техники, описанной в работах [3, 4].

Анализ магнитооптических изображений позволил охарактеризовать особенности процесса динамики потока на поверхности сверхпроводников. Лавинная динамика магнитного потока приводит к возникновению сильных локальных пространственных неоднородностей в распределении магнитного поля и температуры в объеме сверхпроводника. Неоднородность распределения магнитного поля на поверхности образца, характеризуется на фотографиях неравномерностью освещенности соответствующих областей. Результатом лавинного вхождения потока в образец, стало возникновение пальцеобразной структуры (объемные сверхпроводники), либо дендритной структуры (сверхпроводящие диски и пленки). Условия формирования и особенности структуры возникших полей индукции в пальцеобразных структурах исследованы в работе [5]. Образование выпуклых поверхностей индукции в результате лавин, выявленных на магнитооптических фотографиях, находится в хорошем соответствии, например, с обнаруженной нами инверсией профиля распределения индукции в объемных сверхпроводниках с помощью линейки датчиков Холла [6].

Другим важным фактом нашего анализа динамики процесса, выявленным из результатов скоростной киносъемки, было выделение двух этапов в процессе лавинообразного проникновения потока [1]. При вхождении магнитного потока в образец лавины зарождаются на границе мейсснеровского состояния. На первом этапе происходит формирование области проникновения магнитного поля с фиксацией ее границы (замораживание фронта лавины). На втором этапе происходит заполнение этой области магнитным потоком и его перераспределение. В результате внутри возникшего магнитного «пятна» может наблюдаться как однородное, так и неоднородное перераспределение магнитной индукции. Неоднородное проникновение потока в сформированную лавинную область возникает в результате того, что абрикосовские вихри могут проникать в образец по ослабленной (с точки зрения пиннинга), разогретой в результате диссипативных процессов области лавинного пятна. Эти разогретые области формируют «русло», по которому и втекает магнитный поток. Исследование показало, что это «русло» располагается, как правило, по границе области мейсснеровского состояния, а магнитное давление внешнего поля обуславливает его повышенную концентрацию и выпуклый профиль [1]. И наконец, установлено, что магнитный поток, входящий в образец в результате последующих лавин, не пересекает границы области, сформированной предыдущей лавиной.

В представленной работе исследовано преобразование индукции магнитного поля, захваченного в сверхпроводнике магнитного потока (*режим захвата*) в результате процесса лавинного его выхода при термомагнитных лавинах. Проанализированные нами магнитооптические данные получены в работе [7].

Эксперимент. Эксперимент проводился следующим образом. Образец, имеющий критическую температуру T_c=9K, переводился в сверхпроводящее состояние и охлаждался до 1.83K. При этой температуре вводилось магнитное поле до величины, превышающей значение второго критического поля. Это поле переводило образец в нормальное состояние, обеспечивая однородное распределение магнитной индукции по материалу. Затем поле выключалось, т.е. падало до нуля. При этом магнитный поток в образце захватывался сверхпроводящими токами. Конфигурация профиля индукции при такой последовательности действий имеет максимальное значение магнитной индукции в центре образца, которая затем спадает до нуля вблизи границы диска. Если воспользоваться классическим механическим аналогом термомагнитной лавины, то можно сказать, что профиль магнитной индукции в образце аналогичен профилю песчаной горки. Когда наклон горки песка достигает критического, она разрушается (рассыпается) лавинным образом в виде потока скатывающихся песчинок. Аналогично, при определенном значении градиента индукции магнитного поля в образце, возникают термомагнитные лавины выхода магнитного потока.

Магнитооптические исследования результатов лавинной динамики выполнены на ниобиевых дисках различной толщины – 0.03 мм и 1 мм и одинакового диаметра 13 мм [7]. Использованная в этой работе экспериментальная техника позволяла изучать распределение магнитного поля в образце одновременно на обеих поверхностях дисков. Картина полей индукции на обеих поверхностях образца имеет подобную, но не одинаковую структуру. Это дает возможность анализировать распределение поля, установившееся в объеме образца. Отличие размеров областей, возникших в результате выхода потока на противоположных поверхностях диска, свидетельствует о наличии в некоторых местах диска не только перпендикулярной к поверхности компоненты магнитного поля (только ее может фиксировать магнитооптика), но и компоненты, лежащей в плоскости диска.

Результаты анализа данных магнитооптики. На рис. 1 в нижнем правом углу представлена оригинальная фотография из работы [7]. На ней показано распределение магнитного поля на поверхности образца после выхода нескольких (6-7) лавин. Каждой лавине соответствует дуга, расположенная по периметру диска. Эта дуга ограничивает область вышедшего потока. Белые стрелки, проведенные через центр дуг, указывают направления, вдоль которых выполнен анализ интенсивности освещенности фотографии. Цифрами указаны номера лавин для идентификации с построенными кривыми распределений. Вверху на графике показаны кривые распределение освещенности, как функции расстояния от границы образца. На каждой кривой определены области, наиболее быстрого изменения освещенности, т.е., где производная максимальна. Производная в этой области dB_z/dr определяет величину локального тока (обусловленного z – компонентой магнитного поля), протекающего на границе области захваченного потока. Наклон этих прямых, сформированный процессом срыва потока при термомагнитной неустойчивости, близок по величине для всех исследованных лавин. В то же время площади лавин, существенно (на порядок) отличаются (рис. 1). Если предположить, что величина вышедшего, в процессе лавины, потока пропорциональна площади образца, из которой вышел поток, то можно сделать вывод, что критическая величина локального тока по границе лавинного пятна не зависит от величины вышедшего потока. В то же время структура индукции магнитного поля, внутри возникшей впадины, изменяется немонотонным образом (лавина 1). На формирование этой структуры оказывает влияние изменение температуры (разогрев) внутри впадины магнитной индукции. С увеличением количества вышедшего потока температура этой области значительно возрастает вследствие диссипации (разогрева образца движущимися вихрями). Отличие температур внутри области сверхпроводника, из которой вышел поток, для разных номеров лавин и определяет различие структур индукции.

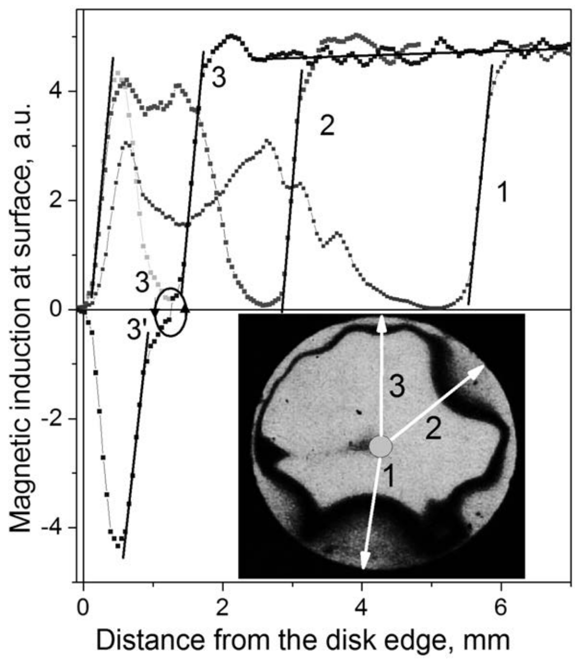


Рис. 1. Профили магнитной индукции в ниобиевом диске в направлениях, указанных стрелками на магнитооптическом изображении; диаметр диска 13мм, толщина 1 мм. Внизу показано магнитооптическое изображение распределения магнитной индукции при температуре T=1.8K [7]

В теоретической работе [8] показано, что в ситуации уменьшения поля до нуля после режима захвата потока, вблизи боковой поверхности сверхпроводящего диска существует область, в которой силовые линии магнитного поля замкнуты и, как следствие, в этой области образуются кольцевые вихри Абрикосова. Образование таких областей является следствием влияния поля размагничивания, поскольку при уменьшении внешнего магнитного поля до нуля, из-за захваченного магнитного потока поле на границе диска оказывается обратно направлению магнитного поля в его центре. Изменение картины силовых линий магнитного поля при выходе магнитного потока из сверхпроводящего диска в случае уменьшения внешнего поля показано на рис. 2, а. Здесь рассмотрены конфигурации линий индукции при трех значениях внешнего поля H_0: $H_0=0.5H_p$, $0.25H_p$ и в нулевом поле. Величина внешнего поля нормируется на поле полного проникновения H_p (поле, в котором вихри проникают до центра образца). Возникновение областей с противоположным направлением индукции вблизи края диска хорошо видно для ситуации, когда внешнее поле равно нулю (рис. 2, б). Здесь также отчетливо видно образование замкнутых силовых линий. В образце совокупность таких линий образует тороидальную полость, называемую мейсснеровской полостью [8]. Схема образования и расположения мейсснеровской полости в пластине сверхпроводника второго рода прямоугольной формы изображена на рис. 2б. Экспериментальное наблюдение таких тороидальных областей в монокристалле YBaCuO при квазистатическом проникновении поля представлено в работах [9,10].

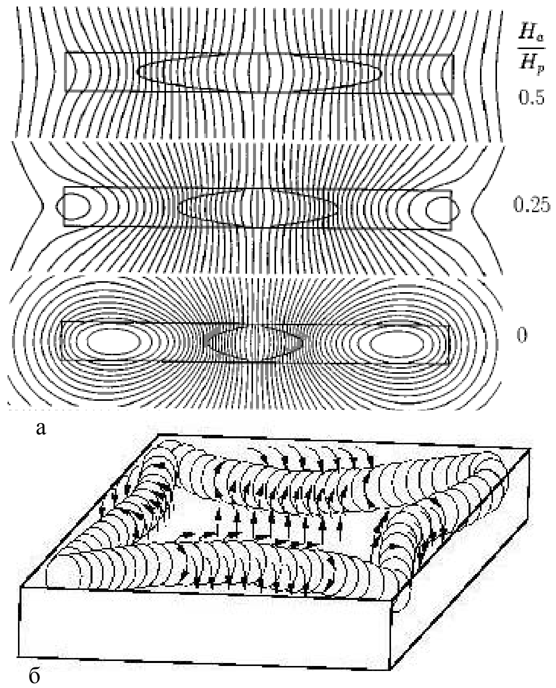


Рис. 2. а) – изменение картины силовых линий магнитного поля при выходе магнитного потока из сверхпроводника (по работе [8]); б) – форма мейсснеровской полости в пластине квадратной формы [9]

Учитывая вышеприведенные рассуждения, мы на графике для третьей лавины изменили знак индукции (кривая 3') вблизи поверхности, как показано на рис. 1. Тогда в районе нулевого значения индукции силовая линия может замкнуться, образовав внутри диска подобную тороидальную область. Если обратиться к фотографии (рис. 1), то темная извилистая полоса вдоль боковой поверхности диска, сформированная лавинами, представляет мейсснеровскую полость, сформированную лавинным выходом потока.

Следует отметить тот факт, что для лавин в направлении 1 и 2 на рис.1 эта область оказывается весьма широкой, что несколько противоречит статическим расчетам Брандта о проникновении поля в сверхпроводящий диск. Образование таких областей с нулевой осевой индукцией можно объяснить с помощью гипотезы об аннигиляции пар вихрь-антивихрь. Захваченный поток в центре образца направлен вдоль оси z, по мере уменьшения внешнего поля из-за имеющегося захваченного потока поле на границе образца оказывается меньше внешнего и при некоторой величине внешнего поля (отличной от нуля), на границе сверхпроводника поле обращается в нуль. По мере дальнейшего уменьшения поля на границе появляется магнитное поле обратного знака, что приводит к вхождению в сверхпроводник вихрей Абрикосова с обратной ориентацией (антивихрей). Таким образом, в образце возникает граница раздела между захваченными вихрями и антивихрями. Сила взаимодействия между вихрем и антивихрем является силой притяжения, что приводит к их аннигиляции с выделением тепла. Этот процесс порождает локальный разогрев и снижение силы пиннинга и, как следствие, повышает подвижность вихрей и антивихрей в области границы их раздела, что способствует процессу их аннигиляции. В результате такого процесса возможно образование безвихревых областей в сверхпроводящем диске. Подобные явления наблюдались на масштабах в несколько миллиметров в сверхпроводящих пленках YBaCuO [11].

Выводы. На основе анализа экспериментальных результатов магнитооптического исследования термомагнитных неустойчивостей в жестких сверхпроводниках второго рода построено распределение индукции магнитного поля на поверхности сверхпроводящего диска, возникшее в результате нескольких последовательных лавин, связанных с выходом магнитного потока. Из представленного анализа следует, что темная извилистая полоса вдоль боковой поверхности диска, сформированная лавинами, может представлять замкнутую тороидальную мейсснеровскую полость, ранее предсказанную в [8], либо область аннигилировавших пар вихрь – антивихрь.

Установлено, что величина локального тока (обусловленная z – компонентой магнитного поля), протекающего на границе области вышедшего потока, практически одинакова для всех исследованных лавин, т.е. не зависит от величины этого потока. Структура поля индукции в магнитной «впадине» для разных лавин сильно отличается, в отдельных случаях она сложная, с регулярными немонотонностями. Эти отличия могут быть связаны с различной температурой локального разогрева вследствие диссипативных процессов при лавинной динамике потока.

РЕЗЮМЕ

На підставі магнітооптичного дослідження термомагнітних нестійкостей у жорстких надпровідниках другого роду проведено вивчення розподілу індукції магнітного поля на поверхні надпровідного диска, яке виникає внаслідок послідовного виходу лавин магнітного потоку. Показано, що при зменшенні зовнішнього магнітного поля до

нуля у зразку виникають, так звані, мейснерівські порожнини. Величина локального струму (обумовлена z – компонентою магнітного поля), який протікає по межі захопленого потоку, майже однакова для усіх лавин.

Ключові слова: жорсткий надпровідник другого роду, критичний струм, магнітна візуалізація, мейснерівська порожнина, лавина магнітного потоку.

SUMMARY

Basing on the data of magnetooptical measurements of thermomagnetic instabilities in superconductors of type II, the distribution of the magnetic field induction was studied at consequence emerging magnetic avalanche at the surface of a superconducting disc. It was shown that when external magnetic field decreases to zero, so called Meissner holes appears in sample. The magnitude of local current (which is defined by z – component of magnetic field) practically is identical for all avalanches.

Key words: hard superconductor type II, critical current, magnetic visualization, Meissner holes, magnetic flux avalanche.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рельеф индукции магнитного поля на поверхности жесткого сверхпроводника при неоднородном лавинном вхождении магнитного потока / В.Ф. Русаков, A. Nabialek, В.В. Чабаненко и др. //Вісник Донецького університету. Сер. А. Природничі науки. – 2011. – № 1. – С. 78-81.
2. Русаков В.Ф. Анализ движения вихревой системы в жестких сверхпроводниках второго рода по результатам магнитооптического изучения лавин магнитного потока / В.Ф. Русаков, В.В. Чабаненко, С.В. Васильев // Вісник Донецького університету. Серія А. Природничі науки – 2007. – Вип. 2. – С. 132-135.
3. Wertheimer M.R. Flux jumps in type II superconductors / M.R. Wertheimer, J.G. Gilchrist // J. Phys. Chem. Solids. – 1967. – Vol. 28. – P. 2509-2524.
4. Goodman B.B. Un appareil pour l’etude de la cinetique des sauts de flux des supraconducteurs de la deuxiem espece / B.B. Goodman, A. Laceze, M.R. Wertheimer // C.R. Acad. Sc. Paris. – 1966. – Vol. 262. – P. 12-15.
5. Finger patterns produced by thermomagnetic instability in superconductors / A.L. Rakhmanov, D.V. Shantsev, Y.M. Galperin, T.H. Johansen // Phys. Rev. B. – 2004.– Vol. 70. – P. 224502-1 – 224502-8.
6. The reversal of the local magnetic field profile at the surface of superconducting sample caused by the thermomagnetic avalanche, / V. Chabanenko, S. Vasiliev, V. Rusakov et al. // J. Low Temp. Phys. – 2009. – Vol. 154. – P. 55-67.
7. Keyston J.R. A new method for measuring the speed of flux jumps in type II superconductors / J.R. Keyston, M.R. Wertheimer // Cryogenics. – 1966. – Vol. 6. – P. 341-343.
8. Brandt E.H. Superconductor disks and cylinders in an axial magnetic field. I. Flux penetration and magnetization curves / E.H. Brandt // Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 58, No 10. – P. 6506-6522
9. Meissner holes in superconductors / V.K. Vlasko-Vlasov, U. Welp, G.W. Crabtree et al. // Phys. Rev. B. – 1997. – Vol. 56. – P. 5622-5630.
10. Meissner holes and turbulent structures in superconductors in unidirectional and rotating fields / V.K. Vlasko-Vlasov, U. Welp, G.W. Crabtree et al. // Phys. Rev.B. – 1998. – Vol. 58. – P. 3446-3456.
11. Prozorov R. Collapse of the critical state in superconducting niobium / R. Prozorov, D. Shantsev, R.M. Mints // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 74. – P. 220511-1 – 220511-4.

Поступила в редакцию 20.02.2012 г.

ХІМІЯ

УДК 543.422

ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОЕ АТОМНО-АБСОРБЦИОННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОКСИЧНЫХ (Pb, Cd) И ДРАГОЦЕННЫХ (Au) ЭЛЕМЕНТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНИКИ ДОЗИРОВАНИЯ СУСПЕНЗИЙ И ПАЛЛАДИЙУГЛЕРОДНЫХ МОДИФИКАТОРОВ

А. С. Алемасова, П. В. Белицкий, Н. В. Алемасова

Предложен новый палладийуглеродный модификатор и оценена его эффективность при прямом электротермическом атомно-абсорбционном определении содержания свинца в суспензии растительных материалов и золота в суспензии полиметаллической руды.

Ключевые слова: электротермическая атомно-абсорбционная спектроскопия, свинец, кадмий, золото, палладийуглеродные модификаторы.

Введение. В работе решается актуальная проблема в области электротермической атомно-абсорбционной спектроскопии (ЭТААС) – улучшение метрологических характеристик ЭТААС анализа твердых проб. Стадия растворения или сплавления твердых проб нередко приводит к загрязнениям образца и потере аналита, а использование большого количества кислот или плавней является причиной завышенных значений холостого опыта и ведет к ухудшению метрологических характеристик методик. В настоящее время существует два варианта анализа твердых проб. Первый метод заключается во введении твердой пробы непосредственно в графитовую трубку атомизатора [1]. Второй включает в себя приготовление суспензии, представительная аликвота которой вводится в атомизатор (так называемая «техника дозирования суспензий – slurry sampling») [2, 3]. Прямой атомно-абсорбционный анализ твердых проб имеет много недостатков: сложное инструментальное исполнение, сложность приготовления образцов сравнения, плохая гомогенность проб, малая представительность, матричные эффекты, высокое неселективное поглощения [4].

Техника дозирования суспензий позволяет объединить существенные преимущества прямых методов анализа твердых и жидких образцов. Сокращается время подготовки пробы к анализу, снижается расход реактивов, улучшаются метрологические параметры результатов определения. Однако при этом возможен рост неселективного сигнала из-за присутствия матричных компонентов. Устранить матричные помехи возможно с использованием специально вводимых в суспензию веществ – химических модификаторов.

Эффективными модификаторами суспензий являются модификаторы на основе активированного угля, пропитанного растворами неорганических солей, которые также применяют в виде суспензий. Так, авторы [5-7] использовали палладий содержащий активированный уголь в качестве сорбента-модификатора для предварительного концентрирования арсина из образцов природной воды с последующим определением мышьяка методом ЭТААС с дозированием в графитовую печь водных суспензий сорбента-модификатора. Палладийуглеродные модификаторы на основе активированного угля и карбонизованной ореховой скорлупы показали свою высокую эффективность при ЭТААС определении свинца и кадмия в суспензиях карбонизированных образцов проб с высоким содержанием органической матрицы [8].

Целью данной работы являлось исследование эффективности палладийуглеродных модификаторов при определении свинца и кадмия, а также золота в суспензиях растительных материалов и полиметаллической руды. В работе использовали Александрийский бурый уголь (АБУ), пиролизный графит МПГ и модифицированные высокопористые угли, полученные из Александрийского бурого угля путем модифицирования их КОН (быстрого и медленного нагрева) [9-11]. Последние были предоставлены отделом химии угля института физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко.

Построение решения задачи. При использовании металлуглеродных модификаторов в ЭТААС в первую очередь необходимо выяснить степень чистоты угля, т.к. высокая чувствительность метода выдвигает высокие требования к чистоте исходных реагентов и к величине холостого опыта. Химическая природа угля и способ его получения оказывают влияние на величину неселективного (неатомного) поглощения. В предварительных опытах было установлено, что наиболее приемлемым углем для получения палладийуглеродных модификаторов для определения свинца и кадмия является Александрийский бурый уголь, модифицированный КОН при медленном нагреве (АУ-$К_{м.н.}$).

Для выяснения стабильности водно-угольных суспензий нами были изучены характеристики устойчивости водно-угольных суспензий с концентрацией 40 мг/мл методом осветленного слоя [12]. Установлено, что наиболее устойчивая суспензия получается при использовании модифицированного Александрийского угля медленного нагрева – время появления двухсантиметрового осветленного слоя составляет 230 секунд.

Палладийуглеродный модификатор (Pd-АУ-$К_{м.н.}$) получали описанным ранее в литературе методом пропитки [8] и методом сорбции соединений палладия на угле в статических условиях. По методу пропитки навеску угля массой 0,20 г помещали в бюкс, приливали 2 мл раствора $Pd(NO_3)_2$ с концентрацией 0,025 моль/л, перемешивали. Концентрация палладия в таком модификаторе составляла 1,2%. Бюкс помещали в сушильный шкаф и высушивали уголь при температуре 105°С до постоянной массы. После высушивания модификатор измельчали.

По методу сорбции навеску угля массой 0,40 г переносили в коническую колбу, приливали 10 мл стандартного раствора палладия(II) с концентрацией 1 мг/мл. Добавляли раствор гидроксида калия с концентрацией 1 моль/л для создания pH ~ 8-9 и встряхивали 45 минут. По окончании сорбции уголь отфильтровывали через фильтр Шотта, высушивали. Фильтрат после сорбции анализировали на содержание в нем остаточного палладия пламенным атомно-абсорбционным методом. По количеству остаточного палладия судили о степени сорбции палладия углем.

При дозировании суспензий в графитовую печь их нужно периодически встряхивать с целью гомогенизации. Учитывая это, нами было исследовано межфазное распределение солей палладия в гетерофазных системах суспензий модификаторов, полученных двумя методами – сорбцией и пропиткой. Полученные данные представлены в табл. 1.

Таблица 1

Степень десорбции Pd с модификатора при десятикратном интенсивном встряхивании суспензии модификатора

Модификатор	Способ получения модификатора	Степень десорбции Pd при гомогенизации суспензии, %
Pd-АУ-$К_{м.н.}$	Пропитка угля раствором Pd(II) и высушивание при 105°С	6,0
	Сорбция Pd(II) на угле, pH 8-9	0

Из данных табл. 1 видно, что для модификатора, полученного путем сорбции Pd(II) на угле, многократное встряхивание при гомогенизации суспензии модификатора не приводит к десорбции палладия и его концентрация в твердых частицах суспензии модификатора не меняется. Следовательно, термостабилизирующая способность такого модификатора будет оставаться постоянной во всех опытах.

Было изучено влияние концентрации палладия, сорбированного на модификаторе, на термостабилизирующую способность последнего при ЭТААС определении свинца и кадмия (рис. 1).

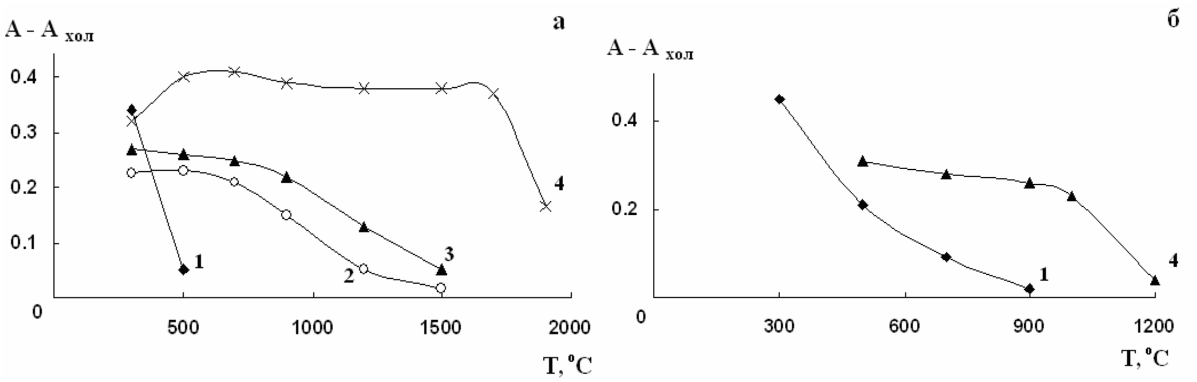


Рис. 1. Кривые пиролиза свинца (а) и кадмия (б): 1 – водные растворы; 2-4 – суспензии модификатора с массовой долей палладия (в %): 2 – 0,5; 3 – 1,5; 4 – 2,5.

Из данных рис. 1 видно, что наибольшую термостабилизирующую способность имеет модификатор с массовой долей палладия 2,5%. В его присутствии максимально допустимая температура стадии пиролиза может быть увеличена на 600°С для кадмия и на 1500°С для свинца.

Проведенные исследования были использованы нами при разработке ЭТААС методики определения свинца в растениях с использованием техники дозирования суспензий и палладийуглеродного модификатора. В качестве объекта исследования были выбраны растения, произрастающие в устье реки Новая Крынка. Пробы были подготовлены студентами и аспирантами биологического факультета ДонНУ.

Определение концентрации свинца проводили на атомно-абсорбционном спектрофотометре Сатурн-3 с электротермическим атомизатором серии Графит на резонансной линии 283,3 нм; ширина щели монохроматора 0,2 нм; источник резонансного излучения – лампа с полым катодом ЛТ-2.

Растения были предварительно высушены, измельчены и просеяны через сито с диаметром отверстий 0,5 мм. Суспензии растений готовили путем гомогенизации навески 0,200 г растений и 0,100 г полученного ранее методом сорбции химического модификатора Pd-АУ-$К_{м.н.}$ с 5 мл 5% раствора глицерина с целью дополнительной стабилизации суспензии. Согласно данным работы [13] глицерин является оптимальным стабилизатором водно-угольных суспензий при определении свинца. Холостой опыт готовили таким же образом без растений.

Суспензию энергично перемешивали встряхиванием в течение 10-15 секунд, отбирали аликвоту 20 мкл ручным дозатором и помещали ее на графитовую платформу в печи. Нагрев атомизатора осуществляли по следующей программе: сушка – 100ºС, 20 с; пиролиз – 1800ºС, 30 с; атомизация – 2200ºС, 5 с. Работу осуществляли по однолучевой схеме с дейтериевым корректором фона. Регистрировали интегральную интенсивность аналитического сигнала. Концентрацию свинца находили по методу добавок. Для этого к приготовленной суспензии, как было описано ранее, добавляли аликвоты стандартного раствора свинца до получения необходимой концентрации. С целью проверки правильности полученных результатов параллельно проводили атомно-абсорбционное определение свинца после предварительного кислотного вскрытия проб растений, которое проводили по стандартной методике [14]. Полученные данные представлены в табл. 2.

Таблица 2

Определение свинца в растениях, произрастающих в устье реки Новая Крынка (P = 0,95; n = 3)

Метод анализа	Содержание свинца в пробе, мг/кг	Относительное стандартное отклонение S_r
ЭТААС с использованием техники дозирования суспензии и палладийуглеродного модификатора	2,42 ± 0,24	0,04
ЭТААС после кислотного вскрытия проб	1,83 ± 0,76	0,17

Проверка результатов, полученных двумя методами, по F и t-критериям свидетельствует, что различие между средними значениями результатов двух сравниваемых выборок статистически не значимо, что подтверждает правильность результатов, полученных по новой методике новой методики.

Золото в рудах традиционно определяют атомно-абсорбционным методом после длительного и трудоемкого переведения пробы в раствор (сплавлением или кислотным разложением) [15-18]. В случае низкого содержания золота в пробах проводят его предварительное концентрирование. Например, ЭТААС определение золота в бедных рудах проводят с предварительным экстракционным концентрированием изоамиловым спиртом, а также метилизобутилкетоном [19].

Нами была исследована возможность прямого определения массовой доли золота в полиметаллической руде с использованием техники дозирования суспензии и химического модификатора. В качестве химических модификаторов суспензий исследовали нитрат никеля, разрыхляющие и сульфидирующие добавки – хлорид аммония, диэтилдитиокарбамат натрия, серу, палладийуглеродный модификатор Pd-АУ-$К_{м.н.}$.

Эффективность модификатора оценивали по приросту абсорбционности золота в суспензии руды в присутствии модификатора и без него (отношение A/A_0), а также по величине относительного стандартного отклонения результатов измерения абсорбционности золота S_r. Полученные данные представлены в табл. 3.

Таблица 3

Эффективность химических модификаторов при ЭТААС определении золота
в полиметаллической руде с использованием техники дозирования суспензий (n = 3; P = 0,95);
концентрация суспензии руды – 30 мг/мл; концентрация модификатора – 6 мг/мл

Модификатор	A/A_0	S_r
Без модификатора	–	0,31
Нитрат никеля	1,1	0,37
Диэтилдитиокарбамат натрия	1,0	0,25
Сера	1,0	0,45
Палладийуглеродный модификатор Pd-АУ-$К_{м.н.}$	1,2	0,32

Из полученных данных видно, что синтезированный нами палладийуглеродный модификатор, а также традиционно используемые модификаторы практически не влияют на чувствительность и сходимость ЭТААС определения золота, а в случае серы даже ухудшают сходимость. Это может быть обусловлено вероятным механизмом атомизации золота, который сводится в испарению золота $Au_{тв} \rightarrow Au_{г}$. В полиметаллической руде золото находится в самородном состоянии, не требуется его предварительного восстановления из предатомизационных соединений и модификаторы не эффективны. Дальнейшее определение содержания золота в руде проводили без химического модификатора.

Было установлено, что описанные в литературе температурно-временные программы не подходят для анализа суспензии руды, т.к. по окончании цикла атомизации в печи остается и накапливается сухой остаток, мешающий дальнейшему определению. Предложена оптимальная температурно-временная программа нагрева атомизатора, представленная в табл. 4, которая обеспечивает полное испарение пробы.

Таблица 4

Температурно-временная программа нагрева атомизатора при определении золота в суспензии полиметаллической руды (концентрация суспензии – 30 мг/мл)

Стадия нагрева	Время, с	Температура, °С
Сушка	25	110
Пиролиз	20	плавный подъем до 200
	40	выдержка при 200
	20	плавный подъем до 300
	60	выдержка при 300
	20	плавный подъем до 600
	60	выдержка при 600
Атомизация	7	2500

Используя приведенную выше температурно-временную программу, было проведено ЭТААС определение золота в суспензии полиметаллической руды. Суспензии готовили следующим образом: навеску тщательно гомогенизированной полиметаллической руды массой 0,150 г помещали в градуированную пробирку вместимостью 10 мл, приливали 5 мл дистиллированной воды. Концентрация руды в суспензии составляла 30 мг/мл. Градуировку проводили по методу добавок. С целью проверки правильности полученных результатов параллельно проводили атомно-абсорбционное определение золота после предварительного кислотного вскрытия руды (анализ раствора).

Кислотное вскрытие проводили следующим образом [20, 21]. Навеску полиметаллической руды массой 1 г, взятую с точностью до четвертого знака, помещали в термостойкий стакан, приливали 20 мл царской водки и выпаривали до влажных солей. Процедуру повторяли несколько раз. Далее прибавляли небольшое количество азотной кислоты, растворяли сухой остаток при слабом нагревании и фильтровали содержимое в мерную колбу вместимостью 25 мл через фильтр «красная лента». Фильтр промывали азотной кислотой (1:5). Разбавляли водой до метки и перемешивали. Аликвоту 20 мкл полученного раствора дозировали на графитовую платформу и проводили определение по следующей температурно-временной программе: сушка – 110ºС, 25 с; пиролиз – 610ºС, 45 с; атомизация – 2500ºС, 5 с. В обоих случаях на стадии атомизации отключали поток аргона во внутренней полости графитовой печи. Работу проводили по однолучевой схеме с дейтериевым корректором фона. Полученные результаты представлены в табл. 5.

Таблица 5

ЭТААС определение массовой доли золота в полиметаллической руде ($P = 0,95$; $n = 3$)

Кислотное вскрытие руды, анализ раствора		Прямое дозирование в графитовую печь суспензии полиметаллической руды (30 мг/мл), градуировка методом добавок	
$\overline{C} \pm \delta, \%$	S_r	$\overline{C} \pm \delta, \%$	S_r
$(7,9 \pm 4,2) \cdot 10^{-5}$	0,22	$(8,2 \pm 6,4) \cdot 10^{-5}$	0,31

Проверка результатов двух выборок по F и t-критериям свидетельствуют, что средние значения результатов двух методов принадлежат одной выборке, что подтверждает правильность результатов разработанной нами методики. Видно, что разработанная методика практически не отличается от стандартной методики по сходимости. Предел обнаружения по 3S-критерию составляет $2 \cdot 10^{-5}$%. Время анализа сокращено с 4-5 часов до 15 минут, при этом исключена работа с летучими токсичными кислотами, что соответствует принципам «зеленой химии».

Таким образом, оптимизированы условия прямого электротермического атомно-абсорбционного определения следов металлов в суспензиях растений, полиметаллической руды. Разработаны новые ускоренные методики определения содержания золота в суспензии руды и свинца в суспензиях речных растений с палладийуглеродным химическим модификатором, исследованы метрологические характеристики методик и доказана их правильность сравнением с результатами атомно-абсорбционного метода после кислотного вскрытия проб.

РЕЗЮМЕ

Запропоновано новий паладійвуглецевий модифікатор та оцінено його ефективність при прямому електротермічному атомно-абсорбційному визначенні вмісту свинцю в суспензії рослинних матеріалів та золота в суспензії поліметалічної руди.

Ключові слова: електротермічна атомно-абсорбційна спектроскопія, свинець, кадмій, золото, паладійвуглецевий модифікатор.

SUMMARY

A new palladium-carbon modifier was proposed and its effectiveness was estimated while direct electrothermal atomic absorption determination of lead content in plant material slurry and gold in polymettalic ore slurry.

Keywords: electrothermal atomic absorption spectroscopy, lead, cadmium, gold, palladium-carbon modifier.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Темердашев З.А. Атомно-абсорбционное определение легколетучих и гидридообразующих элементов / З.А. Темердашев, М.Ю. Бурылин. – Краснодар: Типография «Артт-Офис», 2007. – 217 с.
2. Концентрирование сурьмы и мышьяка на хелатообразующем сорбенте ПОЛИОРГС IX с целью атомно-абсорбционного определения / О.Г. Касимова, Н.И. Щербинина, Э.М. Седых [и др.] // Журн. аналит. химии. – 1984. – Т. 39, № 10. – С. 1823-1827.
3. Орешкин В.Н. Сорбционно-атомно-абсорбционное определение следов элементов в природных водах с одновременной атомизацией твердого концентрата и взвеси / В.Н. Орешкин, Г.И. Цизин // Журн. аналит. химии. – 2001. – Т. 56, № 11 – С. 1153-1157.
4. Электротермическое атомно-абсорбционное определение мышьяка после автоклавной пробоподготовки / В.А. Орлова, Э.М. Седых, В.В. Смирнов [и др.] // Журн. аналит. химии. – 1990. – Т. 45, № 5. – С. 933-941.
5. Бурылин М.Ю. Определение мышьяка методом электротермической атомно-абсорбционной спектрометрии после концентрирования арсина на сорбентах, содержащих палладий / М.Ю. Бурылин, З.А. Темердашев, В.П. Полищученко // Журн. аналит. химии. – 2002. – Т. 57, № 7. – С. 715-720.
6. Бурылин М.Ю. Концентрирование арсина на палладийсодержащих сорбентах для аналитических целей / М.Ю. Бурылин, З.А. Темердашев, В.П. Полищученко // Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. – 2001. – № 4. – С. 6-9.
7. Бурылин М.Ю. Электротермическое атомно-абсорбционное спектрометрическое определение мышьяка с дозированием в графитовую печь водных суспензий палладийсодержащих сорбентов / М.Ю. Бурылин, З.А. Темердашев, В.П. Полищученко // Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. – 2001. – № 4. – С. 10-13.
8. Бурылин М.Ю. Атомно-абсорбционное определение свинца и кадмия методом дозирования суспензий карбонизованных образцов с применением Pd-содержащего активированного угля в качестве модификатора / М.Ю. Бурылин, З.А. Темердашев, С.Ю. Бурылин // Журнал аналитической химии. – 2006. – Т. 61, № 1. – С. 42-49.
9. Получение активированных углей при термолизе бурого угля, активированного гидроксидом натрия или калия / Ю.В. Тамаркина, Л.А. Маслова, Т.В. Хабарова [и др.] // Вопросы химии и хим. технологии. – 2007. – № 5. – С. 193-197.
10. Адсорбенты из углей и углеродсодержащих отходов / Т.Г. Шендрик, Ю.В. Тамаркина, Т.В. Хабарова [и др.] // Экологическая безопасность: проблемы и пути решения: IV междунар. науч.-практ. конф. : сб. науч. ст. В 2-х т. – Т.2 / УкрНДИЕП. – Х., 2008. – С. 428-433.
11. Адсорбционные свойства углеродных материалов, полученных термолизом бурого угля в присутствии гидроксидов щелочных металлов / Ю.В. Тамаркина, Л.А. Маслова, Т.В. Хабарова [и др.] // Журн. прикл. химии. – 2008. – Т. 81, № 7. – С. 1088-1091.
12. Баранова В.И. Практикум по коллоидной химии / В.И. Баранова, Н.М. Бибик, Н.М. Кожевникова; под ред. И.С. Лаврова. – М.: Высш. шк., 1983. – 216 с.
13. Модифицирование концентратов в комбинированных и гибридных атомных и молекулярных абсорбционных методах анализа: монографія / А.С. Алемасова, Т.Н. Симонова, А.Н. Рокун, и др. – Донецк: Вебер, 2009. – 181 с.
14. Сырье и продукты пищевые. Подготовка проб. Минерализация для определения содержания токсичных элементов: ГОСТ 26929-94. – М.: Изд-во стандартов, 2002. – 12 с. – (Межгосударственный стандарт).
15. Юделевич И.Г. Атомно-абсорбционное определение благородных металлов / И.Г. Юделевич, Е.А. Старцева. – Новосибирск: Наука, 1981. – 158 с.
16. Бусев И.А. Аналитическая химия золота / И.А. Бусев, В.М. Иванов. – М.: Наука, 1973. – 262 с.
17. Groenevald T. Determination of gold in ores by atomic absorption spectrometry / T. Groenevald // Anal. Chem. – 1969. – Vol. 41. – P. 1012-1016.
18. Assarsson G.O. Determination of gold in ore by flame atomic absorption spectrometry / G.O. Assarsson, K. Petersen, A.M. Asklund // Z. anal. chem. – 1960. – Vol. 174. – P. 194-199.
19. Law S.L. Comparison between isobutyl methyl ketone and diisobutyl ketone for the solvent extraction of gold and its determination in geological materials using atomic absorption spectrometry / S.L. Law., T.E. Green // Anal. Chem. – 1969. – Vol. 41 – P. 1008-1013.
20. Лом и отходы драгоценных металлов и сплавов. Методы определения золота: ДСТУ 2829.1-94. – Киев: Госстандарт Украины, 1996. – 231 с. – (Национальный стандарт Украины).
21. Самчук А.И. Аналитическая химия минералов / А.И. Самчук, А.Т. Пилипенко. – Киев: Наукова думка, 1982. – 200 с.

Поступила в редакцию 08.11.2011 г.

УДК 541.123.2

СИЛИКАТ ЛАНТАНА И ЕВРОПИЯ СО СТРУКТУРОЙ АПАТИТА

Е. И. Гетьман, Е. В. Борисова, С. Н. Лобода, А. В. Игнатов, Ю. В. Канюка

Твердофазным методом был синтезирован силикат лантана и европия со структурой апатита состава $La_3Eu_6(SiO_4)_6O(OH)$. Двойной силикат лантана и европия был изучен методом рентгенофазового и рентгеноструктурного (алгоритм Ритвельда) анализа, электронной микроскопии, инфракрасной спектроскопии.

Ключевые слова: структура апатита, силикат лантана и европия, алгоритм Ритвельда.

Введение. Соединения со структурой апатита могут применяться в качестве биоматериалов [1, 2], люминофоров и лазерных материалов [3, 4], матриц для поглощения актиноидов [5] и во многих других случаях. В последние годы внимание исследователей привлекают силикаты редкоземельных элементов с такой структурой, как перспективные материалы для топливных элементов, которые являются высокоэффективными и экологически чистыми источниками электрической энергии [6]. Твердые электролиты на их основе обладают анионной проводимостью по кислороду, который обеспечивается перемещением анионов кислорода по каналам структуры апатита. Основное внимание уделяется соединениям состава $Ln_x(SiO_4)_6O_{(1,5x-12)}$, модифицированным атомами Al, Fe [7].

В то же время, вследствие близости радиусов и сходства электронного строения атомов редкоземельных элементов, можно ожидать существования соединений или твердых растворов, содержащих в своем составе, по крайней мере, два редкоземельных элемента, что может существенно расширить круг этих перспективных материалов. Поэтому целью настоящей работы стало получение двойного силиката лантана и европия со структурой апатита.

Методика эксперимента. В качестве исходных реагентов для синтеза использовали: La_2O_3 – ЛаО-СС, Eu_2O_3 – Ев-ИС5-17, SiO_2 – «о.с.ч.». Взвешивание образцов проводили на электронных весах с точностью до 0,0002 г.

Навеску шихты гомогенизировали в агатовой ступке в течение 30 минут, затем прокаливали в алундовых тиглях при 800 °С (16 ч), 1100 °С (120 ч) и 1200 °С (27 ч) до постоянного фазового состава с промежуточными перетираниями спека.

Рентгенофазовый анализ проводили на модернизированном дифрактометре ДРОН–3 (CuK_α-излучение, Ni-фильтр) с электронным управлением и обработкой результатов. Скорость вращения счетчика при обзорной съемке для определения фазового состава образцов составляла 1-2 °/мин. Для уточнения кристаллической структуры методом Ритвельда использовался массив данных, полученный из порошковой рентгенограммы снятой в интервале углов от 15 до 140 ° (2θ). Шаг сканирования и время экспозиции в каждой точке составляли соответственно 0,05 ° и 3 секунды. Уточнение проводили с использованием программы FULLPROF.2k (версия 3.40) с графическим интерфейсом WinPLOTR.

Полуколичественный элементный анализ проводили на растровом электронном микроскопе JSM-6490LV (JEOL, Япония) с применением рентгеновского энергодисперсионного спектрометра INCA Penta FETx3 (OXFORD Instruments, Англия). Различие в величинах экспериментального и теоретического содержания элементов не превышало 1,28 %, что допустимо для этого метода анализа в подобных системах, например, в работе [8].

ИК спектры в интервале 4000-400 см$^{-1}$ получали на таблетках на Фурье-спектрометре Spectrum BX фирмы «Perkin-Elmer». Исследование порошков проводили в матрице из KBr (3 и 300 мг соответственно).

Результаты и их обсуждение. Так как силикаты лантана со структурой апатита в настоящее время в наибольшей степени изучены, лантан и был избран в качестве одного из редкоземельных элементов. Кроме того, его оксид обычно при хранении на воздухе переходит в гидроксид, твердофазная реакция с которым происходит более интенсивно, чем с оксидом. Европий достаточно удален в периодической системе от лантана. Поэтому выбор его обусловлен с одной стороны возможностью идентифицировать его рентгенографически от лантана, с другой стороны различие их ионных радиусов еще недостаточно велико, чтобы препятствовать изоморфному замещению.

По данным рентгенофазового анализа при 1100 °С в образцах преобладает фаза со структурой апатита, но даже увеличение времени прокаливания до 120 ч не приводит к получению однофазного образца – на рентгенограммах присутствуют линии $La_2Si_2O_7$. И только после прокаливания при 1200 °С линии примесей не обнаруживаются.

Полуколичественный химический анализ на электронном микроскопе проводился на 7 шлифах (табл. 1).

Таблица 1

Результаты элементного анализа (%масс)

Элемент	La	Eu	Si	O
найдено	22,16	46,36	9,09	20,50
вычислено	21,78	47,64	8,81	21,72

Как видно из приведенных данных, имеется удовлетворительное соответствие экспериментальных и вычисленных величин. Из результатов химического анализа с учетом баланса зарядов следует, что в структуре апатита имеются вакансии и формулу соединения можно представить $La_3Eu_6\ (SiO_4)_6O_{1,5}$, либо $La_3Eu_6\ (SiO_4)_6O(OH)$.

Уточнение кристаллической структуры проводилось с использованием в качестве исходной модели данных для структуры гидроксиапатита кальция [9]. Координаты атомов, изотропные тепловые параметры атомов (B_{iso}) и заполнение позиций (G) для $La_3Eu_6(SiO_4)_6O_{1,5}$ (пространственная группа $P6_3/m$) приведены в табл. 2. Факторы достоверности: $R_P = 5,19$; $R_F = 8,69$; $R_{wp} = 6,60$; $\text{Bragg R-factor} = 8,3$; $\chi^2 = 1,09$.

Таблица 2

Координаты, изотропные тепловые параметры атомов (B_{iso}) и заполнение позиций (G)

(***a*** = 9,5312(5), ***c*** = 6,9912(4), Å)

Атом	Позиция	x	y	z	B_{iso}, Å^2	G
La1	4f	2/3	1/3	0,003(2)	0,5(1)	0,97(1)
Eu1	4f	2/3	1/3	0,003(2)	0,5(1)	2,17(1)
La2	6h	0,231(5)	0,9887(7)	0,25	0,4(1)	2,03(1)
Eu2	6h	0,231(5)	0,9887(7)	0,25	0,4(1)	3,83(1)
Si	6h	0,404(2)	0,373(3)	0,25	1,3(5)	6
O1	6h	0,317(4)	0,486(4)	0,25	1,4(9)	6
O2	6h	0,592(4)	0,478(4)	0,25	1,6(9)	6
O3	12i	0,340(3)	0,252(3)	0,066(3)	1,6(7)	12
O4	2a	0	0	0,25	0,3(3)	2,1(1)

Как видно из приведенных данных, большая часть атомов европия занимает места в позиции 6h (заселенность составляет 3,83) и примерно вдвое меньше в позиции 4f (2,17). Аналогичным образом распределены и атомы лантана – соответственно 2,03 и 0,97. В позиции 4f имеется вакансия, что согласуется с вышеприведенной формулой. Однако, места кислорода в позиции O4 полностью заняты, поэтому второй вакансии в структуре нет. С учетом этого, количества мест в структуре апатита $A_{10}(BO_4)_6X_2$ и баланса зарядов состав можно представить формулой $La_3Eu_6\ (SiO_4)_6O(OH)$.

Межатомные расстояния в сравнении с расстояниями в изученной ранее структуре [9] соединения $La_{9,67}Si_6O_{26,5}$ представлены в табл. 3.

Как видно из табл. 3, практически во всех случаях, кроме одного, расстояния меньше, чем в силикате лантана, что связано с большим размером лантана, чем европия. И только одно расстояние Si – O(1) больше у силиката лантана и европия. Учитывая, что расстояние Si – O(2) меньше, можно утверждать о некотором искажении тетраэдра SiO_4 при вхождении в структуру апатита двух разных редкоземельных элементов. Возможно, поэтому на инфракрасном спектре обнаруживается несколько больше линий, чем на спектрах силикатов редкоземельных элементов со структурой апатита (табл. 4).

Таблица 3

Некоторые межатомные расстояния (Å)

Состав	$La_3Eu_6(SiO_4)_6O_{1,5}$	$La_{9,67}Si_6O_{26,5}$
Si – O(1)	1,66(6)	1,622(9)
Si – O(2)	1,56(4)	1,632(6)
Si – O(3)x2	1,62(3)	1,631(4)
< Si – O >	1,615(9)	1,629(2)
La,Eu(1) – O(1)x3	2,42(3)	2,485(5)
La,Eu (1) – O(2)x3	2,52(3)	2,546(5)
La,Eu (1) – O(3)x3	2,84(3)	2,856(4)
<La,Eu (1) – O(1,2,3)>	2,593(9)	2,629(2)
La,Eu (2) – O(1)	2,67(4)	2,767(6)
La,Eu (2) – O(2)	2,41(3)	2,521(5)
La,Eu (2) – O(3)x2	2,54(3)	2,608(4)
La,Eu (2) – O(3)x2	2,37(2)	2,473(3)
<La,Eu (2) – O(1,2,3)>	2,48(1)	2,569(3)
La,Eu (2) – O(4)	2,258(6)	2,284(4)
La,Eu (2) – La,Eu (2)	3,912(8)	3,935(4)

Таблица 4

Частоты полос инфракрасных спектров некоторых силикатов лантана (см$^{-1}$)

$La_3Eu_6\ (SiO_4)_6O(OH)$	$La_{9,67}Si_6O_{26,5}$ [9]	$La_{9,67}Si_6O_{26,5}$ [9]	γ
1078, 983, 920	978	900, 930, 975, 1020	γ_3
863	853, 845	850	γ_1
552	523	520	γ_4
498, 442, 416		570-колебание O(4) в плоскости xy	

В области 400-4000 см$^{-1}$, на инфракрасном спектре $La_{9,67}Si_6O_{26,32}$ присутствует всего 4 линии, на спектре Рамана $La_{9,67}Si_6O_{26,5}$ – 7 линий. На инфракрасном спектре $La_3Eu_6(SiO_4)_6O_{1,5}$ – 8 линий. Кроме колебаний, которые по аналогии можно отнести к $\gamma_1 - \gamma_4$, на спектре силиката лантана и европия имеются, возможно, и колебания связи $La(Eu)-O$ при 416 см$^{-1}$, либрационные колебания группы OH, а также ставшие активными в инфракрасной области колебания, возникшие вследствие понижения симметрии иона SiO_4^{4-}, провести отнесение которых с достаточной уверенностью не представляется возможным.

Выводы. Методом рентгенофазового и рентгеноструктурного (метод Ритвельда) анализа, электронной микроскопии, инфракрасной спектроскопии изучен двойной силикат лантана и европия состава $La_3Eu_6\ (SiO_4)_6O(OH)$ со структурой апатита. Однофазный образец получен при температуре 1200^{0}C. Установлено, что лантан и европий занимают места в позициях 4f и 6h в соотношениях примерно отвечающих химическому составу соединения (1:2), а в позиции 4f одно место в катионной подрешетке вакантно. Тетраэдр SiO_4^{4-} несколько искажен по сравнению с силикатом лантана состава $La_{9,67}Si_6O_{26,5}$.

РЕЗЮМЕ

Твердофазним методом був синтезований силікат лантану і європію зі структурою апатиту складу $La_3Eu_6\ (SiO_4)_6O(OH)$. Подвійний силікат лантану і європію був вивчений методом рентгенофазового і рентгеноструктурного (алгоритм Рітвельда) аналізу, електронної мікроскопії, інфрачервоної спектроскопії.

Ключові слова: структура апатиту, силікат лантану і європію, алгоритм Рітвельда.

SUMMARY

The solid-state method had been synthesized silicate of a lanthanum and europium with structure of apatite of structure $La_3Eu_6\ (SiO_4)_6O(OH)$. Double silicate of a lanthanum and europium has been studied by a method X-rays and algorithm of Ritveld the analysis, electronic microscopy, infra-red spectroscopy.

Keywords: structure of apatite, silicate, lanthanum and europium, Rietveld algorithm

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shield effect of silicate on adsorption of proteins onto silicon-doped hydroxyapatite / X. Chen, T. Wu, Q. Wang, J. W. Shen // Biomatirials. – 2008. – Vol. 29, No 15. – P. 2423-2432.
2. Rokita M. Phospho-silicate and silicate layers modified by hydroxyapatite particles / M. Rokita, A. Brożek, M. Handke. // Journal of Molecular Structure. – 2005. – Vol. 744-747. – P. 589-595.
3. Luminescence of Pr^{3+} in minerals / M. Gaft, R. Reisfeld, G. Panczer et al. // Optical Materials. – 1999. – Vol. 13. – P. 71.
4. The photoluminescence and thermoluminescence properties of novel green long-lasting phosphorescence materials $Ca_8Mg(SiO_4)_4Cl_2$:Eu^{2+},Nd^{3+} / J. Wang, M. Zhang, Q. Zhang et al. // Applied Physics B. – 2007. – Vol. 87, No 2. – P. 249-254.
5. Arcos D. Crystal-chemical characteristics of silicon-neodymium substituted hydroxyapatites studied by combined X-ray and Neutron powder diffraction / D. Arcos, J. Rodriguez-Carvajal, M. Vallet-Reg // Chem.Mater. – 2005. – Vol. 17. – P. 57-64.
6. Preparation and Electrical Properties of $Ln_x(SiO_4)_6O_{(1.5x-12)}$ (Ln: Nd, La) with Apatite Structure/ Nakajima Takashi, Nishio Keishi, Ishigaki Tadashi, Tsuchiya Toshio // Journal of Sol-Gel Science and Technology. – 2005. – Vol. 33, No 1. – P. 107-111.
7. Synthesis of nano-crystalline apatite type electrolyte powders for solid oxide fuel cells. / E. Jothinathan, K. Vanmeensel, J. Vleugelsa, O. Van der Biest // Journal of the European Ceramic Society. – 2010. – Vol. 30. – P. 1699-1706.
8. Wilson R. M. Rietveld refinement of the crystallographic structure of human dental enamel apatites / R. M. Wilson, J.C. Elliot, S.E.P. Dowker // American mineralogist.-1999. – Vol. 1, No 84. – P.1406-1414.
9. Local relaxation in lanthanum silicate oxyapatites by Raman scattering and MAS-NMR / S. Guillot, S. Beaudet-Savignat, S. Lambert et al. // Journal of Raman Spectroscopy. – 2011. – Vol. 42. – P. 1455-1461.

Поступила в редакцию 07.07.2011 г.

УДК 532.73+541+541.123+541.8+547.21+547.412.1

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ КОНТИНУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ РАСТВОРА ДЛЯ СИСТЕМЫ НЕЭЛЕКТРОЛИТЫ – Н-ОКТАНОЛ

А. И. Луцык, С. Ю. Суйков, О. В. Суховий
Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАН Украины, г. Донецк

Проведено исследование эффективности континуальной расчетной модели раствора PCM для расчета энергии сольватации в н-октаноле для широкого ряда солютов-неэлектролитов (метан-гексадекан и хлорпроизводные метана). Определены оптимальные расчетные параметры и предложена схема их подбора.

Ключевые слова: энергия сольватации, н-октанол, н-алканы, хлорпроизводные метана, PCM.

Введение. Модель PCM (Polarizable Continuum Model) впервые была опубликована в 1981 году и широко используется в различных приложениях. Это одна из континуальных моделей растора, суть ее в представлении растворителя как непрерывной изотропной среды с постоянной диэлектрической проницаемостью, в которой расположена полость с диэлектрической проницаемостью равной 1 с исследуемой молекулой. Последние фундаментальные обзоры представлены в [1, 2]. Только за последние 2-3 года было опубликовано более 100 работ с ее использованием. PCM применяется к самым различным объектам, зачастую достаточно сложным. Так, при направленном синтезе комплексных соединений в растворе ее используют для оценки влияние растворителя на ход реакции [3 – 5]. Интересно, что в сильно структурированном растворителе – воде - сходимость получается лучше для нейтральных молекул чем для заряженных [6]. Иногда применяют одновременно два метода представления растворителя - континуальный (PCM) и дискретный одновременно[7] или параллельно оба подхода с последующим сравнением результатов [7, 8]. Модель PCM часто используется для «настройки» дискретных моделей растворителя путем сравнения результатов расчета методом PCM с результатами расчета в представлении супермолекулы с заданным числом число молекул растворителя [8]. PCM приемлема не для всех задач. Иногда эффективнее оказываются дискретные модели с небольшим числом молекул растворителя [9].

Крайне редко в литературе встречается применение модели PCM для рядов близких по строению веществ, что не позволяет оценить возможности модели (а также эффективность ее параметризации) в полной мере. Ранее нами было показано [10] что для рядов близких по строению гетероциклических соединений возможна достаточно эффективная параметризация PCM для расчета энергии переноса в системе вода/н-октанол. Однако перенос жидкость-жидкость потенциально может включать компенсационные эффекты, компенсирующие погрешности модельного представления.

В настоящей работе рассмотрены возможности PCM расчета энергии переноса газовая фаза/растворитель (энергия сольватации) для солютов-неэлектролитов, ряда предельных углеводородов, метана и его хлорпроизводных в н-октаноле. В качестве опорного набора были выбраны литературные данные по распределению газ/жидкость для системы воздух/октанол [11].

Основная часть. В работе использовали расчетный пакет GAMESS [12]. Благодаря его доступности и открытости кода, удалось опробовать некоторые редко используемые методики расчета.

Расчеты в GAMESS проводились на четырехпроцессорном сервере с 4 процессорами Pentium pro частотой по 200 МГц, и 1 ГБ оперативной памяти и жесткий диск SCSI. Расчет энергии модельной системы в GAMESS в среднем требует от 30 с до 8 часов процессорного времени. В пакете GAMESS отсутствует описание октанола как растворителя и фактически проведенная работа представляет собой его параметризацию. Начальное приближение основных параметров модели PCM GAMESS, полученное на основе справочных данных [10], выглядит следующим образом: RSOLV (радиус сольвента) = 3,10Å (оценка по [13]); VMOL (молярный обьем) = 158,4 $см^3$/моль; TCE (термический обьемный коэффициент) = $8{,}65 \cdot 10^{-4}$; STEN (поверхностное натяжение) = 27,1дин/см; DSTEN = $2 \cdot 10^{-3}$; EPS (диэлектрическая проницаемость) = 8,5.

Расчет произведен для модели C-PCM или системы с «проводящим растворителем» (значение параметра IEF = -10, по умолчанию), которая обычно применяется для относительно больших молекул. Геометрия оптимизировалась в базисе 6-311G. Расчет был проведен с варьированием радиуса сольвента для предельных углеводородов (метан-гексадекан). Конформационными равновесиями пренебрегали. Считается, что наиболее удобный способ параметризации PCM – подгонка эффективного радиуса сольвента (GAMESS параметр RSOLV). В качестве начального приближения выбран радиус 3,10 Å ([10]).

Подбор проведен исходя из обеспечения как качественного подобия (вид зависимости) так и совпадения значений для максимального числа членов ряда. Полученное оптимальное значение равно 2,83 Å (рис. 1). Оно обеспечивает хорошее качественное совпадение хода зависимости энергии переноса от структуры неэлектролита для углеводородов и количественное для любых 3 членов ряда. Однако для ряда в целом так и не удалось обеспечить количественного совпадения. Невязка для крайних членов достигает

10 kJ/моль. Отдельно было показано, что расчетная зависимость энергии переноса газ/н-октанол от RSOLV в широких пределах есть нелинейной и монотонной, что позволяет считать полученное значение глобальным оптимумом.

Следует отметить, что расчет энергии переноса газ/вода для метана является одним из тестовых примеров в программе GAMESS и обеспечивает для метана существенно более высокую точность. Для ряда «метан и хлорпроизводные метана» использование только варьирования RSOLV не дало желаемого результата (рис. 2) – видно, что только этот параметр в принципе не позволяет получить даже качественного совпадения во всем ряду.

Реализация PCM GAMESS предоставляет еще один способ подгонки – отдельный дисперсионный базис согласно [15]. Интересно, что в рамках примеров, поставляемых с программой, такой базис был использован для получения количественного совпадения энергии переноса метана в воду. В пакете GAMESS и в сопровождающей документации, а также в доступных обменных фондах расчетных базисов отсутствуют значения дисперсионных экспонент для атомов, отличных от приведенных в [15] C, H, O, и N. Из-за несколько отличного расчетного смысла этого дополнительного базиса, непосредственное использование экспонент из молекулярных базисов оказалось нерациональным – результат значительно отклоняется от экспериментальных величин.

При эмпирическом подборе значений оказалось, что изменяя количество экспонент для атома хлора можно получить изменение «наклона» графика. Очевидно, большей эффективности можно достигнуть, совместив две процедуры параметризации. Параметризацию проводили по следующей схеме: подбор числа экспонент для каждого атома и их примерных значений; подбор RSOLV для совпадения расчетного и экспериментального значений метана; изменением значений экспонент для атома хлора (не влияют на результат расчета для метана) получение совпадения для трихлорметана(минимальное значение в ряду).

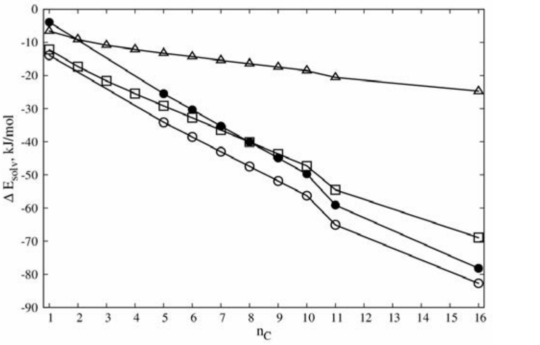


Рис. 1. Зависимость энергии переноса углеводородов в системе газовая фаза/октанол от количества атомов углерода в молекуле: экспериментальные данные (●) [11]; расчетные данные: радиус полости сольвента 3,1 Å (Δ); радиус полости сольвента 2,83 Å(□); радиус полости сольвента 2,7 Å(○)

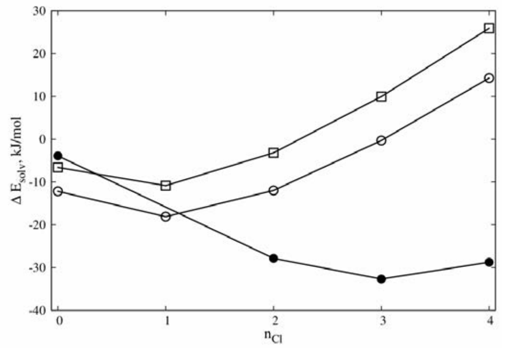


Рис. 2. Зависимость энергии переноса хлорпроизводных метана в системе газовая фаза/октанол от количества атомов углерода в молекуле: экспериментальные данные(● [11], значение для хлористого метила неизвестно, для воды [14] эта величина значительно меньше чем для метана и ближе к значению для хлористого метилена); расчетные данные: радиус полости сольвента 3,1 Å (□); радиус полости сольвента 2,83 Å(Δ)

Таким образом была получена приемлемая сходимость результатов расчета для метана и его хлорпроизводных с экспериментом (рис. 3) при расчете с радиусом сольвента 3,38 Å и дополнительным дисперсионным базисом (табл. 2).

Таблица 2

Значения экспонент дисперсионного базиса

Экспоненты	Значения экспонент
C1	0,001
C2	1,000
H1	1,100
H2	2,100
Cl1	0,190
Cl2	0,700
Cl3	0,190

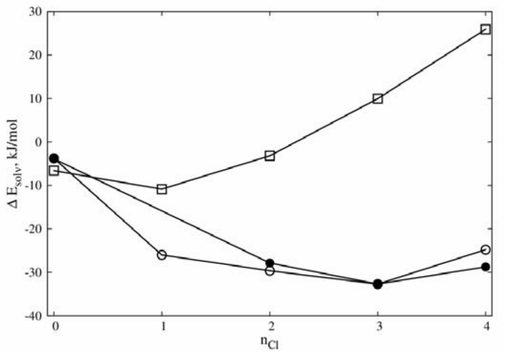


Рис. 3. Зависимость энергии переноса метана и его хлорпроизводных в системе газовая фаза/октанол от количества атомов углерода в молекуле: экспериментальные данные (●) [11]; расчетные данные: без использования дополнительного дисперсионного базиса радиус полости сольвента 3,1 Å (□); с использованием дополнительного дисперсионного базиса радиус полости сольвента 3,38 Å(○).

Стоит отметить техническое ограничение связанное с дисперсионным базисом. На использованной сборке GAMESS с выделением памяти по умолчанию введение дисперсионного базиса ограничило возможности расчета в ряду н-алканов октаном и значительно увеличило необходимое процессорное время. Результаты расчета для н-алканов при этом мало изменились.

Выводы. В работе показано, что с помощью PCM возможно получение качественного совпадения зависимостей структура – свойство для энергии переноса газ/жидкость в рядах неполярных неэлектролитов. Предложена схема параметризации и параметризована модель PCM GAMESS для расчета энергии переноса в рядах предельных углеводородов и метана и его хлорпроизводных в системе газ/октанол. Предложена последовательная процедура подбора расчетных параметров модели PCM.

РЕЗЮМЕ

Проведене дослідження ефективності континуальної розрахункової моделі розчину PCM для розрахунку енергії сольватації в н-октанолі для широкого ряду солютів-неелектролітів (метан-гексадекан та хлорпохідні метану). Визначені оптимальні розрахункові параметри і запропонована схема їх підбору.

Ключові слова: енергія сольватації, н-октанол, н-алкани, хлорпохідні метану, PCM.

SUMMARY

We the GAMESS PCM parametrisation of the transfer energy in the gas/octanol system had been discussed. It was parameterised the PCM model for hydrocarbons (in the set methane-hexadecane) and chlorine derivatives of methane on the experimental data set. It was found the concrete constraints of the existing PCM realizations in relation to the named solvates.

Keywords: solvation energy, n-octanol, n-alkanes, chlorine derivatives of methane, PCM.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Tomasi J. Quantum Mechanical Continuum Solvation Models / J. Tomasi, B. Mennucci, R.Cammi // Chem. Rev. – 2005. – Vol. 105. – P. 2999–3093.
2. Continuum Solvation Models in Chemical Physics: From Theory to Applications / Edited by B. Mennucci and R. Cammi // John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, West Sussex PO19 8SQ, England – 2007. – 619 p.
3. Čorić I. Synthesis and crystal structures of two isomeric nitro–a–resorcylic acids / I. Čorić, D. Milić, D. Matkovic–Čalogović, L. Tomašković // Struct. Chem. – 2009. – Vol. 20, No 1. – P. 73-80.
4. Małecki J. G. Synthesis, characterization, and molecular structure of Ru(II) complex containing 2,5pyridinedicarboxylic acid J. G. Małecki [text] // Struct. Chem. – 2011. – Mode of access: http://www.springerlink.com/content/6472711423641671/fulltext.pdf. – Title from the screen.
5. Małecki J. G. X-ray studies, spectroscopic characterisation and DFT calculations for Mn(II), Ni(II) and Cu(II) complexes with 5,6–diphenyl–3–(2–pyridyl)–1,2,4–triazine / J. G. Małecki, B. Machura, A. Świtlicka // Struct. Chem. – 2011. – Vol. 22, No 1. – P. 77-87.
6. Jackson Ph. Insights into amine–based CO2 capture: an ab initio self–consistent reaction field investigation / Ph. Jackson, A. Beste, M. Attalla // Struct. Chem. – 2011. – Vol. 22, No 3. – P. 537-549.
7. Vergara–Méndez B. Z. Theoretical Study of Peroxo– and Diperoxomolybdate Formation as Catalysts in the Oxidative Desulfurization of Diesel / B. Z. Vergara–Méndez, Á. A. García–Gómez, M Poisot, G. Ramırez–Galicia // Top. Catal. – 2011. – Vol. 54, No 8-9. – P. 527-534.
8. Eilmes A. TDDFT study of absorption spectrum of ketocyanine dye complexes with metal ions: explicit solvent model A. Eilmes // Theor. Chem. Acc. – 2010. – Vol. 127. – P. 743-750.
9. Mujika J. I. Computational evaluation of pKa for oxygenated side chain containing amino acids interacting with Aluminum / J. I. Mujika, J. M. Ugalde, X. Lopez // Theor. Chem. Acc. – 2011. – Vol. 128, No 4-6. – P. 477-484.
10. Оценка возможности прямого моделирования распределения октанол/вода в рамках подхода ab Initio/PCM / Л. А. Плющакова, С. Ю. Суйков, А. И. Луцык, А. Ф. Попов // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Хімія і хімічна технологія. – 2008. – № 137(11). – С. 22-27.
11. Solvation enthalpies of neutral solutes in water and octanol Topological torsion / A. Bidon–Chanal, O. Huertas, M. Orozco, F. J. Luque // Theor. Chem. Acc. – 2009. – Vol. 123. – P.11-20.
12. Gordon M. S. General atomic and molecular electronic structure system [programm]]/ M. S. Gordon, M. W. Schmidt et al. // J. Comput. Chem. – 1993. – Vol. 14, No 11. – P. 1347-1363.
13. Ферцигер Дж. Математическая теория процессов переноса в газах / Дж. Ферцигер, Г. Капер. – М. Мир, 1976. – 555 с.
14. Lutsyk A. A New Set of Gas/Water Partition Coefficients for the Chlormetanes / A. Lutsyk, V. Portnanskij, S. Sujkov, V. Tchuprina // Monatshefte für Chemie – 2005. – Vol. 136, No 7. – P. 1183-1189.
15. Amovilli C. Self-Consistent-Field Calculation of Pauli Repulsion and Dispersion Contributions to the Solvation Free Energy in the Polarizable Continuum Model / C. Amovilli, B. Mennucci // J. Phys. Chem. B. – 1997. – Vol. 101, No 6. – P. 1051–1057.

Поступила в редакцию 27.01.2012 г.

УДК 447.495.9:[544.12:544.18]

СТРУКТУРА ИЗОМЕРНЫХ ФОРМ МЕТАКРИЛОИЛГУАНИДИНА

Ю. В. Момот, А. С. Редчук, Н. А. Сивов***

Полтавский университет экономики и торговли, г. Полтава

***Днепропетровский государственный аграрный университет, г. Днепропетровск*

***Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева РАН, г. Москва*

Методами квантовой химии в рамках теории функционала плотности исследованы структуры изомерных форм метакрилоилгуанидина. Определены структуры переходных состояний для ряда процессов изомеризации. Для изомеров и переходных состояний вычислены значения свободной энергии Гиббса при стандартных условиях. На основании результатов расчета сделаны выводы об относительной термодинамической и кинетической стабильности изомеров.

Ключевые слова: гуанидин, метакрилоилгуанидин, квантовая химия, функционал плотности, изомеры, структура, переходные состояния.

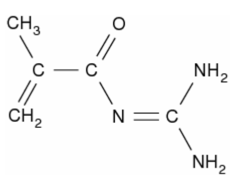
Введение. Исследование структуры и свойств производных гуанидина в последнее время вызывает большой интерес в связи участием гуанидиновых фрагментов в целом ряде биологически важных процессов [1]. С другой стороны, введение остатков гуанидина в мономеры позволяет получить материалы с уникальными свойствами. В связи с этим в лаборатории химии полиэлектролитов и медико-биологических полимеров ИНХС РАН начата разработка нового перспективного направления – синтез гуанидинсодержащих мономеров и (со) полимеров, содержащих ковалентно связанные гуанидиновые группы разного строения [2]. В частности, синтезированы новые мономеры – метакрилоилгуанидин (МГУ) и его соли. Изучение строения этих мономеров и их поведения в различных системах необходимо для правильного выбора полимеризационных систем. Исследование методом ЯМР МГУ и его солей в сравнении с метакрилатгуанидином и рядом производных метакриловой кислоты [3] позволило прийти к выводу о том, что МГУ и его гидрохлорид имеют разное строение гуанидинового элемента структуры.

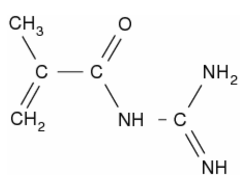
Целью работы является изучение структуры и термодинамических характеристик изомерных форм метакрилоилгуанидина методами квантовой химии, в частности, для выяснения причин таких особенностей. Кроме того, для определения кинетической устойчивости изомеров следует установить структуры переходных состояний и величины свободной энергии активации изомерных превращений.

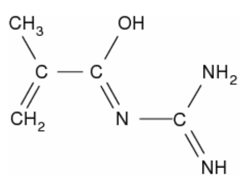
Методы исследования. Расчеты выполнены с помощью пакета программ Firefly [4], который базируется на исходных кодах пакета PC GAMESS [5], в рамках тории функционала плотности (DFT, гибридный функционал B3LYP, базис TZV+3d3p,diffsp,diffs) [6, 7]. Выбранная комбинация функционал/базис обеспечивает достаточную точность расчета свободной энергии изомеров и переходных состояний. Все расчеты выполнены без учета влияния среды. Поиск изомерных форм проводили в три этапа. Прежде всего, с помощью программы Avogadro [8] строили исходные структуры трех основных изомеров и осуществляли поиск конформеров, оптимизируя их структуры включенными в Avogadro методами молекулярной механики. Далее выполняли предварительную оптимизацию структур (DFT с использованием малого базиса TZV+2dp) и, наконец, окончательно оптимизировали структуры с последующим расчетом термодинамических функций для температуры 298,15 К . Критерием достижения равновесной конфигурации служило отсутствие мнимых частот в рассчитанном ИК спектре.

При поиске переходных состояний для найденных ранее структур изомеров выполняли сканирование поверхности потенциальной энергии по внутренним координатам, изменение которых приводит к изомеризации. Структуру, соответствующую максимуму на кривой сканирования, выбирали в качестве исходной для последующей оптимизации. Критерием достижения седловой точки было наличие одной мнимой частоты в рассчитанном ИК спектре. Полученные переходные состояния проверяли на соответствие исходному и конечному изомерам при помощи построения внутренней координаты реакции (IRC). Для визуализации результатов расчета использовались программы Chemcraft [9] и Avogadro.

Результаты и их обсуждение. Исходя из общих соображений, метакрилоилгуанидин (МГУ) может существовать в виде трех изомерных форм (A – C), различающихся конфигурацией системы двойных связей и переходы между которыми можно рассматривать как результаты миграции атома водорода:


(A)


(B)


(C)

Для каждого из этих изомеров существует несколько различных по энергии структур. Преимущественно эти структуры могут рассматриваться как конформеры (чаще всего стабилизированные за счет сопряжения и X···H–Y контактов), а в случаях (B) и (C) следует учесть и возможность Z,E-изомеризации.

Найденные устойчивые формы МГУ приведены на рис. 1. Величины свободной энергии Гиббса и некоторые геометрические параметры представлены в табл. 1.

Выбор двугранных углов, представленных в этой таблице, определялся тем, что каждый из них характеризует определенную систему сопряженных π-связей. Одна из них – гуанидиновый фрагмент (угол N1C4N2N3), вторая – изоаллильный фрагмент, сопряженный с карбонильным кислородом (изомеры A и B, угол C1C2C3O1) или со связью C= N (изомер C, угол C1C2C3N1). Взаимная ориентация этих фрагментов и, соответственно, степень объединения их в единую сопряженную систему может быть охарактеризована углами O1C3N1C4 или C3N1C4N2 .

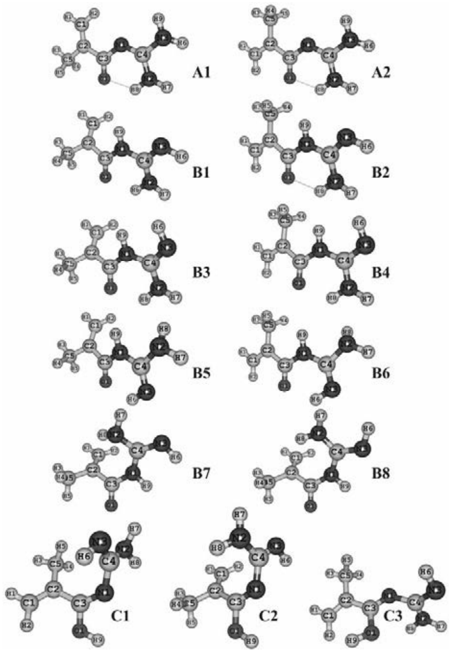


Рис. 1

Представленные в табл. 1 и на рис. 1 данные указывают на то, что найденные равновесные структуры для наиболее термодинамически стабильных изомеров A и B1-B6 являются практически плоскими. Для гуанидинового фрагмента изомеров A и B отклонение от плоскости не превышает 4°, для в целом неплоских изомеров C – 6,5°. Что же касается всей π-системы, то она практически плоская в обоих вариантах изомера A и в случае транс-конформации системы C=C–C=O в изомере B. Цис-конформации этой системы в изомере B имеют отклонение от плоскости около 35° вследствие взаимодействия атомов водорода H2 и H9 (рис.1). Такое отклонение приводит к образованию двух зеркально симметричных в отношении этого фрагмента структур. Следует отметить также существование явно неплоских форм изомеров B (B7 и B8) и C (C1, C2 и C3), в которых отсутствуют сопряжение изоаллильной группы с остальной частью π-системы и водородные связи.

Таблица 1

Энергии Гиббса и некоторые геометрические характеристики изомеров метакрилоилгуанидина

Изомер	ΔG° (кДж/моль)	Двугранные углы (°)			Параметры контактов O···H–N	
		C1C2C3O1	N1C4N2N3	O1C3N1C4	$r_{O\cdots H}$ (Å)	∠ O···H–N (°)
A1	0,00	-0,3	-179,5	-1,5	1,92	125,7
A2	2,62	179,5	-179,7	-1,7	1,91	125,9
B1	17,64	±144,9	176,8	1,9	2,00	128,8
B2	20,46	-179,4	177,1	-2,1	1,98	128,9
B3	26,74	±143,1	177,0	3,2	2,03	127,3
B4	30,42	1,3	177,3	-0,5	2,00	127,5
B5	34,06	±144,4	177,9	-0,7	2,14	129,2
B6	37,91	0,1	177,7	-3,7	2,14	128,5
B7	58,66	-126,9	176,3	-141,5	–	–
B8	59,63	-130,1	-178,1	-144,7	–	–
		C1C2C3N1	N1C4N2N3	C3N1C4N2		
C1	92,69	-143,4	-177,5	-113,7	–	–
C2	96,05	45,4	173,5	83,2	–	–
C3	97,01	157,3	174,1	87,3	–	–

Для изомера A было найдено всего две стабильные конформации, соответствующие цис- и транс-формам фрагмента C=C–C=O. Z,E-изомеризация относительно связи C3=N1 невозможна вследствие сильного взаимодействия аминогруппы и метиленовой группы для альтернативной формы.

Структуры изомера B гораздо более разнообразны. Большинство из них, как и структуры изомера A, стабилизируются не только π-сопряжением, но и взаимодействиями O···H–N. В случаях, когда N – аминный азот, расстояние O···H меньше и составляет около 2 Å, хотя угол O···H–N и несколько маловат для образования прочных водородных связей. В случае иминного азота расстояние O···H становится существенно больше.

Неплоские формы изомера B интересны в том плане, что они могут рассматриваться как интермедиаты в процессах циклизации МГУ. Нами были найдены две таких структуры (B7 и B8), различающиеся ориентацией атома водорода иминной группы. Обе молекулы имеют отчетливо асимметричную структуру и, следовательно, могут существовать в зеркально-симметричных вариантах. В обеих молекулах полностью отсутствуют контакты O···H–N, а карбонильная группа выведена из π-сопряжения как с изоаллильной группой, так и с гуанидиновым фрагментом. Обращает на себя внимание достаточно малое расстояние между одним из атомов водорода аминогруппы и атомом углерода C2 – около 2,4 Å. Для изомера A подобные структуры обнаружить не удалось.

Для изомеров C исследованы три конформации, из них две напоминают изомеры B7 и B8. Во всех трех найденных нами формах изомера C3 отсутствуют заметные взаимодействия O···H–N и O–H···N. При сближении атома водорода гидроксогруппы с атомом азота иминной группы происходит его переход к азоту, то есть изомер C превращается в изомер A, причем заметного барьера на пути такого превращения обнаружить не удалось.

В заключение описания структуры исследованнных изомеров следует упомянуть, что аминогруппы гуанидинового фрагмента слегка неплоские, причем группа, связанная водородной связью, как правило, несколько более плоская. Двугранные углы CNHH аминогрупп изомеров A и B1 – B4 близки к 145°. Для изомеров B7, B8 и C они уменьшаются примерно до 135°, но наименее плоскими являются аминогруппы изомеров B5 и B6, с углом CNHH равным 126°.

Сравнение величин свободной энергии Гиббса для исследованных нами изомеров прежде всего показывает, что стабильность изомеров убывает в ряду A – B – C. Если энергии изомеров A1 и A2 сравнимы и в равновесной смеси при стандартной температуре они должны присутствовать в соотношении примерно 3:1, то уже для B1 и B2 фактор Больцмана составляет примерно 0,0008 и 0,0003 соответственно, то есть, в условиях равновесия эти формы (не говоря уж об остальных) присутствуют в смеси в крайне ограниченных количествах. Тем не менее, под термодинамический критерий таутомерии ($\Delta G^{\circ} \leq 32$ кДж/моль) [10] изомеры B1 – B4 попадают.

Для оценки кинетической устойчивости найденных изомеров МГУ нами были исследованы переходные состояния для ряда взаимопревращений. Структуры переходных состояний процессов изомеризации метакрилоилгуанидина представлены на рис. 2. Свободные энергии активации приведены в табл. 2.

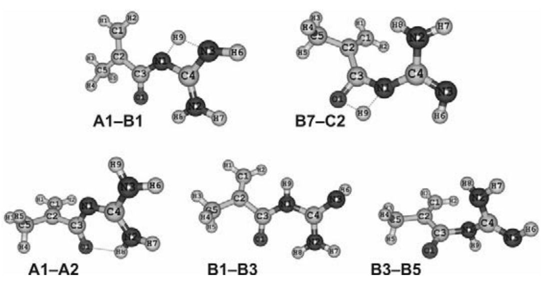


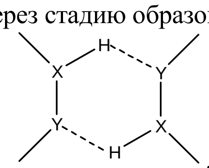
Рис. 2

Таблица 2

Энергии Гиббса активации процессов изомеризации метакрилоилгуанидина
(кДж/моль, относительно структуры с более низкой энергией)

Структуры	$\Delta G^{\neq}$	Характер процесса	Структуры	$\Delta G^{\neq}$	Характер процесса
A1↔B1	199,2	Миграция протона	A1↔A2	21,9	Конформационные переходы
B7↔C2	212,9		B1↔B2	14,5	
B1↔B3	96,7	Z,E-изомеризация	B3↔B4	14,2	
B2↔B4	96,7		B5↔B6	14,4	
B1↔B7	66,6	Конформационные переходы	B1↔B1'	7,3	
B3↔B5	20,7		B3↔B3'	8,1	
B4↔B6	20,4		B5↔B5'	7,4	

Первые два переходных состояния и на рис. 2, и в табл. 2 соответствуют процессам внутримолекулярной миграции протона. Их энергии достаточно велики для того, чтобы утверждать о невозможности внутримолекулярной миграции протона в этих случаях, что, впрочем, не исключает взаимопревращения по бимолекулярным механизмам, например, через стадию образования бидентантного комплекса



,

или через стадии протонирования – депротонирования в присутствии кислот. Последний вариант по нашему мнению предпочтительней, в связи с достаточно высокой основностью атомов азота гуанидинового фрагмента: рассчитанные заряды на атомах азота (по Малликену) составляют около -0,5 для групп $-NH_2$ в изомерах A и B, примерно -1,1 для азота N1 в изомере A и -0,8 для азота N3 в изомере B.

Достаточно высоки и барьеры Z,E-изомеризации, лишь конформационные переходы имеют энергии активации, делающие эти процессы принципиально возможными при температурах, близких к стандартной. Z,E-изомеризация (B1↔B3 и B2↔B4) происходит с выходом атома водорода из плоскости гуанидинового фрагмента (см. рис. 2), что требует значительных энергетических затрат с учетом высокой степени делокализации π-электронов в этом фрагменте.

Конформационные переходы, соответствующие вращению изоаллильного фрагмента, имеют небольшие энергии активации, и при стандартных условиях следует ожидать достаточно быстрого установления равновесия. Барьер для такого перехода в изомере A выше соответствующих барьеров в изомерах B примерно в полтора раза, что естественно если учесть бóльшую степень сопряжения связей в A. Также незначительных энергетических затрат требуют превращения с поворотом гуанидинового фрагмента вокруг связи N1C4 (B3↔B5 и B4↔B6), что говорит о довольно невысокой энергии H-связывания через карбонильный кислород.

Что касается изомеров B7 и B8, то следует отметить, что они не только термодинамически нестабильны, но и имеют относительно низкую кинетическую устойчивость. Так, вследствие разницы в энергиях исходной и конечной форм, энергии активации для перехода B7 → B1 равна всего 25,6 кДж/моль.

Переходы между двумя зеркально-симметричными формами изомеров B1, B3 и B5 характеризуются достаточно низкими активационными барьерами и, следовательно эти формы должны присутствовать в смесях в равных концентрациях.

Выводы. Выполненные расчеты в достаточной степени характеризуют структуры 13 изомерных форм МГУ и 14 переходных состояний. Несмотря на то, что в расчетах не учитывалось влияние среды, в целом полученные результаты создают достаточно полную картину процессов изомеризации исследуемой молекулы. При рассмотрении механизмов реакций с участием МГУ по-видимому имеет смысл принимать во внимание лишь наиболее устойчивые изомерные структуры – A, в меньшей степени B1– B6 и лишь в крайних случаях B7 и B8. Изомеры A1 и A2 должны присутствовать в равновесных смесях в соотношении примерно 3:1. Что касается изомеров B1 – B6, то, в случае образования в смесях при синтезе в апротонных условиях, их концентрация может оставаться достаточно высокой вследствие высокой кинетической устойчивости.

РЕЗЮМЕ

Методами квантової хімії в рамках теорії функціонала густини (DFT) досліджені структури ізомерних форм метакрілоілгуанідину. Визначено структури перехідних станів для ряду процесів ізомеризації. Для ізомерів і перехідних станів обчислені значення вільної енергії Гіббса за стандартних умов. На підставі результатів розрахунку зроблені висновки про відносну термодинамічну і кінетичну стабільність ізомерів.

Ключові слова: гуанідин, метакрілоілгуанідин, квантова хімія, функціонал густини, ізомери, структура, перехідні стани.

SUMMARY

The structure of isomeric forms of methacryloylguanidine has been studied by the use of quantum chemistry methods (DFT). The structure of the transition states for a number of isomerization processes was investigated. The values of Gibbs free energy under standard conditions for isomers and transition states have been calculated. The results of calculations allow drawing the conclusions about the relative thermodynamic and kinetic stability of the isomers.

Keywords: guanidine, methacryloylguanidine, quantum chemistry, DFT, isomers, structure, transition states.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schug K.A. Noncovalent Binding between Guanidinium and Anionic Groups: Focus on Biological- and Synthetic-Based Arginine/Guanidinium Interactions with Phosph[on]ate and Sulf[on]ate Residues / K.A. Schug, W. Lindner// Chem. Rev. – 2005. – Vol. 105. – P. 67-113.
2. Сивов Н.А. Новые гуанидинсодержащие мономеры и полимеры винильной природы: синтез и свойства / Н.А.Сивов // Новые полимерные композиционные материалы. – Нальчик, 2010. – С. 382-386.
3. Исследование особенностей строения гуанидинсодержащих мономеров методом ЯМР-спектроскопии / А.А. Жанситов, Н.А. Сивов, А.И. Мартыненко и др. // Новые полимерные композиционные материалы. – Нальчик, 2010. – С. 158-163.
4. GranovskyA. A. Firefly version 7.1.G / A. A. Granovsky. – www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
5. General Atomic and Molecular Electronic Structure System / M.W.Schmidt, K.K.Baldridge, J.A.Boatz et al. // J. Comput.Chem. – 1993. – Vol. 14. – P. 1347-1363.
6. *Ab Initio* Calculation of Vibrational Absorption and Circular Dichroism Spectra Using Density Functional Force Fields / P. J. Stephens; F. J. Devlin, C. F. Chabalowski, M. J. Frisch // J. Phys. Chem. – 1994. – Vol. 98. – P. 11623-11627.
7. Dunning T.H. Gaussian basis functions for use in molecular calculations. III. Contraction of (10s6p) atomic basis sets for the first-row atoms / T.H. Dunning // J. Chem. Phys. – 1971. –Vol. 55. – P. 716-723.
8. http://avogadro.openmolecules.net
9. http://www.chemcraftprog.com
10. Минкин В.И. Молекулярный дизайн таутомерных систем / В.И. Минкин, Л.П. Олехнович, Ю.А. Жданов. – Ростов н/Д.: Изд-во Ростовского университета. – 1977. – 272 с.

Поступила в редакцию 15.01.2012 г.

УДК 546.786:544.342

ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСЛОВИЙ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕКАВОЛЬФРАМАТ-АНИОНОВ В ВОДНО-ДИМЕТИЛФОРМАМИДНОЙ СРЕДЕ

Е. Ю. Пойманова, Г. М. Розанцев, Е. Е. Белоусова

Методами pH-потенциометрического титрования и математического моделирования исследовано взаимодействие в водном и водно-диметилформамидном подкисленных растворах Натрия вольфрамата при $C_W = 1\cdot10^{-2}$ моль/л. Подобраны модели равновесных процессов образования частиц, которые адекватно описывают экспериментальные зависимости pH = f(Z). Рассчитаны концентрационные константы образования вольфрамсодержащих форм в водном и водно-диметилформамидном растворе. Проведен сравнительный анализ состояния ионов вольфрама (VI) в водном растворе с состоянием в водно-диметилформамидном растворе. Синтезирован декавольфрамат тетрабутиламмония. Методом ИК-спектроскопии в составе солей идентифицирован декавольфрамат-анион.

Ключевые слова: pH-потенциометрия, моделирование, равновесие, водно-диметилформамидная среда, декавольфрамат-анион.

Введение. Большинство работ в области изополивольфрамат-анионов (ИПВА) посвящено изучению их состояния в водных растворах. В зависимости от pH, концентрации W(VI) и температуры раствора такие исследования однозначно показали наличие в водном растворе пара- и метавольфрамат-анионов, что позволило на их основе синтезировать ряд солей с двухзарядными катионами. Равновесия изополивольфраматов в неводных средах до настоящего времени изучены мало, однако известно, что в водно-органических системах присутствуют анионы $[W_6O_{19}]^{2-}$, $[W_{10}O_{32}]^{4-}$, для которых были выделены соли [1 – 4]. Следует отметить, что получение декавольфраматов возможно как из водного раствора [5, 6], так и из водно-органической среды - вода/ацетонитрил [7], вода/диметилформамид [4, 7 – 9]. В работе [10] подчеркивалось, что декавольфрамат-анион $[W_{10}O_{32}]^{4-}$ является неограниченно стабильным в неводных растворах. Несмотря на ограниченные число данных о синтезе и свойствах, кристаллосольваты декавольфраматов, полученные из водно-органической среды, нашли практическое применение в фотокатализе реакций окисления органических соединений [11 – 14]. В связи с изложенным выше, в настоящей работе изучено состояние ионов вольфрама в водно-диметилформамидной среде с целью определения влияния присутствия органического растворителя на образование различных форм ИПВА, в частности, декавольфрамат-аниона.

Экспериментальная часть. При проведении исследований были использованы водные растворы, приготовленные из $Na_2WO_4\cdot2H_2O$ (ч.д.а.) и HCl (х.ч.) в дистиллированной воде, и органический растворитель диметилформамид (ч.д.а.). Постоянная ионная сила I(NaCl) =0.3 моль/л создавалась введением раствора NaCl (х.ч.). Установление точных концентраций растворов проводилось по описанным в литературе методикам: вольфрамат натрия – гравиметрически, гравиметрическая форма WO_3 ($\sigma = \pm0.5$ %) [15]; соляной кислоты – кислотно-основным титрованием точной навески тетрабората натрия $Na_2B_4O_7\cdot10H_2O$ (индикатор метиловый красный) ($\sigma = \pm0.5$ %) [16].

Изучение взаимодействий в водном растворе $WO_4^{2-} – H^+ – H_2O$ при $C_W = 1\cdot10^{-2}$ моль/л проводили pH-потенциометрическим титрованием в интервале кислотности $Z = m/n = \nu(H^+)/\nu(WO_4^{2-})$. Значения pH (погрешность 0.04 ед.pH) измеряли на иономере "И-160" в термостатированных при 298.15 ± 0.1K растворах с шагом титрования $\Delta Z = 0.02$. Индикаторным электродом служил селективный по отношению к ионам водорода стеклянный электрод марки "ЭСЛ 63-07Ср"; вспомогательным – хлоридсеребряный электрод марки "ЭВЛ–1М3"; контроль температуры осуществляли погружным термокомпенсатором ТКА-7.1. Калибровку электродов проводили буферными растворами в широком интервале pH.

Значения pH в системах с соответствующим содержанием диметилформамида (ДМФ) были получены исходя из измеренных значений $pH_{в\text{-}д}$ с учетом поправки Δ, согласно уравнению [17]:

$$pH = pH_{в-д} - \Delta \qquad (1)$$

Поправки при расчете pH водно-диметилформамидных растворов в зависимости от содержания ДМФ равны соответственно: 0.02 (10%), 0.12 (20%), 0.22 (30%), 0,32 (40%), 0,42 (50%) [17]. Полученные при титровании зависимости pH = f(Z) использовали для проведения моделирования взаимодействий в растворах.

Для построения модели равновесных химических процессов в системе $WO_4^{2-} – H^+ – H_2O$ – ДМФ ($C_W = 1.0\cdot10^{-2}$ моль/л) последовательным поиском адекватных моделей в форме закона действия масс и уравнений материального баланса использован метод Ньютона (quasi-Newton), реализованный в программе CLINP 2.1 [18]. Для математического воспроизведения экспериментальных данных (зависимости pH = f(Z)) формировали модель из наиболее вероятных реакций образования ИПВА на основе теоретических данных, что является эффективным способом ускорения сходимости результатов расчета и эксперимента. Далее проводили последовательную выбраковочную оптимизацию модели путем включения в ее состав реакций образования только тех комплексов, которые улучшали статистические характеристики модели (χ^2-критерий, критериальная функция $U = \sum_{k=1}^{N} w_k \Delta_k^2$ (w_k – статистический вес, $\Delta_k = [H^+]^{(рас)} - [H^+]^{(экс)}$), математическое ожидание, сумма квадратов отклонений между рассчитанными и экспериментальными значениями Рн $Q = \sum_{k=1}^{N} \left(\Delta pH_k\right)^2 = \sum_{k=1}^{N} \left(\Delta pH_k^{(рас)} \text{-} pH_k^{(экс)}\right)^2$ для числа *N* точек кривой титрования pH = f(Z)) по сравнению с полученными на предшествующих этапах моделирования. При таком подходе получали модели, учитывающие все наиболее весомые частицы. В ходе математического моделирования с доверительной вероятностью 95 % были рассчитаны концентрационные константы равновесия образования K_C ИПВА, которые были включены в химическую модель:

$$nWO_4^{2-} + mH^+ \rightleftarrows \left[H_{m-2k}W_nO_{4n-k}\right]^{(2n-m)-} + kH_2O,$$

$$K_C = \left[\left[H_{m-2k}W_nO_{4n-k}\right]^{(2n-m)-}\right] / \left[WO_4^{2-}\right]^n \cdot [H^+]^m \qquad (2)$$

Обсуждение результатов. Для получения информации о частицах, которые присутствуют в водно-диметилформамидном растворе Na_2WO_4 при разной кислотности $Z = m/n = \nu(H^+)/\nu(WO_4^{2-})$ и в зависимости от содержания диметилформамида, с помощью pH-потенциометрического титрования были получены зависимости pH = f(Z) при 298.15 ± 0.1 К (рис. 1). Для этого в растворах Na_2WO_4 с концентрацией $C_W = 0.01$ моль/л с содержанием диметилформамида от 0 об.% до 50 об.% и ионной силой I = 0.30 моль/л создавали необходимую кислотность Z и проводили измерения pH. Зависимости pH от Z в растворах систем Na_2WO_4 – HCl – NaCl (I=0.3 моль/л) – ДМФ – H_2O (ДМФ/H_2O = 0–50 об.%) представлены на рис. 1.

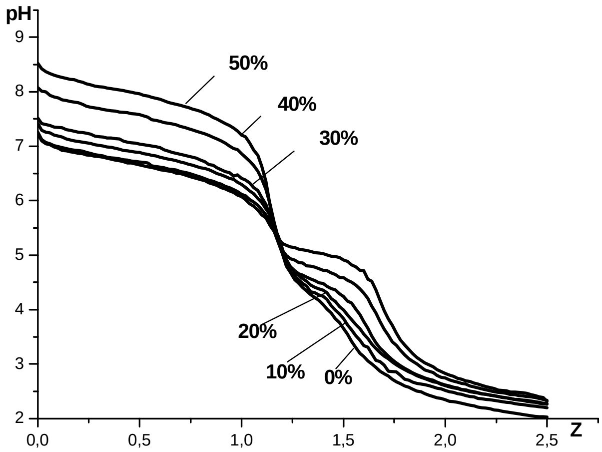


Рис. 1

Характер зависимостей для растворов с содержанием ДМФ от 10 до 30 объемных % очень похож на поведение системы без ДМФ, тогда как на кривых для растворов с 40 и 50%-м содержанием диметилформамида наблюдается значительное увеличение второго скачка pH в области Z = 1.4÷1.7.

В результате обработки полученных данных, была предложена оптимальная модель, включающая следующие ИПВА, рассчитанные для них концентрационные константы равновесий образования представлены в табл. 1.

Таблица 1

Значения концентрационных констант lgK_C образования ИПВА (с доверительной вероятностью 95 %)

Частица	*Z*	lgK_c (I=0.3 моль/л) при содержании ДМФ, об. %					
		0%	10%	20%	30%	40%	50%
$W_6O_{20}(OH)_2^{6-}$	1.00	50.23	51.65	52.38	54.05	56.09	58.30
$W_7O_{24}^{6-}$	1.14	–	–	–	–	72.85	76.63
$W_{12}O_{40}(OH)_2^{10-}$	1.17	117.52	120.28	122.12	125.71	129.93	134.73
$HW_{12}O_{40}(OH)_2^{9-}$	1.25	120.93			130.63	134.88	–
$HW_7O_{24}^{5-}$	1.29	71.63	73.03	74.14	75.91	78.96	81.94
$H_2W_{12}O_{40}(OH)_2^{8-}$	1.33	–	–	131.11	–	–	–
$H_3W_{12}O_{40}(OH)_2^{7-}$	1.42	–	134.08	–	–	–	–
$W_{12}O_{38}(OH)_2^{6-}$	1.50	135.91	138.49	140.58	144.61	–	–
$HW_{12}O_{38}(OH)_2^{5-}$	1.58	139.02	–	–	–	–	–
$W_{10}O_{32}^{4-}$	1.60	–	118.54	120.58	124.13	128.37	133.88
$HW_{10}O_{32}^{3-}$	1.70	–	–	123.53	127.73	131.56	138.24
$H_2W_{10}O_{32}^{3-}$	1.80	–	–	–	–	135.91	142.32

Исходя из данных, приведенных в таблице можно заметить, что гидрогептавольфрамат-анион присутствует в системе при любых концентрациях диметилформамида, а также в 40% и 50%-м растворе, появляется не протонированный гептавольфрамат-анион. Метавольфрамат-анион ($W_{12}O_{38}(OH)_2^{6-}$) и исчезает при высоком содержании ДМФ (40 и 50 об.%). Паравольфрамат-анион ($W_{12}O_{40}(OH)_2^{10-}$) присутствует при любом содержании органического растворителя в системе наряду с протонированными формами ($HW_{12}O_{40}(OH)_2^{9-}$, $H_2W_{12}O_{40}(OH)_2^{8-}$, $H_3W_{12}O_{40}(OH)_2^{7-}$). Декавольфрамат-анион. $W_{10}O_{32}^{4-}$ присутствует в модели. начиная с системы с 10%-м содержанием ДМФ. А при дальнейшем увеличении доли диметилформамида в растворе образуются еще и протонированные формы декавольфрамат-аниона.

Для того чтобы выяснить влияние присутствия органического растворителя в системе на образование тех или иных форм изополианионов было рассчитано содержание частиц (мольная доля, α, %) в широком интервале кислотностей. С использованием концентрационных констант, полученных при моделировании (программа CLINP 2.1) построены диаграммы распределения ионов в системах Na_2WO_4 – HCl – NaCl – ДМФ – H_2O (C_w = 0.01 моль/л; I = 0.5 моль/л) с содержанием ДМФ 0, 10, 20, 30, 40 и 50 объемных % (рис. 2-7 соответственно).

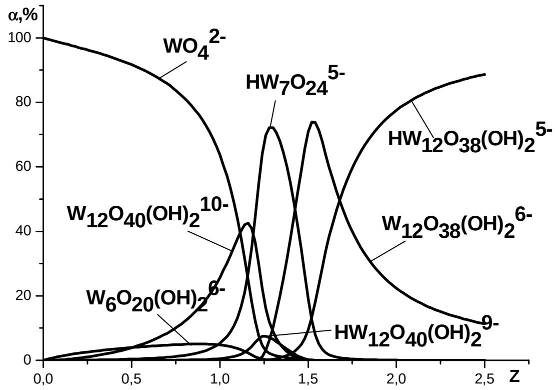


Рис. 2

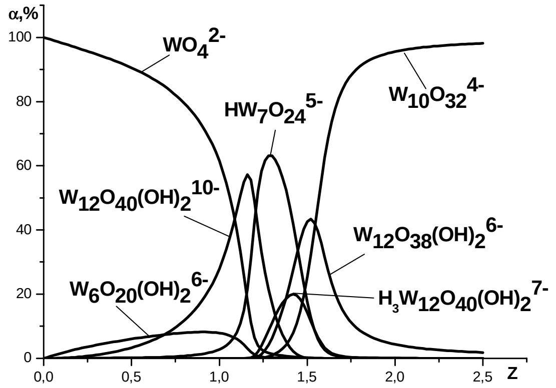


Рис. 3

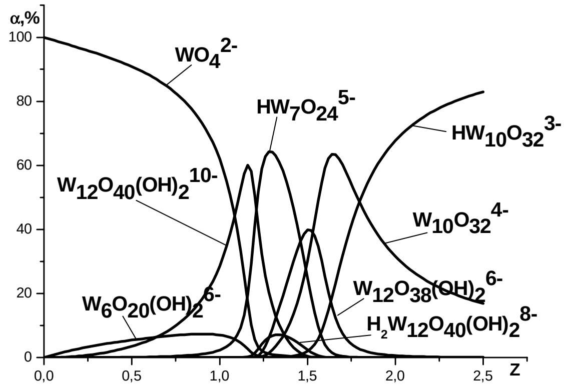


Рис. 4

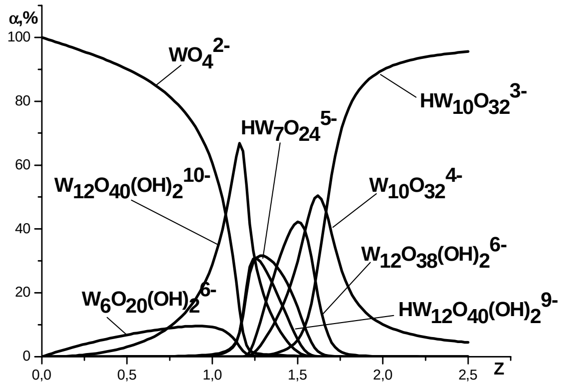


Рис. 5

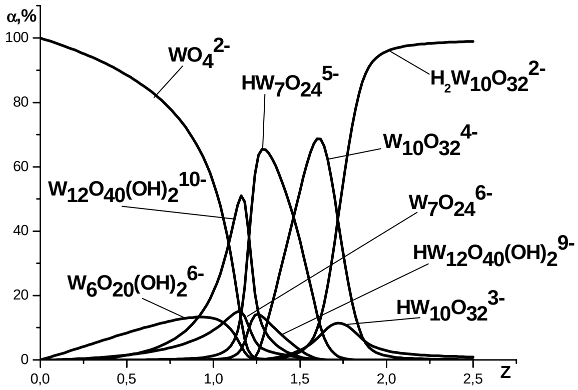


Рис. 6

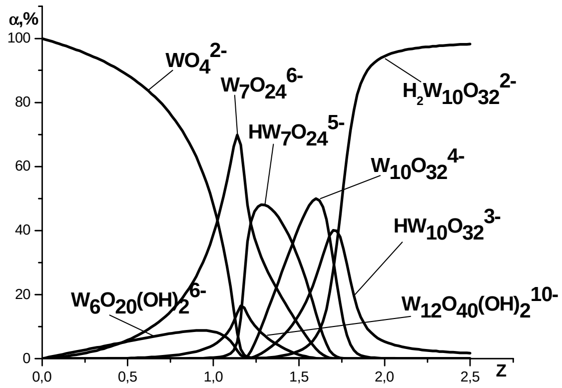


Рис. 7

Полученные диаграммы распределения ионов в растворах свидетельствуют о том, что с увеличением содержания органического растворителя повышается содержание частиц $HW_7O_{24}^{5-}$ при Z = 1.14, соответствующей теоретической кислотности образования данного иона, а в 40% и 50%-м растворе, т.е. при уменьшении полярности среды, появляется не протонированный гептавольфрамат-анион. Метавольфрамат-анион ($W_{12}O_{38}(OH)_2^{6-}$) хуже образуется в среде с высоким содержанием органического растворителя в системе и исчезает в растворах с объемной долей ДМФ 40% и 50%. Содержание паравольфрамат-аниона ($W_{12}O_{40}(OH)_2^{10-}$)уменьшается с увеличением доли органического растворителя в системе.

Протонированные формы паравольфрамата существуют при всех соотношениях воды и диметилформамида, но степень протонированности уменьшается с уменьшением полярности среды. При любых концентрациях органического растворителя при кислотности 1.60 образуется декавольфрамат-анион причем его содержание тем больше. чем больше диметилформамида в растворе. При подкислении раствора Натрия вольфрамата выше кислотности 1.70 также с повышением содержания ДМФ в растворе растет доля протонированных форм декавольфрамата - $HW_{10}O_{32}^{3-}$ и $H_2W_{10}O_{32}^{2-}$.

Исходя из диаграмм распределения, следует отметить, что наибольшее количество декавольфрамат-аниона при кислотности 1.60 образуется при 40-процентном содержании диметилформамида. Поэтому наиболее удобным является выделение солей декавольфрамата с таким содержанием органического компонента. В связи с этим был проведен синтез соли тетрабутиламмония с декавольфрамат-анионом. ИК-спектр полученного соединения подобен спектрам известных декавольфраматов [4, 8, 9, 19], что позволяет считать полосы в области вольфрам-кислородных колебаний характеристичными и использовать их для идентификации аниона в составе декавольфраматов (табл. 2). В спектре наблюдается одна полоса, отвечающая колебанию концевой связи W = O (930-950 см$^{-1}$), и полосы поглощения в области 400-890 см$^{-1}$, обусловленные колебаниями разного типа мостиковых групп W - O – W.

Таблица 2

Идентификация декавольфрамат-аниона на основе ИК-спектроскопических литературных данных

образец	ν, см$^{-1}$				
	W = O	W - O – W			
полученный в данной работе $[(C_4H_9)_4N]_4W_{10}O_{32} \cdot mC_3H_7ON$	959	889	802	584	436
$(C_8H_{11}NH)_4W_{10}O_{32} \cdot 3C_3H_7ON$ [5]	950	890	800	580	430
$(YOH)_2W_{10}O_{32} \cdot 18H_2O$ [9]	930	890	820	580	430
$3Na_2O \cdot 1.5[N(CH_3)_4]_2O \cdot 10WO_3 \cdot 8.5H_2O$ [10]	–	870	780	590	420
$Na_4W_{10}O_{32}$ [20]	959	891	800	582	435

Выводы. Методом pH-потенциометрического титрования при 25.0±0.1˚С на иономере «И-160» проведено исследование состояния изополианионов в водном и водно-диметилформамидном растворах.

Полученные зависимости pH от кислотности растворов, в которых содержание ДМФ составляло от 10 до 50% по объему (ионная сила I=0.5моль/л), использованы для математической обработки с помощью программы CLINP 2.1. Рассчитанные кривые титрования адекватно описывают экспериментальные кривые.

На основе рассчитанных концентрационных констант построены диаграммы распределения изополивольфрамат-анионов.

При сравнении диаграмм распределения в водной и водно-диметилформамидной средах следует обратить внимание, что декавольфрамат-анионы появляются в среде с содержанием ДМФ от 20 об.%. а также образуются протонированные формы декавольфрамат-анионов. Таким образом, можно сделать вывод, что диметилформамид оказывает стабилизирующее воздействие на декавольфрамат-анион ($W_{10}O_{32}^{4-}$), получение которого из водных растворов вызывает определенные трудности.

Из подкисленного до кислотности 1.60 раствора Натрия вольфрамата с 40-процентным содержанием диметилформамида выделен декавольфрамат тетрабутиламмония. Методом ИК-спектроскопии в составе соли идентифицирован декавольфрамат-анион.

РЕЗЮМЕ

Методами pH-потенціометричного титрування та математичного моделювання досліджено взаємодію у водному та водно-диметилформамідному підкислених розчинах Натрію вольфрамату при $C_W = 1 \cdot 10^{-2}$ моль/л. Підібрано моделі рівноважних процесів утворення частинок, які адекватно описують експериментальні залежності pH = f(Z). Розраховано концентраційні константи утворення вольфрамвмісних форм у водному та водно-диметилформамідному розчинах. Проведено порівняльний аналіз стану іонів вольфраму (VI) у водному розчині із станом у водно-диметилформамідному розчині. Синтезовано декавольфрамат тетрабутиламонію. Методом ІЧ-спектроскопії у складі солей ідентифіковано декавольфрамат-аніон.

Ключові слова: pH-потенціометрія, моделювання, рівновага, водно-диметилформамідне середовище, декавольфрамат-аніон.

SUMMARY

The methods of the pH-potentiometric titration and mathematical simulation were used to investigate the interaction in aqueous and aqueous-dimetilformamide acidified solutions of sodium tungstate at $C_W = 1 \cdot 10^{-2}$ mol/L. The chosen model of equilibrium processes of formation of particles adequately describe the experimental curves pH = f(Z). Concentration formation constants of tungsten anion forms were calculated in aqueous and aqueous-DMF solutions. A comparative analysis of the state of tungsten ions (VI) in aqueous solution with the state in aqueous-DMF solution was completed. Tetrabutylammonium decatungstate was synthesized. IR-spectroscopy was used to identify decatungstate-anion in the salts.

Keywords: pH-potentiometric investigation, simulation, equilibrium, aqueous-DMF media, decatungstate-anion.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li Z.-F. Bis[bis(1.10-phenanthroline-2N.N')copper(I)] 6-oxido-dodecakis-2-oxido-hexaoxidohexatungsten(VI) / Z.-F. Li, B.-S. Zhang, C.-S. Wu // Acta Crystallografica. – 2009. – Vol. E65. – P. m741-m742.
2. Hexatungstate subunit as building block in the hydrothermal synthesis of organic–inorganic hybrid materials: synthesis. structure and optical properties of $Co_2(bpy)_6(W_6O_{19})_2$ (bpy=4.4′-bipyridine) / L. Zhang, Y. Wei, C. Wang [et al.] // Journal of Solid State Chemistry. – 2004. – Vol. 177. – P. 3433-3438.
3. Hydronium μ-chloro-bis[bis(1.10-phenanthroline)copper(I)] hexatungstate monohydrate / P.-T. Ma, F.-X. Hu, M.-X. Li [et al.] // Acta Crystallografica. – 2006. – Vol. E62. – P. m2241–m2243.
4. Розанцев Г.М. Состояние ионов вольфрама (VI) в водно-диметилформамидной среде / Г.М. Розанцев, О.Н. Лысенко, Е.Е. Белоусова // Журнал неорганической химии. – 2000. – Т. 45, № 10. – С. 1761-1767.
5. Розанцев Г.М. Декавольфраматы редкоземельных элементов цериевой подгруппы / Г.М. Розанцев. В.И. Кривобок. В.Г. Пицюга // Журнал неорганической химии. – 1986. – Т. 31, № 10. – С. 2542-2545.
6. Условия синтеза декавольфраматов некоторых элементов третьей группы / Е.Е. Белоусова, В.И. Кривобок, Г.М. Розанцев и др. // Журнал неорганической химии. – 2005. – Т. 50, № 8. – С. 1371-1376.
7. Terms S. Reduction of the decatungstate anion in nonaqueous solution and its confirmation as “polytungstate-Y” / S. Terms. M.T. Pope // Inorganic Chemistry. – 1978. – Vol. 17, No 2. – P. 500-501.
8. Synthesis and properties of the decatungstate ion / L. Lorente, M.A. Martinez, J.M. Arrieta [et al.] // Thermochimica Acta. – 1986. – Vol. 98. – P. 89-97.
9. Das polywolframation Y, ein dekawolframation / E. Birkholz, J. Fuchs, W. Schiller [et al.] // Z. Naturforsch. – 1971. – Vol. 26b, No 4. – P. 365-366.
10. Pope M.T. Heteropoly and Isopoly Oxometallates / M.T. Pope. – Berlin: Springer-Verlag. 1983. – 285 p.
11. Duncan D.C. Early-time dynamics and reactivity of polyoxometalate excited states. Identification of a short-lived LMCT excited state and a reactive long-lived charge-transfer intermediate following picosecond flash excitation of $[W_{10}O_{32}]^{4-}$ in acetonitrile / D.C. Duncan. T.L. Netzel. C.L. Hill // Inorganic Chemistry. – 1995. – Vol. 34, No 18. – P. 4640-4646.
12. Texier I. Reactivity of the charge transfer excited state of sodium decatungstate at the nanosecond time scale / I. Texier. J.A. Delaire. C. Giannotti // Physical Chemistry Chem. Phys. – 2000. – Vol. 2. – P. 1205-1212.
13. Tanielian C. Acetone. a substrate and a new solvent in decatungstate photocatalysis / C. Tanielian. F. Cougnon. R. Seghrouchni // Journal Molecular Catalysis A: Chemical. – 2007. – Vol. 262. – P. 164-169.
14. Maldotti A. Selective photooxidation of diols with silica bound $W_{10}O_{32}^{4-}$ / A. Maldotti. A. Molinari. F. Bigi // Journal of Catalysis. – 2008. – Vol. 253. – P. 312-317.
15. Шарло Г. Методы аналитической химии. Количественный анализ неорганических соединений / Г. Шарло. – Л.: Химия, 1965. – С. 597-602.
16. Коростелев П.П. Приготовление растворов для химико-аналитических работ. – М.: Наука, 1964. – С. 227-230.
17. Papanastasiou G. Determination of hydrogen ion activity in various binary dimethylformamide/water and ternary dimethylformamide/dioxane/water solvent systems / G. Papanastasiou, I. Ziogas // Analytica Chimica Acta. – 1989. – No 221. – P. 295-303.
18. Холин Ю.В. Количественный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнеземов: содержательные модели, математические методы и их приложения / Ю.В. Холин. – Харьков: Фолио, 2000. – 288 с.
19. Microporous decatungstates: synthesis and photochemical behavior / Y. Guo, C. Hu, X. Wang [et al.] // Chemical Materials. – 2001. – No 13. – P. 4058-4064.

Поступила в редакцию 30.01.2012 г.

УДК 547-311 + 547.58 + 547.29 : 544.476

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНО-ТЕМПЕРАТУРНЫХ ФАКТОРОВ НА СКОРОСТЬ АЦИДОЛИЗА ЭПИХЛОРГИДРИНА О-ЗАМЕЩЕННЫМИ БЕНЗОЙНЫМИ КИСЛОТАМИ В ПРИСУТСТВИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ОСНОВАНИЙ

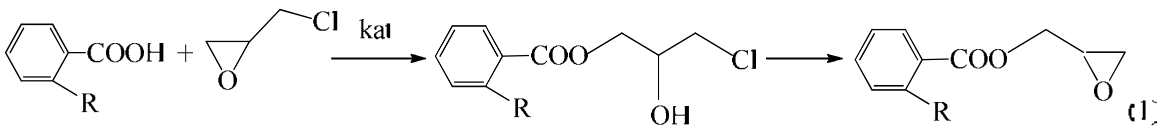
М. А. Синельникова, Д. С. Степанова, Е. Н. Швед

Изучена кинетика реакции орто-замещенных бензойних кислот с эпихлоргидрином в присутствии тетраэтиламмоний бромида и N,N-диметиланилина в температурном интервале 303÷343 К. Определен нулевой порядок реакции по кислотному реагенту. Показано, что реакция имеет низкую чувствительность к кислотным свойствам реагента и природе катализатора. Рассчитаны активационные параметры реакции и оценен их компенсационный эффект при варьировании структуры реагента и природы катализатора.

Ключевые слова: эпихлоргидрин, о-бензойные кислоты, реакционная способность, порядок реакции, активационные параметры.

Введение. Оксиран и его производные характеризуются высокой реакционной способностью. Реакция оксиранов с гидроксилсодержащими реагентами, в частности карбоновыми кислотами, используется в синтезе лекарственных препаратов, эпоксидных материалов с высокими эксплуатационными свойствами, которые применяются в медицине, электронике, машиностроении как пластификаторы, герметики, клеи [1, 2, 3]. Ацидолиз оксиранов является модельной реакцией для изучения процессов детоксикации в живых организмах [4]. Особенности протекания реакции раскрытия оксиранового цикла гидроксилсодержащими реагентами широко обсуждаются в литературе. Однако результаты исследования закономерностей ацидолиза оксиранов, в частности 1-хлор-2,3-эпоксипропана, монокарбоновыми кислотами в некоторых случаях противоречивы. Так, нет однозначного мнения относительно порядка реакции [5 – 8], влияния заместителя в гидроксилсодержащем реагенте, природы катализатора [9, 10, 11].

Целью настоящей работы является изучение влияния структуры монокарбоновой кислоты, а также температуры на скорость каталитического ацидолиза эпихлоргидрина (ЭХГ) орто-замещенными бензойными кислотами:



(1)

Экспериментальная часть. Объектом исследования выбрана реакционная серия ароматических кислот RC_6H_4COOH, где R – 2-OCH_3 (I), 2-CH_3 (II), H (III), 2-Cl (IV), 2-Br (V), 2-NO_2 (VI). Кинетические исследования проводились в температурном интервале 303÷343 К в условиях избытка ЭХГ. Контроль за ходом реакции осуществляли по убыли концентрации кислоты методом кислотно-основного потенциометрического титрования. ЭХГ сушили над сульфатом натрия и дважды перегоняли [12]. Кислоты I – VI очищали перекристаллизацией из воды [12]. Катализаторами реакции (1) выбраны основания - тетраэтиламмоний бромид (перекристаллизация из смеси бензол:этанол (3:2) [13]) и N,N-диметиланилин (перегонка при пониженном давлении [12]).

Результаты и их обсуждение. Для установления кинетического закона, которому подчиняется реакция (1), первоочередным является определение порядка реакции. В литературе представлены неоднозначные данные относительно порядка реакции по кислотному реагенту. Например, для реакции уксусной и тетрагидрафталевой кислот в избытке ЭХГ в присутствии четвертичных аммониевых солей наблюдался нулевой порядок по кислоте [5, 6]. Для реакции фенилглицидилового эфира с бензойной и уксусной кислотами в присутствии N,N-диметиланалина порядок реакции по кислоте первый [7, 8].

Для установления порядка реакции по орто-замещенным бензойным кислотам изучены скорости реакции кислот I – VI (a=0,300 моль/л) с ЭХГ (s=12,23÷12,32 моль/л) в присутствии оснований (b=0,005 моль/л) в исследуемом температурном интервале. Кинетические кривые (рис. 1) в координа-

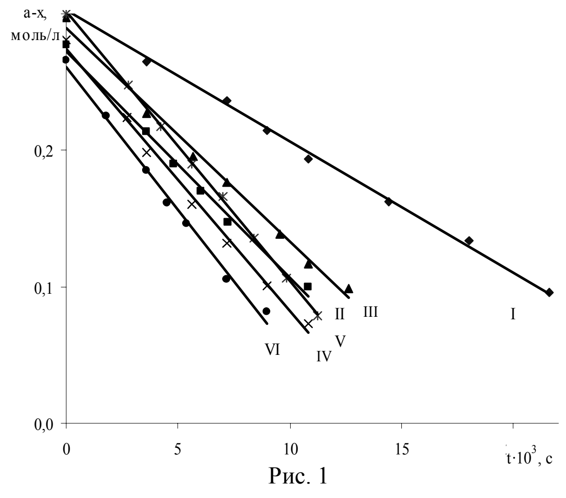


Рис. 1

тах: степень конверсии карбоновых кислот I-VI (a-x, моль/л) от времени (t, с) в реакции с ЭХГ носят прямолинейный характер с коэффициентом корреляции r > 0,98, что указывает на нулевой порядок реакции по карбоновой кислоте.

Нулевой порядок реакции по кислотам I – VI подтверждается расчетными методами Вант-Гоффа и Нойса-Оствальда. Известно, что порядки реакции по оксирану и катализатору основной природы преимущественно первые [5]. С учетом значительного избытка ЭХГ скорость реакции (1) описывается кинетическим уравнением:

$$dx / dt = k_k bs(a - x) = k_{набл} s(a - x) \tag{2}$$

где $(a - x)$ – текущая концентрация кислоты, моль/л, k_k и $k_{набл}$ – каталитическая и наблюдаемая константы скорости.

Наблюдаемые константы скорости для реакции (1) рассчитываются по уравнению псевдонулевого порядка (табл. 1):

$$k_{набл} = x / (s \cdot t) \tag{3}$$

Таблица 1

Наблюдаемые константы скорости реакции о-замещенных бензойных кислот (a=0,300 моль/л) с ЭХГ (s=12,23÷12,32 моль/л) в присутствии катализаторов основной природы (b=0,005 моль/л)

R в $R\text{-}C_6H_4COOH$	T, K	$k \cdot 10^6$, c^{-1}	R в $R\text{-}C_6H_4COOH$	T, K	$k \cdot 10^6$, c^{-1}
$(C_2H_5)_4NBr$					
$2\text{-}OCH_3$ (pK_a=4,47) [14]	303	0,146±0,005	2-Br (pK_a=2,85)	303	0,269±0,007
	313	0,371±0,010		313	0,710±0,009
	323	0,829±0,011		323	1,60±0,01
	333	2,52±0,04		333	3,95±0,07
	343	4,47±0,07			
$2\text{-}CH_3$ (pK_a=3,91 (30ºC))	303	0,219±0,009	2-Cl (pK_a=2,94)	303	0,272±0,007
	313	0,731±0,010		313	0,758±0,009
	323	1,44±0,01		323	1,70±0,04
	333	3,99±0,05		333	4,36±0,06
H (pK_a=4,18)	303	0,218±0,005	$2\text{-}NO_2$ (pK_a=2,17)	303	0,266±0,007
	313	0,567±0,007		313	0,692±0,006
	323	1,39±0,04		323	1,80±0,03
	333	3,33±0,05		333	4,33±0,09
	343	7,13±0,11		343	9,33±0,07
$C_6H_5N(CH_3)_2$					
$2\text{-}CH_3$	303	0,109±0,009	2-Cl	303	0,153±0,004
	313	0,280±0,007		313	0,409±0,007
	323	0,534±0,005		323	0,855±0,011
	333	1,14±0,10		333	1,89±0,04
H	303	0,105±0,009	$2\text{-}NO_2$	303	0,232±0,004
	313	0,258±0,003		313	0,568±0,006
	323	0,565±0,005		323	1,36±0,03
	333	1,23±0,11		333	2,79±0,02
	343	2,29±0,04		343	6,98±0,08

Анализ данных табл.1 показывает, что при изменении кислотних свойств бензойних кислот более, чем на 2 порядка наблюдаемые константы скорости изменяются лишь в ~2 раза. При катализе N,N-диметиланилином реакция более чувствительна к изменению природы кислоты.

Оценка зависимости скорости реакции от структуры нуклеофильного реагента проведена по уравнению Гаммета

$$\lg k_R = \lg k_H + \rho\sigma \tag{4}$$

и Бренстеда

$$\lg k_R = \lg G + \alpha \cdot pK_a . \tag{5}$$

Для реакции (1), катализируемой тетраэтиламмоний бромидом, не получены прямолинейные зависимости по уравнениям (4) и (5) (0,42<r<0,56). При ацидолизе ЭХГ в присутствии третичного амина – N,N-диметиланилина, зависимость скорости реакции от природы кислотного реагента описывается корреляциями:

$$\lg k_{набл} = (-5.89 \pm 0.04) + (0.43 \pm 0.09) \cdot \sigma , \qquad r=0{,}856 \qquad N=4 \tag{6}$$

$$\lg k_{набл} = (-5.11 \pm 0.05) + (-0.21 \pm 0.01) \cdot pK_a \qquad r=0{,}988 \qquad N=4 \tag{7}$$

Из уравнений (6) и (7) видно, что реакция (1) имеет низкую чувствительность как к характеристике заместителя в бензойной кислоте (σ), так и к кислотным свойствам реагента. Увеличение электроноакцепторных свойств заместителя, т.е. повышение кислотних свойств реагента ускоряет реакцию.

Важной характеристикой реакции являются ее активационные параметры. Влияние температуры на скорость реакции (1) оценивают с помощью уравнения Аррениуса:

$$\ln k = \ln A - E_a / RT \qquad (8)$$

Зависимости в координатах $\ln k$ от $1/T$ носят прямолинейный характер (r≥0,990), что указывает на неизменность механизма реакции в исследуемом интервале температур. Полученные значения E_a и рассчитанные, исходя из уравнения (8), величины энтальпии ($\Delta H^{\#}$) и энтропии ($\Delta S^{\#}$) активации приведены в табл. 2.

Таблица 2

Активационные параметры реакции о-замещенных бензойных кислот (a=0,300 моль/л) с ЭХГ (s=12,23÷12,32 моль/л) в присутствии катализаторов основной природы (b=0,005 моль/л)

R в R-C_6H_4COOH	E_a, кДж/моль	$\Delta H^{\#}_{333}$, кДж/моль	$-\Delta S^{\#}_{333}$, Дж/моль·К
$(C_2H_5)_4NBr$			
2-OCH_3	75,7±3,2	70,2	144
2-CH_3	78,8±0,5	73,3	129
H	75,6±0,4	70,1	140
2-Br	74,4±1,5	68,9	143
2-Cl	76,6±2,1	71,1	135
2-NO_2	77,4±0,7	71,9	133
$C_6H_5N(CH_3)_2$			
2-CH_3	64,6±2,7	59,1	182
H	66,8±1,1	61,3	175
2-Cl	69,4±2,1	63,9	164
2-NO_2	72,5±1,8	67,0	150

Полученные значения энергии и энтальпии активации соизмеримы в пределах ошибки эксперимента в случае катализа тетраэтиламмоний бромидом и имеют тенденцию к изменению в случае катализа ДМА. В целом значения активационных параметров реакции (1) при катализе N,N-диметиланилином несколько ниже по сравнению с катализом тетраэтиламмоний бромидом. Наиболее чуствительной к природе регента является энтропия, что свидетельствует о более упорядоченном переходном состоянии на пути реакции (1). Полученые значения активационных параметров соизмеримы с соответствующими величинами для аналогичной реакционной серии уксусных кислот с ЭХГ в присутствии $(C_2H_5)_4NBr$ (E_a=75 ÷ 82 кДж/моль, $\Delta H^{\#}_{333}$=70 ÷ 76 кДж/моль) и для уксусной кислоты с ЭХГ в присутствии $C_6H_5N(CH_3)_2$ (70 и 64 кДж/моль соответственно). Обращает на себя внимание тот факт, что для серии о-замещенных бензойних кислот значения энтропии активации в присутствии как третичного амина, так и тетраалкиламмониевой соли ниже по сравнению с реакционной серией уксусных кислот (-81 ÷ -96 Дж/моль·К при катализе $(C_2H_5)_4NBr$ и -130 Дж/моль·К при катализе $C_6H_5N(CH_3)_2$).

Зависимость $\Delta H^{\#}_{333}$ (кДж/моль) от $\Delta S^{\#}_{333}$ (Дж/моль·К) для реакции о-замещенных бензойных кислот I – VI с ЭХГ в присутствии тетраэтиламмоний бромида и N,N-диметиланилина (рис. 2) носит прямолинейный характер. Это указывает на компенсационный эффект [11] в изменении энтальпии $\Delta H^{\#}_{T}$ и энтропии $\Delta S^{\#}_{T}$ активации под влиянием структуры катализатора и заместителя в бензойной кислоте, что подтверждается корреляционным уравнением:

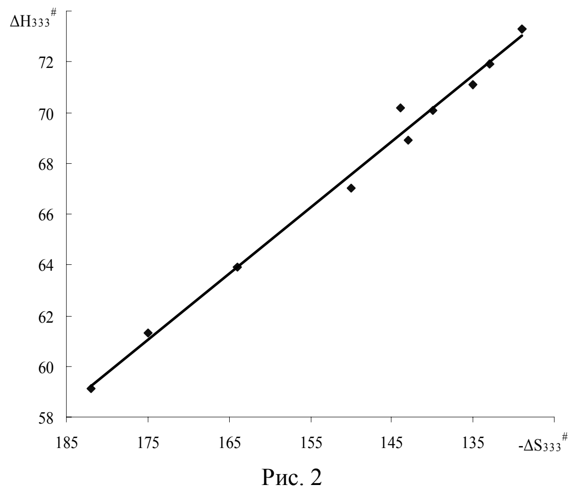


Рис. 2

$$\Delta H^{\#}_{333} = (107 \pm 1) \cdot 10^3 + (260 \pm 9) \cdot \Delta S^{\#}_{333}, \qquad r=0.989, \quad N=10 \qquad (9)$$

Полученная изокинетическая зависимость свидетельствует о неизменном механизме реакции при варьировании структуры кислоты и природы катализатора в условиях данного эксперимента. Найденное значение изокинетической температуры (260±9 К), т.е. температуры, при которой наступает полная компенсация в изменении энтальпии и энтропии активации и не наблюдается влияния структуры кислоты и катализатора на скорость реакции, соизмеримо в пределах ошибки эксперимента с изокинетической температурой для серии уксусных кислот в аналогичных условиях (273±11 К).

Выводы. Таким образом, наблюдаемый как для ароматических, так и для алифатических карбоновых кислот кинетический энтальпийно-энтропийный компенсационный эффект с практически одинаковой изокинетической температурой позволяет считать, что механизм раскрытия оксиранового цикла карбоновими кислотами ароматического и алифатического ряда в присутствии органических оснований идентичен и соответствует механизму переноса аниона кислоты ионной парой.

РЕЗЮМЕ

Досліджена кінетика реакції о-заміщених бензойних кислот з епіхлоргідрином в присутності тетраетил амоній броміду та N,N-диметиланіліну в температурному інтервалі 303÷343 К. Визначено нульовий порядок реакції за кислотним реагентом. Показано, що реакція має низьку чутливість до кислотних властивостей реагенту та природи каталізатора. Розраховані активаційні параметри реакції та оцінено їх компенсаційний ефект при варіюванні структури реагенту та природи каталізатора.

Ключові слова: епіхлоргідрин, о-бензойні кислоти, реакційна здатність, порядок реакції, активаційні параметри.

SUMMARY

There are investigated the kinetic of the reaction o-substituted benzoic acids with epichlorohydrin in the presence of tetraethyl ammonium bromide and N,N-dimethylaniline at temperature 303÷343 K. It is determined a zero order with respect to acid reagent. There are investigated that reaction has the low sensitivity to acidic properties of the reagent and to the structure of catalyst. It is defined the activation parameters of reaction and compensation effect on varying structures of reagent and catalyst.

Keywords: epichlorohydrin, o-benzoic acids, reactionary ability, order of reaction, activation parameters.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pat. 20030004281A1 USA / Smits J., Marx E., Kooijmans P. et al. – Publ. 2003.
2. Получение хлоргидриновых эфиров карбоновых кислот / М.Ф. Сорокин, Л.Г. Шоде, А.И. Кузьмин и др. // Лакокрасочные материалы и их применение. – 1983. – № 4. – С. 4-7.
3. Швайка О.П. Основи синтезу лікарських речовин та їх проміжних продуктів / О.П.Швайка – Донецьк, 2004. – 360 с.
4. Жолдакова З.И. Механизмы процессов биоактивации чужеродных химических веществ под действием ферментативных систем организма / З.И. Жолдакова, Н.В. Харчевникова // Вестник Российской Академии медицинских наук. – 2002. – № 8. – С. 44-49.
5. Механизм и кинетика основного катализа реакции уксусной кислоты с эпоксидами / А.К. Гуськов, С. Юй, М.Г. Макаров и др. // Кинетика и катализ. – 1994. – № 6. – С. 873-877.
6. Направление раскрытия α-окисного кольца в реакции эпихлоргидрина с карбоновыми кислотами при основном катализе / М.Ф. Сорокин, Л.Г. Шоде, А.И. Кузьмин, Н.А. Новиков // Известия ВУЗов. Серия Химия и химическая технология. – 1984. – № 6. – С. 658-661.
7. Катализ реакции α-оксидов с карбоновыми кислотами жирноароматическими третичными аминами / М.Ф.Сорокинн, Л.Г.Шоде, В.В.Веслов, Л.П.Петрова // Известия ВУЗов. Химия и химическая технология. – 1980. – № 8. – С. 963-967.
8. Шологон И.М. Кинетика и механизм реакций замещенных α-окисей с карбоновыми кислотами. I. Катализ реакции эпихлоргидрина с 4-метил-3,4-тетрагидрофталевой кислотой галогенидами тетраалкиламмония / И.М. Шологон, М.С. Клебанов, В.А. Алдошин // Кинетика и катализ. – 1982. – № 4. – С. 841-846.
9. Лебедев Н.Н. Реакции α-окисей. V. Реакционная способность карбоновых кислот в реакции с α-окисью этилена / Н.Н. Лебедев, К.А. Гуськов // Кинетика и катализ. – 1964. – № 5. – С. 787-791.
10. Malek J. Kinetics and mechanism of the reaction of aromatic carboxylic acids with ethylene oxide in protic and aprotic solvents in the presence of tertiary amines / J. Malek, P. Silhavy // Collection of Czechoslovak chemical communications. – 1976. – № 1. – P. 84-100.
11. Шпанько И.В. Энтальпийно-энтропийный компенсационный эффект в реакциях 3,5-динитрофенилоксирана с аренсульфоновыми кислотами: экспериментальное свидетельство феномена изопараметричности / И.В. Шпанько, И.В. Садовая // Теоретическая и экспериментальная химия. – 2010. – Т.46, №3. – С.171-176.
12. Справочник химика / Под ред. Б.П. Никольского и др. – Л.: Химия, 1971 г. – Т. 2 – 1168 с.
13. Вольский К.П. Методы получения и очистки некоторых четвертичных аммониевых солей, применяемых в хроматографии / К.П. Вольский, И.В. Хвостов – М.: НИИТЭхим, 1975. – 8 с.
14. Свойства органических соединений. Справочник / Под. ред. А.А. Потехина. – Л.: Химия, 1984. – 520 с.

Поступила в редакцию 31.01.2012 г.

УДК 546.719:54-386

РЕАКЦІЇ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ У СИСТЕМІ $[Re_2Cl_8]^{2-} – H_3PO_4$

В. Г. Столяренко, Д. Є. Єгорова, Т. В. Старова, С. А. Безбородько**, О. В. Штеменко**
*Криворізький державний педагогічний університет, м. Кривий Ріг; *Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет", м. Дніпропетровськ; **Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара*

Вивчено процеси комплексоутворення біядерних кластерних сполук ренію(III) з фосфатними лігандами у водних і органічних середовищах. Отримані та досліджені сполуки із загальною формулою $Cat_2[Re_2(HPO_4)_4{\cdot}2L]$, де $M=Cs^+$, K^+, NH_4^+, Na^+; $L=H_3PO_4$, H_2O. Показана перспективність подальшого дослідження різних типів сполук цього класу, у тому числі як біоактивних речовин з низькою токсичністю.

Ключові слова: біядерні комплекси Ренію(III), фосфатні координаційні сполуки.

Вступ. Біядерні кластерні сполуки перехідних металів з безпосереднім зв'язком метал-метал підвищеної кратності відносно новий, але активно досліджуваний клас неорганічних речовин. Постійний інтерес до вивчення будови, властивостей та реакційної здатності цих сполук обумовлений наявністю мультиплетного зв'язку метал-метал, кратність якого, наприклад для Ренію, сягає чотирьох, а також наявністю у них низки корисних властивостей, серед яких потенційна біологічна активність, що виражена у мембраностабілізуючому та антипроліферативному ефекті [1].

Хімія біядерних кластерних сполук представлена досить великою кількістю різноманітних комплексів. Найбільш вивченими є карбоксилатні і галогенідні комплекси [2], у той час як фосфатні кластери з конфігурацією d^4-d^4 відомі тільки для Ренію і Молібдену і представлені усього одним структурним типом для кожного з цих d-металів [3,4]. З огляду на малу токсичність і значну біоактивність біядерних комплексів ренію(III) [1, 2], результати дослідження процесів комплексоутворення кластерного центру Re_2^{6+} з фосфатними лігандами можуть послужити моделлю хімічного впливу біядерних комплексних сполук Re(III) на фосфоліпідний матрикс клітинних мембран, що дозволить зробити ще один крок до розкриття механізму біологічної дії біядерних кластерних сполук ренію(III).

Тому метою даного дослідження було вивчення процесів комплексоутворення у системі $[Re_2Cl_8]^{2-}$ – H_3PO_4, виділення біядерних кластерних сполук ренію(III) з фосфатними лігандами у твердому стані і дослідження їхніх властивостей.

Основний розділ. У якості вихідної сполуки для синтезу тетра-μ-гідрофосфатів диренію(III) було використано тетрабутиламоній октахлородиренат(III), комплекс, який вже містить кластерне угруповання Re_2^{6+}, що дозволяє уникнути необхідності проведення окисно-відновних реакцій для його одержання. Крім того $(NBu_4)_2Re_2Cl_8$ розчинний у багатьох органічних розчинниках та характеризується досить високою лабільністю хлоридного лігандного оточення кластерного фрагмента Re_2^{6+}.

Дія фосфорної кислоти на розчин тетрабутиламоній октахлородиренату(III) викликає заміщення екваторіальних хлоридів на фосфатні місткові ліганди вже за кімнатної температури

$$\left[Re_2Cl_8\right]^{2-} \xrightarrow[+CH_3CN]{+H_3PO_4} \left[Re_2\left(HPO_4\right)_n Cl_{8-2n}\right]^{2-}, \quad (1)$$

де $n=\overline{1,4}$. Це підтверджується наявністю у спектральній картині реакційних розчинів системи $[Re_2Cl_8]^{2-}$ – H_3PO_4 гіпсохромного зсуву і зменшення інтенсивності смуги поглинання характеристичної для октахлородиренатів(III) при 14706 см$^{-1}$ і появою смуги поглинання при 15625 см$^{-1}$, характеристичної для іону $[Re_2(HPO_4)_4L_2]^{2-}$ (L= H_3PO_4, H_2O) (рис. 1).

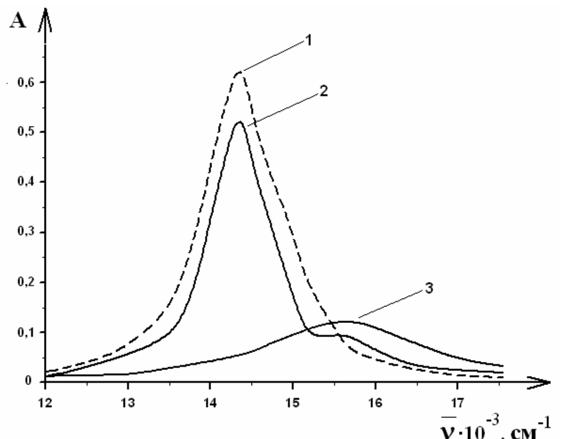


Рис. 1. ЕСП реакційного розчину системи $[Re_2Cl_8]^{2-}$ - H_3PO_4 у часі: 1 – ЕСП розчину $(NBu_4)_2Re_2Cl_8$ в ацетонітрилі; 2 – ЕСП розчину через 24 години після додавання фосфатної кислоти; 3 – ЕСП розчину через 30 діб після додавання фосфатної кислоти

Нагрівання реакційного розчину у температурному інтервалі 120-130 ^{0}C прискорює проходження процесу взаємодії тетрабутиламоній октахлородиренату(III) з фосфатною кислотою і призводить до практично кількісного переходу його у тетра-μ-гідрофосфати диренію(III) приблизно через 5-6 годин. На підставі експериментальних досліджень системи $[Re_2Cl_8]^{2-}$ - H_3PO_4 встановлені оптимальні умови синтезу фосфатних похідних кластера Re_2^{6+} [5] і отримані тетра-μ-гідрофосфати диренію(III) із двома молекулами фосфатної кислоти в аксіальних положеннях, що мають різні зовнішньосферні катіони: $K_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$ - (**I**) $Na_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$ - (**II**), $Cs_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$ - (**III**), $(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$ - (**IV**).

Даний синтез може бути представлений у вигляді наступного рівняння реакції:

$$(NBu_4)_2Re_2Cl_8 + Cat_2HPO_4 + 5H_3PO_4 \rightarrow Cat_2\left[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2\right] + 2NBu_4Cl + 6HCl,$$

$$Cat = Cs^+,\ K^+,\ NH_4^+,\ Na^+. \qquad (2)$$

Отримані сполуки представляють собою дрібнокристалічні речовини темно-зеленого кольору, нерозчинні у більшості органічних розчинників і розчинні у воді і розчинах неорганічних кислот.

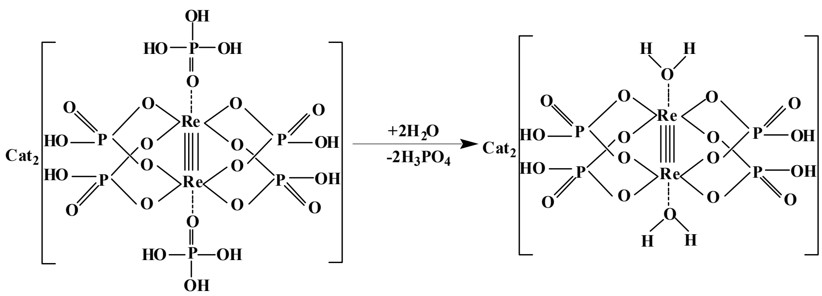
Розведення реакційних розчинів із синтезів ди(фосфат)тетра-μ-гідрофосфатодиренатів(III) призводить до осадження дрібнокристалічних сполук блакитного кольору з меншим вмістом фосфору (Re: P = 1:2), ніж у сполуках **I-IV** (Re:P = 1:3) (табл.1), що пояснюється заміщенням аксіальнозв'язаних молекул фосфорної кислоти на молекули води і утворенням діакватетра-μ-гідрофосфатодиренатів(III).

Таблиця 1

Дані елементного аналізу для $Cat_2[Re_2(HPO_4)_4L_2]$, де Cat = K^+, Na^+, Cs^+, NH_4^+, L = H_3PO_4, H_2O

Сполуки	№	%Re, розраховано	%Re, знайдено	%P, розраховано	%P, знайдено
$K_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$	I	36,14	35,98	18,05	18,11
$Na_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$	II	37,30	37,19	18,63	18,52
$Cs_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$	III	30,57	30,21	15,27	14,77
$(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$	IV	37,68	37,43	18,82	19,26
$K_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	V	42,78	42,29	14,24	14,73
$Na_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VI	44,42	44,28	14,79	14,93
$Cs_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VII	35,19	34,82	11,72	12,04
$(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VIII	44,95	44,57	14,97	15,38

Таким чином, аналіз отриманих даних дозволив припустити, що розчинення у воді сполук I- IV також буде супроводжуватися заміщенням молекул фосфорної кислоти, що знаходяться в аксіальних положеннях, на молекули води (3).



(3)

Для цілеспрямованого одержання тетрафосфатів диренію(III) з молекулами води в аксіальних положеннях використовували системи $(NBu_4)_2[Re_2Cl_8]$ – H_3PO_4 – H_2O на базі яких були синтезовані речовини $K_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$ - (**V**), $Na_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$ - (**VI**), $Cs_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$ - (**VII**), $(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$ - (**VIII**).

Синтезовані сполуки **V-VIII** представляють собою дрібнокристалічні речовини блакитного кольору, нерозчинні у більшості органічних розчинників і розчинні у воді і розчинах неорганічних кислот. За збільшенням розчинності у воді діакватетра-μ-гідрофосфати диренію(III) можна розмістити в наступний ряд: цезієва сіль < калійна сіль < амонійна сіль < натрієва сіль (табл.2). Помітне зменшення розчинності у воді цезієвої солі у порівнянні із солями калію, натрію й амонію відповідає правилам розчинності координаційних солей К.Б. Яцимирського [6], згідно яким координаційні сполуки, що складаються з великого катіона і великого аніона, повинні бути менш розчинні, ніж ті, що містять маленький катіон і великий аніон.

Таблиця 2

Дані дослідження розчинності у воді $Cat_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$, где Cat = K^+, Na^+, Cs^+, NH_4^+

Формула сполуки	№	Температура, °C	Розчинність (г) в 100 мл води
$K_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	V	18	0,341
$Na_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VI	18	0,487
$Cs_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VII	18	0,065
$(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VIII	18	0,368

Точна будова комплексного аніона $[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]^{2-}$ була встановлена за допомогою рентгеноструктурного аналізу (РСА) амоній діакватетра-μ-гідрофосфатодирената(III) [10]. Результати аналізу підтвердили, що сполука має структуру іонної солі, що включає катіони амонія і комплексні діакватетра-μ-гідрофосфатодиренат(III) - аніони. Кожен аніон складається з кластерного остову Re-Re, до якого містками координовано чотири гідрофосфатні групи. Довжина зв'язку Re – Re дорівнює 2,2206(4) Å, що відповідає міжатомній взаємодії з утворенням четверного зв'язку (рис.2).

Взаємодія між аніонами, а також аніонами і катіонами в амонії діакватетра-μ-гідрофосфатодиренаті(III) відбувається за допомогою O-H---O і N-H---O водневих зв'язків, які об'єднують компоненти структури в тривимірний каркас.

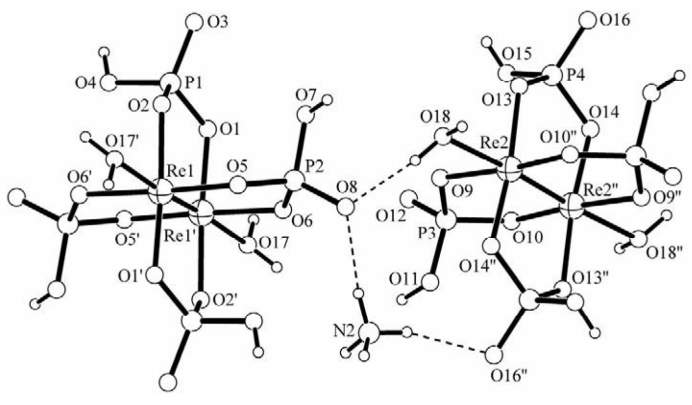


Рис. 2. Будова координаційної сполуки $(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$

Особливий інтерес представляло вивчення стійкості водних розчинів фосфатних комплексів диренію(III), тому що більшість галогенідних, карбоксилатних, галогенокарбоксилатних і сульфатних похідних або не розчиняються у воді, як дигалогенотетра-μ-ацетати диренію(III), або практично відразу гідролізують, як інші галогенокарбоксилати й октагалогенодиренати(III) [7, 8]. Тетра-μ-сульфати диренію(III) руйнуються під дією вологи повітря навіть у кристалічному стані [9].

Для вивчення гідролізу діакватетра-μ-гідрофосфатодиренатів(III) готували дві серії розчинів речовин **V-VIII** з концентрацією 0,0019 моль/л. Першу серію розчинів витримували за температури 20^0C у повітряному термостаті, другу - при 70^0C на водяній бані. У ході експерименту фіксували зміни в спектральній картині досліджуваних сполук в області найбільше характеристичної смуги поглинання, що відноситься до δ-δ* електронного переходу зв'язку Re-Re [5]. Зменшення оптичної густини смуги поглинання при 15625 $см^{-1}$, характерної для тетра-μ-гідрофосфатів диренію(III) (рис. 3), і випадіння чорного осаду говорить про руйнування сполук внаслідок проходження гідролізу.

Дані дослідження процесів гідролізу кластерних сполук дитехнецію(II/III) за допомогою спектрофотометрического методу аналізу [10] і диродію(II) [11] дозволили припустити, що за тривалого контакту тетра-μ-гідрофосфатодиренатів(III) з водою відбувається поступове заміщення екваторіальних фосфатних груп на молекули води (4):

$$\left[\mathrm{Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2}\right]^{2-} \rightarrow \left[\mathrm{Re_2(HPO_4)_3(H_2O)_2}\right] + \mathrm{HPO_4}^{2-} \qquad (4)$$

Подальша дисоціація комплексу і конденсація вже координованих молекул води з утворенням гідроксокомплексів призводить до розриву зв'язку Re-Re. У результаті цього утвориться найбільш стійка форма для ренію - реній(IV) оксид - ReO_2. Зі збільшенням температури швидкість гідролізу помітно зростає. Так при 20^0C смуга поглинання при 15625 $см^{-1}$ присутня в електронних спектрах розчинів солей протягом 4 місяців, а при 70^0C - протягом 27 годин (рис. 3).

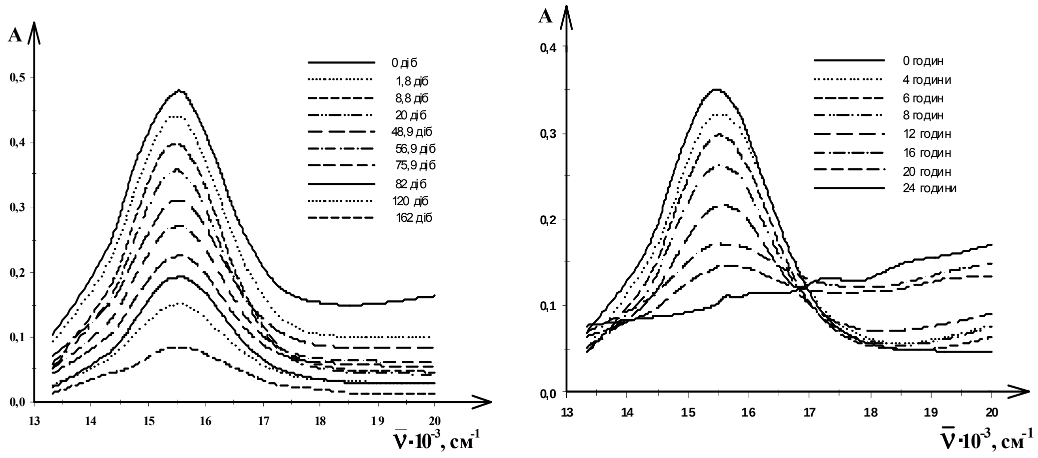


Рис. 3. ЕСП водних розчинів амоній діакватетра-μ-гідрофосфатодиренату(III):
а) при 20°C; б) при 70°C (См = $1{,}9\cdot10^{-3}$моль/л)

При вивченні процесу гідролізу амонійної, натрієвої, цезієвої і калійної солей тетра-μ-гідрофосфатдиренію(ІІІ), ми одержали практично однакову спектральну картину. Отже, стійкість водних розчинів тетра-μ-гідрофосфатодиренатів(ІІІ) не залежить від природи зовнішньосферного катіону.

Для сполук I-VIII була виміряна молярна електропровідність їх водних розчинів. Визначення молярної електропровідності комплексних сполук у водних розчинах використовується дуже широко. Однак вода, як розчинник, має істотний недолік, її молекули мають велику схильність до утворення комплексних сполук і можуть витісняти ліганди, що ускладнює правильну інтерпретацію будови досліджуваних речовин.

Проникнення молекул води в лігандне оточення кластерного центру Re_2^{6+}, як було встановлено у ході вивчення гідролізу фосфатів диренію(ІІІ) відбувається з незначною швидкістю і, отже, для свіжевиготовлених розчинів тетра-μ-гідрофосфатодиренатів(ІІІ) не буде помітно впливати на результати зроблених вимірів. Крім того, тетра-μ-гідрофосфати диренію(ІІІ) не розчиняються в органічних розчинниках, і тому вода - єдиний розчинник, що підходить для виміру електропровідності цих сполук.

Вимір молярної електропровідності дозволив для отриманих сполук I-VIII зробити віднесення до визначених типів електролітів (табл. 3). Еталоном для цих віднесень були усереднені дані, наведені у роботі [12].

Таблиця 3

Електропровідність тетра-μ-гідрофосфатів диренію(ІІІ) у водних розчинах

Формула сполуки	№	Температура, °С	Молярна електропровідність, λ_M, $ом^{-1}\cdot см^2\cdot моль^{-1}$	Тип електроліту
$K_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$	I	25	447-540	–
$Na_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$	II	25	463-603	–
$Cs_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$	III	25	402-586	–
$(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_3PO_4)_2]$	IV	25	479-612	–
$K_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	V	24	267	2:1
$Na_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VI	24	255	2:1
$Cs_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VII	24	259	2:1
$(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$	VIII	24	277	2:1

Дані молярної електропровідності, отримані для розчинів сполук **I-IV**, мали непостійні й аномально великі значення. Це пояснюється присутністю в розчині протонованих молекул води H_3O^+, що мають високі значення іонної електропровідності [12,13]. Джерелом протонів у сполуках **I-IV** є аксіальні молекули фосфорної кислоти, часткова кислотна дисоціація яких викликана недостатньо сильною фіксацією атомів Гідрогену ковалентними і водневими зв'язками.

Відповідно до роботи [12], розчини електролітів типу 2:1 і 1:2 володіють електропровідністю в інтервалі 230-270 $ом^{-1}\cdot см^2\cdot моль^{-1}$. Дані електропровідності, отримані для водних розчинів сполук **V-VIII**, попадають у зазначений інтервал значень, що дозволило нам охарактеризувати їх як іонні сполуки типу 2:1.

Дослідження біологічної, а саме антипроліферативної активності діакватетра-μ-гідрофосфатодиренатів(ІІІ) проводилися на коренях проростків кукурудзи, за допомогою методу, що дозволяє визначити перспективність подальших досліджень речовин у якості потенційних протиракових препаратів [14]. Високий ступінь кореляції антипроліферативної активності на коренях проростків кукурудзи й антиканцерагенної активності різних сполук робить даний метод дослідження біологічної активності речовин досить показовим.

Значна антипроліферативна активність була виявлена у $(NH_4)_2[Re_2(HPO_4)_4(H_2O)_2]$, який постійно перевищує активність еталону цис-$[Pt(NH_3)_2Cl_2]$ у діапазоні концентрацій 10^{-5} - 10^{-7} моль/л і зберігає її при низьких концентраціях 10^{-8}- 10^{-10} моль/л, за яких у цис-платину ефект цілком відсутній [15]. Так як саме низькі концентрації лікарських речовин є фізіологічними, діакватетра-μ-гідрофосфатодиренати(ІІІ) є перспективними речовинами для подальших вивчень їх антиканцерогенних властивостей у предклінічних дослідженнях з метою подальшого використання в медицині.

Висновки. У результаті проведеного дослідження були виявлені основні принципи синтезу тетрафосфатів диренію(ІІІ) з різними аксіальними лігандами, вивчені деякі властивості їх розчинів, показана біологічна активність отриманих речовин.

РЕЗЮМЕ

Изучены процессы комплексообразования биядерных кластерных соединений рения(III) с фосфатными лигандами в водных и органических средах. Получены и исследованы соединения с общей формулой $Cat_2[Re_2(HPO_4)_4\cdot 2L]$, где $M=Cs^+$, K^+, NH_4^+, Na^+; $L=H_3PO_4$, H_2O. Показана перспективность дальнейшего исследования разных типов соединений этого класса, в том числе и в качестве противоопухолевых препаратов с низкой токсичностью.

Ключевые слова: биядрные комплексы Рения(III), фосфатные координационные соединения.

SUMMARY

The processes of formation complexes of binuclear cluster compounds of rhenium(III) with phosphatic ligands are studied in water and organic environments. Compounds with the general formula $Cat_2[Re_2(HPO_4)_4{\cdot}2L]$, $M=Cs^+$, K^+, NH_4^+, Na^+; $L=H_3PO_4$, H_2O were synthesized and learnt. The further examination availability of different views of compounds of this class was shown; also as antitumoral drugs with hypotoxicity.

Keywords: binuclear complexes of rhenium (III), phosphatic coordination compounds.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Заявка пат. № а 2005 10232, Україна, МКИ C07F1/08,3/06. Галогенокарбоксилати диренію(III), що проявляють антипроліферативну активність відносно клітин коренів кукурудзи та гібридоми 1Д6, а також імунотропну активність відносно взаємодії антиген-антитіло та спосіб їх одержання. / Штеменко О.В., Штеменко Н.І., Горіла М.В., Сорочан О.О., Голіченко О.А. (Україна); УДХТУ, ДНУ. Заявл. 31.10.2005.
2. Штеменко А.В. Особенности химического поведения биядерных кластерных соединений рения(III) / А.В. Штеменко, А.А. Голиченко, О.В. Кожура // Вопросы химии и хим. технологии. – 2000. – № 2. – С. 21-24.
3. Козьмин П.А. Синтез и атомноая структура кристаллов соединения $Cs_2[Re_2(HPO_4)_4](H_3PO_4)_2$ / П.А. Козьмин, М.Д. Суражская, Т.Б. Ларина // Физ. химия. – 1984. – № 5. – С. 929-933.
4. Nocera D.G. Photochemistry of multiply bonded dimolybdenum phosphate complexes in acidic solution: photoinduced two-electron oxidation of $Mo_2(HPO_4)_4^{4-}$ ion / D.G. Nocera, I.J. Chang // J. Am. Chem. Soc. – 1987.– Vol. 109, No 16. – P. 4901-4907.
5. Столяренко В.Г. Тетрафосфаты дирения(III). Синтез и поведение в растворах / В.Г. Столяренко, А.В. Штеменко // Вопросы химии и хим. технологии. – 2003. – № 6. – С. 4-6.
6. Скопенко В.В. Координаційна хімія / В.В. Скопенко, Л.І. Саранський. – К.: Либідь, 2004. – 424 с.
7. Cotton F.A. Compounds containing dirhenium(III) octahalide anions / F.A. Cotton, N.F. Curtis, B.F. Jonson, W.R. Robinson // Inorg. chem. – 1965. – Vol. 4, No 3. – P. 326-330.
8. Синтез и свойства биядерных галогенокарбоксилатов рения(III) / А.В. Штеменко, А.С. Котельникова, Б.А. Бовыкин, И.Ф.Голованева // Журн. неорган. химии. – 1986. – № 2. – С. 399-405.
9. Cotton F.A. Synthesis and structural characterization of sodium tetra-μ-sulfato-dirhenate(III) octahydrate / F.A. Cotton, B.A. Frenz, L.W. Shive // Inorg. Chem. – 1975. – Vol. 14. – P. 649-652.
10. Спицын В.И. Гидролиз кластерного аниона $Tc_2Cl_8^{3-}$ в солянокислых растворах / В.И. Спицын, А.Ф. Кузина, С.В. Крючков // Журн. неорган. химии. – 1980. – Т. 25, № 3. – С. 741-745.
11. Барановский И.Б. Исследование фосфатных комплексов родия(II) / И.Б. Барановский, С.С. Абдулаев, Г.Я. Мазо // Журн. неорган. химии. – 1981. – Т. 26, № 7.– С. 1715-1726.
12. Кукушкин Ю.Н. Химия координационных соединений / Ю.Н. Кукушкин. – М.: Высш. шк., 1985. – 455 с.
13. Антропов Л.И. Теоретическая электрохимия / Л.И. Антропов. – М.: Высш. шк., 1975. – 568 с.
14. Иванов В.Б. Подавление роста комплексами платины (II) в зависимости от их строения / В.Б. Иванов, П.А. Чельцов, Р.Н. Щелоков // Доклады АН СССР. – 1976. – Т. 229, № 2. – С. 484-487.
15. Синтез, строение и свойства фосфатных производных дирения(III) / А.В. Штеменко, В.Г. Столяренко, О.В. Берзенина, Н.И. Штеменко // Вопр. химии и хим. технологии. – 2007. – № 5. – С. 39-48.

Надійшло до редакції 28.09.2011 р.

УДК 547.752

ПИРРОЛО[3,4-*C*]ПИРИЛИЕВЫЕ СОЛИ. СИНТЕЗ И РЕЦИКЛИЗАЦИЯ АЦЕТАТОМ АММОНИЯ

*О. И. Харанеко**, *А. О. Харанеко, С. Л. Богза*
**Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАН Украины, г. Донецк*

Разработан метод синтеза новой группы пирилиевых солей – пирроло[3,4-*c*]пирилиевых солей. Изучены реакции пирролопирилиевого катиона с ацетатом аммония. Предложен новый подход к синтезу пирроло[3,4-*c*]пиридинов.

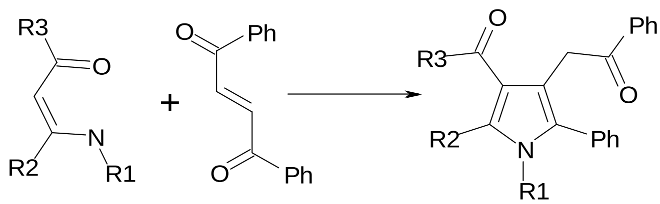
Ключевые слова: 4-этокси-3-метил-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат; 4-этокси-2,3-диметил-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат; 7,7-диметил-2,4-дифенил-5,6,7,8-тетрагидроиндол[4,3,2 -*cd*]пирилий перхлорат; 2-бензил-3,4-диметил-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат; 2,3,4-триметил-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат; 3,4-диметил-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат; 3,4-диметил-2(4-метилфенил)-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]-пирилий перхлорат; 4-этокси-2,3-диметил-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]пиридин; 2,3,4-триметил-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]пиридин; 3,4-диметил-1,6-дифенил-2Н-пирроло[3,4-*c*]пиридин.

Введение. Соли пирилия имеют важное значение для синтетической органической химии. Благодаря высокой реакционной способности атома кислорода в этих солях и легкости его замещения на другие гетероатомы (азот, серу, фосфор) и углерод соли пирилия широко используются в синтезе разнообразных производных гетеро- и карбоциклических соединений (пиридина, хинолина, изохинолина, карболина, фурана, индола, бензола, нафталина и др.) [1], получить которые другими методами бывает невозможным, используются в производстве светоизлучающих полимеров и светодиодов на их основе [2], красителей, ингибиторов коррозии металлов, эффективных биологически активных соединений [1, 3]. Поэтому развитие методов синтеза пирилиевых солей является актуальной задачей.

Химия пирилиевых солей (синтез и реакции) была предметом исследований еще в прошлом веке. Этой теме посвящены обзоры и монографии [1, 3-5]. Накоплен большой материал по химии моноциклических пирилиевых структур, их бензо- и гетероконденсированных производных [6, 7]. Вместе с тем, данные по химии пирилиевых структур с аннелированным пиррольным заместителем неизвестны. Однозначно предугадать химию таких соединений, влияние пиррольного цикла на их свойства в результате изменения электронных свойств системы нельзя.

Поэтому целью настоящей работы является поиск методов синтеза пирролопирилиевых солей и изучение их способности к реакциям рециклизации.

Основной раздел. Один из методов синтеза пирилиевых солей основан на реакции циклизации 1,5-дикарбонильных соединений в присутствии хлорной кислоты [5]. В качестве исходных соединений мы использовали пирролы с ацильными заместителями в положениях 3 и 4 пиррольного ядра. Синтез таких пирролов 3 проводили по методу, предложенному в [8]:



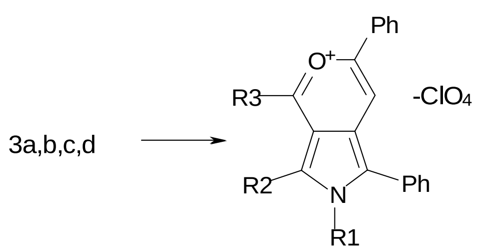
1 2 3

a: R1=H; R2=Me; R3=OEt
b: R1=Me; R2=Me; R3=OEt
c: R1=H; R2-R3 = -CH_2-$C(CH_3)_2$-CH_2-
d: R1= Bz; R2=Me; R3=Me

Схема 1

Выход 3a-d составляет 65-75 %. Обработка соединений 3a-d смесью 70 %-ной хлорной кислоты и уксусного ангидрида приводит к образованию пирилиевых солей 4a-d с выходом 25-90 %.

Реакция проходит в мягких условиях при комнатной температуре. Полученные пирилиевые соли – это окрашенные кристаллические вещества, стабильные при хранении. В ИК-спектрах этих соединений присутствует интенсивная полоса поглощения пирилиевого катиона 1620 см$^{-1}$ и перхлорат аниона 1080 см$^{-1}$.



4a,b,c,d

Схема 2

Выделить в индивидуальном виде пирролодикетоны с другими заместителями нам не удалось (схема 3). Одна из вероятных причин этого – высокая растворимость таких дикетонов в органических растворителях. Синтез пирилиевых солей 4e-g на их основе проводили без выделения дикетонов 3. Выход 4e-g составляет 52 – 64 %.

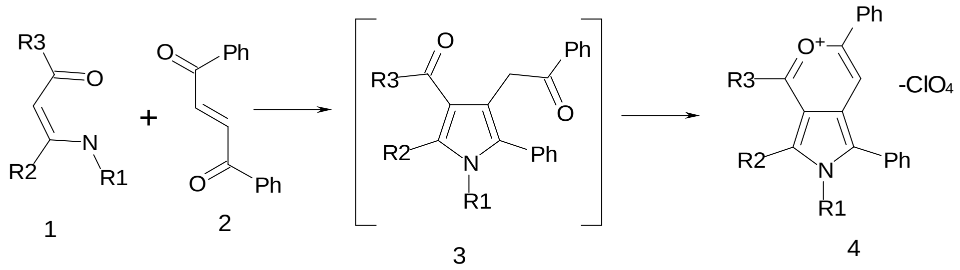


Схема 3. e: R1=Me; R2=Me; R3=Me. f: R1=H; R2=Me; R3=Me. g: R1=p-Tol; R2=Me; R3=Me

Одна из характерных реакций пирилиевых солей – реакция рециклизации – образование новой циклической системы в результате взаимодействия с нуклеофилами. Мы нашли, что полученные пирилиевые соли взаимодействуют с ацетатом аммония с образованием пирроло[3,4-*c*]пиридинов. Выход 5b,e,f составляет 53 - 91 %.

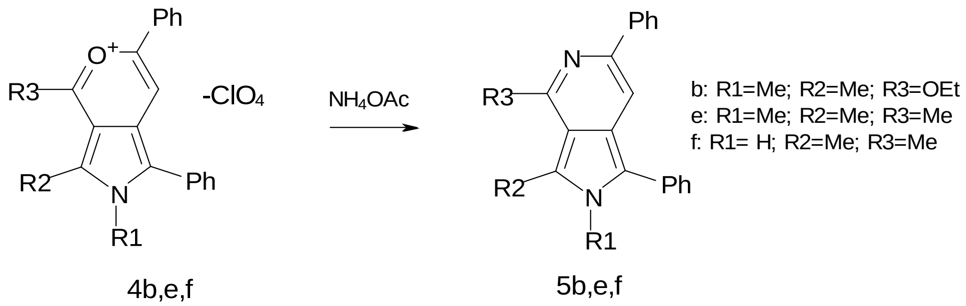


Схема 4

Образование пирроло[3,4-*c*]пиридинов 5b,e,f, из соединений 4b,e,f является косвенным доказательством структуры последних.

Экспериментальная часть. Структура всех полученных соединений охарактеризована и подтверждена ЯМР и ИК-спектрами. Спектры ЯМР записаны на приборе BRUKER AVANCE (400 МГц) в CD_3CN или в ДМСО - d_6, внутренний стандарт ТМС**.** ИК-спектры – на приборе IR-75 в таблетке KBr. Температуры плавления синтезированных соединений определены на нагревательном приборе типа Boetius и не подвергались коррекции.

4-Этокси-3-метил-1,6-дифенил-2H-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат (4a). 4-Этокси-2,3-диметил-1,6-дифенил-2H-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат (4b). 7,7-Диметил-2,4-дифенил-5,6,7,8-тетрагидроиндоло[4,3,2-*cd*]пирилий перхлорат (4c). 2-Бензил-3,4-метил-1,6-дифенил-2H-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат (4d).

К 1.39 ммоль (3a) в 18.11ммоль $(Ac)_2O$ добавили охлажденную на ледяной бане смесь 18.11ммоль $(Ac)_2O$ и 2.32ммоль 70 %-ной $HClO_4$. Полученную смесь перемешивалась при комнатной температуре в течение часа. Затем прибавили 10 мл уксусной кислоты, выпавший осадок отфильтровали, промыли уксусной кислотой и диэтиловым эфиром.

Выход 4a – 68%.$T_{пл.}$>400^{0}C. Спектр ЯМР ^{1}H (CD_3CN): 7.86 (2H, дд, J = 6.4, j = 1.6, C=CH); 7.63-7.57(3H, м, C=CH); 7.54-7.50(5H, м, C=CH); 7.49 (1H, c, C=CH); 5.11 (2H, к, J = 6.4, CH_2); 3.75 (3H, c, CH_3), 2.81 (3H, c, CH_3), 1.67 (3H, т, J = 6.8, CH_3). ИК см$^{-1}$: 3400; 1620; 1570; 1330; 1080. ЯМР C^{13}:142.9; 132.0; 131.1; 130.9; 130.2; 128.2; 126.7; 104.4; 73.1; 14.9; 14.2.

Выход 4b –85%. $T_{пл}$ 160-161^{0}C (с разложением). Спектр ЯМР ^{1}H (CD_3CN): 7.86 (2H, т, J = 6.4, C=CH); 7.63-7.57 (3H, м, C=CH); 7.54-7.50 (5H, м, C=CH); 7.49 (1H, c, C=CH); 5.11 (2H, к, J = 8, CH_2); 3.57 (3H, c, CH_3); 2.81 (3H, c, CH_3); 1.67 (3H, к, J = 6.8, CH_3).

Выход 4c –25% . $T_{пл}$ 226-227 ^{0}C (с разложением). Спектр ЯМР ^{1}H (CD_3CN): 12.24 (1H, c, NH); 8.07-7.94 (3H, м, C=CH); 7.84 (2H, д, J = 7.2, C=CH); 7.62-7.55(5H, м, C=CH); 7.48 (1H, т, J = 6.8, C=CH); 3.27 (2H, c, CH_2); 3.23 (2H, c, CH_2); 1.33 (6H, c, $2CH_3$). ИК см$^{-1}$: 3400; 1660; 1080.

Выход 4d –91% $T_{пл.}$ 182-183 ^{0}C. Спектр ЯМР ^{1}H ($CDCl_3$): 7.86 (2H, дд, J = 3.6, j=2.0, C=CH); 7.53-7.47 (7H, м, C=CH); 7.42-7.41 (2H, м, C=CH); 7.36-7.33 (3H, м, C=CH); 6.93 (2H, д, J =6.8, C=CH); 5.6 (2H, c, CH_2); 3.35 (3H, c, CH_3);3.01 (3H, c, CH_3). ИК см$^{-1}$: 1600; 1080.

2,3,4-триметил-1,6-дифенил-2H-пирроло[3,4-*c*]прилий перхлорат (4e). 3,4-Диметил-1,6-дифенил-2H-пирроло[3,4-*c*]прилий перхлорат (4f). 3,4-Диметил-2(4-метилфенил)-1,6-дифенил-2H-пирроло[3,4-*c*]пирилий перхлорат (4g).

Массу, образовавшуюся при нагревании 21.19 ммоль (2) и 21.19 ммоль (1) при температуре 150^0С, охладили до комнатной температуры и растворили в $(Ac)_2O$. К полученному раствору прибавили при перемешивании раствор 42.37 ммоль 70 %-ной $HClO_4$ в 42.37 ммоль $(Ac)_2O$. Смесь перемешивали в течение 30 мин при комнатной температуре, затем прибавили 10 мл уксусной кислоты. Выпавший осадок отфильтровали, промыли уксусной кислотой и диэтиловым эфиром.

Выход (4e) – 64%. $T_{пл.}$ 200 ^{0}С. Спектр ЯМР ^{1}H (CD_3CN): 7.90 (2H, дд, J = 6.0, j=2.0, C=CH); 7.61 (4H, 4т, J = 9.6, C=CH); 7.55-7.48(5H, м, C=CH); 3.85 (3H, с, CH_3); 3.21 (3H, с, CH_3); 2.95 (3H, с, CH_3). ИК см$^{-1}$: 3400; 1600; 1080.

Выход (4f) – 57%. $T_{пл.}$ 216-217 ^{0}С (с разложением). Спектр ЯМР ^{1}H (CD_3CN): 12.32 (1H, с, NH); 8.07 (1H, с, C=CH); 8.01 (2H, д, J = 6.4, C=CH); 7.78 (2H, д, J = 7.6, C=CH); 7.61-7.55 (5H, м, C=CH); 7.48 (1H, т, J = 7.2, C=CH); 3.18 (3H, с, CH_3); 3.00 (3H, с, CH_3).
ИК см$^{-1}$: 1600; 1080.

Выход (4g) – 52%. $T_{пл.}$ 168-169 ^{0}С. Спектр ЯМР ^{1}H (CD_3CN): 7.97 (2H, д, J = 6.4, C=CH); 7.79 (1H, с, C=CH); 7.57-7.53 (3H, м, C=CH); 7.38-7.35 (5H, м, C=CH); 7.28-7.23 (4H, м, C=CH); 3.27 (3H, с,CH3); 2.77 (3H, с, CH_3); 2.40 (3H, с, CH_3). ЯМР ^{13}C: 183.0; 155.4; 147.4; 142.8; 134.5; 132.3; 132.2; 132.0; 131.9; 130.9; 130.6; 130.4; 129.6; 129.0 127.0; 120.7; 118.4; 106.0; 22.9; 21.9; 16.0.

4-Этокси-2,3-диметил-1,6-дифенил-2*H*-пирроло[3,4-*c*]пиридин (5b). 2,3,4-Триметил-1,6-дифенил-2H-пирроло[3,4-*c*]пиридин (5e). 3,4-Диметил-1,6-дифенил-2H-пирроло[3,4-*c*]пиридин (5f).

К 6.49 ммоль ацетата аммония в 10 мл ацетонитрила добавили 1.16 ммоль пирилиевой соли. Раствор перемешивали на магнитной мешалке при комнатной температуре Осадок, образующийся после добавления воды, отфильтровали, промыли небольшим количеством воды.

Для рециклизации (4e и 4f) в качестве растворителя использовали уксусную кислоту, реакцию проводили при нагревании.

Выход 5b - 80%. $T_{пл}$ 257-263 ^{0}С. Спектр ЯМР ^{1}H (DMSO-d_6): 7.93 (2H, д, J = 7.6, C=CH); 7.52-7.46 (4H, м, C=CH); 7.36-7.29 (4H, м, C=CH); 7.18 (1H, т, J = 7.6, C=CH); 4.64 (2H, к, J = 7.2, CH_2); 3.81 (3H, с, CH_3); 2.81 (3H, с, CH_3); 1.54 (3H, т, J = 7.2, CH_3). ИК см$^{-1}$: 1700; 1600; 1300.

Выход 5e – 91%. $T_{пл}$ 197-198 ^{0}С. Спектр ЯМР ^{1}H (DMSO-d_6): 13.65 (1H, с, NH); 7.73 (2H, дс, J = 6.4, j=1.6, C=CH); 7.58-7,49 (9H, м, C=CH); 3.99 (3H, с, CH_3); 3.22 (3H, с, CH_3); 3.00 (3H, с, CH_3). ЯМР ^{13}C: 158.4; 138.2; 135.4; 134.9; 132.1; 131.3; 131.2; 131.0; 130.8; 130.4; 129.7; 127.7; 122.8; 116.7; 113.9; 36.1; 21.1; 15.1.

Выход 5f - 53 %. $T_{пл}$ 219-220 ^{0}С. Спектр ЯМР ^{1}H (DMSO-d_6): 13.71 (1H, с, NH); 7.89 (1H, с, C=CH); 7.81 (2H, д, J = 7.2, C=CH); 7.75 (2H, д, J = 8.0, C=CH); 7.56-7.47 (5H, м, C=CH); 7.31 (1H, т, J = 7.2, C=CH); 3.11 (3H, с, CH_3); 2.96 (3H, с, CH_3). ЯМР ^{13}C: 159.0; 139.4; 136.3; 134.0; 132.9; 131.0; 130.7; 129.6; 128.7; 128.1; 128.1; 123.8; 122.2; 118.3; 114.2; 21.2; 15.8. ИК см$^{-1}$: 3240; 1600;1060.

Выводы. В настоящей работе предложены методы синтеза неизвестных ранее пирроло[3,4-*c*]пирилиевых солей и показана возможность их рециклизации ацетатом аммония с образованием пирроло[3,4-*c*]пиридинов. Высокие выходы пирроло[3,4-*c*]пирилиевых солей и пирролопиридинов на их основе, простота в выполнении позволяют рекомендовать приведенные в статье методы синтеза как препаративные в синтетической органической химии этих соединений.

РЕЗЮМЕ

Розроблено метод синтезу нової групи пірилієвих солей– піроло[3,4-*c*]пірилієвих солей. Вивчено реакції піролопірилієвого катіону з ацетатом амонію. Запропоновано новий підхід до синтезу піроло[3,4-*c*]піридинів

Ключові слова: 4-етокси-3-метил-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]пірилій перхлорат; 4-етокси-2,3-диметил-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]пірилій перхлорат; 7,7-диметил-2,4-дифеніл-5,6,7,8-тетрагідроіндол[4,3,2-*cd*]пірилій перхлорат; 2-бензил-3,4-диметил-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]пірилій перхлорат; 2,3,4-триметил-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]пірилій перхлорат; 3,4-диметил-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]пірилій перхлорат; 3,4-диметил-2(4-метилфеніл)-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]-пірилій перхлорат; 4-етокси-2,3-диметил-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]піридин; 2,3,4-триметил-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]піридин; 3,4-диметил-1,6-дифеніл-2H-піроло[3,4-*c*]піридин.

SUMMARY

Has been elaborated the synthesis method for novel group of pyrylium salts – pyrrolo[3,4-*c*]pyrylium salts. Pyrrolopyrylium cations' reactions with ammonium acetate have been investigation. New method for pyrrolo[3,4-*c*]pyridines synthesis has been proposed.

*Keywords:*4-ethoxy-3-methyl-1,6-diphenyl-2H-pyrano[3,4-*c*]pyrrol-5-ium, 4-ethoxy-2,3-dimethyl-1,6-diphenyl-2H-pyrano[3,4-*c*]pyrrol-5-ium, 5,7,7-trimethyl-2,4-diphenyl-5,6,7,8-tetrahydropyrano[4,3,2-*cd*]indol-1-ium, 2-benzyl-3,4-dimethyl-1,6-diphenyl-2H-pyrano[3,4-*c*]pyrrol-5-ium, 2,3,4-trimethyl-1,6-diphenyl-2H-pyrano[3,4-*c*]pyrrol-5-ium, 3,4-dimethyl-1,6-diphenyl-2H-pyrano[3,4-*c*]pyrrol-5-ium, 3,4-dimethyl-2-(4-methylphenyl)-1,6-diphenyl-2H-pyrano[3,4-*c*]pyr-

rol-5-ium, 4-ethoxy-2,3-dimethyl-1,6-diphenyl-2H-pyrrolo[3,4-*c*]pyridine, 2,3,4-trimethyl-1,6-diphenyl-2H-pyrrolo[3,4-*c*] pyridine, 3,4-dimethyl-1,6-diphenyl-2H-pyrrolo[3,4-*c*]pyridine.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дорофеенко Г.Н. Препаративная химия пирилиевых солей / Г.Н.Дорофеенко, Е.И.Садекова, Е.В.Кузнецов. – Ростов н/Д.: Ростовский университет, 1972. – 234 с.
2. Громов С.П. Успехи в синтезе 4-арил- и 4-гетарилпиридинов / С.П.Громов, М.Ф.Фомина // Усп. химии – 2008. – Т. 77, вып. 12. – С. 1129-1152.
3. Звездина Э.А. Реакции солей пирилия с азотсодержащими нуклеофилами / Э.А Звездина, М.П. Жданова, Г.Н.Дорофеенко // Усп.химии. – 1982. – Т. 51, вып. 5. – С. 817-847.
4. Balaban A.T. Pyrylium salts. Part 1. Syntheses / A.T.Balaban, W.Schroth, G.Fisher // Advances in Heterocycles Chemistry. – 1969. – Vol. 10. – P. 241-326.
5. Дорофеенко Г.Н. Хлорная кислота и ее соединения в органическом синтезе / Г.Н.Дорофеенко, Ю.А.Жданов, В.И.Дуленко, С.В.Кривун. – Ростов н/Д.: Ростовский университет, 1965. – 148 с.
6. Толкунов В.С. Реакции солей 3-ариламинобензофуро-, 3-ариламинобензотиено и 3-ариламиноиндоло[2,3-*c*]пирилия с нуклеофильными агентами / В.С.Толкунов , Ю.Б.Высоцкий , О.А.Горбань , С.В.Шишкина , О.В.Шишкин , Р.И.Зубатюк , В.И.Дуленко // Химия гетероцикл. соедин. – 2005. – № 4. – С. 601-612.
7. Kibalny A. V. New high-effective neuroprotector – carbacetam / A. V. Kibalny, V.I. Dulenko, K.M. Khabarov // Drugs of the future. – Suppl. A. – Brussel – 2010. – Vol. 35. – P. 198.
8. Rehn Sanley Synthesis of indole oxingole dervatives incorporating pyrrolidino, pyrrolo or imidazolo moieties / Sanley Rehn // – Stocholm: Karolinska University Press. – 2004. – 38 p.

Поступила в редакцию 01.02.2012 г.

УДК 543:422

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОБОПОДГОТОВКИ ПРИ АТОМНО-АБСОРБЦИОННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ ЖЕЛЕЗА, ЦИНКА И МЕДИ В СОКАХ

Н. Д. Щепина, А. С. Алемасова

Исследованы матричные помехи при прямом атомно-абсорбционном определении Fe, Cu, Zn в соках и разработана ускоренная методика их определения с метрологическими характеристиками, не уступающими стандартной методике.

Ключевые слова: фруктовые соки, атомно-абсорбционный метод анализа, железо, цинк, медь.

Введение. Фруктовые соки и другие напитки являются неотъемлемой частью рациона здорового питания человека. Они богаты витаминами, питательными веществами и микроэлементами, в частности, такими как железо, медь и цинк. Эти элементы являются необходимыми для нормального функционирования организма человека, так как принимают непосредственное участие в обмене веществ. Их недостаток или избыточное количество могут вызвать различные заболевания, поэтому строгий контроль содержания вышеперечисленных элементов в продуктах питания является необходимым. Атомно-абсорбционный метод анализа является одним из основных методов определения железа, цинка и меди в пищевых продуктах и напитках. Многокомпонентная органическая матрица пищевых продуктов негативно влияет на предел обнаружения и на метрологические характеристики методик. В связи с этим необходимо проводить подготовку пробы путем ее минерализации способом сухого или мокрого озоления. Традиционно при анализе фруктовых соков и различных напитков используют длительную и трудоемкую пробоподготовку, которая включает стадии выпаривания, сухого или мокрого озоления и растворения золы в азотной кислоте [1 – 5]. Этот процесс занимает от 3 до 16 часов, что делает практически невозможным применение данной методики в потоковом контроле продукции.

Целью данной работы было исследование матричных помех и способов их устранения при пламенном атомно-абсорбционном определении железа, цинка, меди и разработка ускоренной атомно-абсорбционной методики определения содержания этих элементов в осветленных соках, по своим метрологическим характеристикам не уступающей стандартной методике.

Экспериментальная часть. При прямом атомно-абсорбционном анализе соков высокое содержание углеводов приводит к увеличению вязкости раствора, что снижает скорость поступления раствора в пламенный атомизатор атомно-абсорбционного спектрофотометра. Определяемые элементы связаны в комплексы с органическими кислотами – это затрудняет образование атомного пара и приводит к снижению аналитического сигнала. При увеличении концентрации матрицы в пламени образуется сухой аэрозоль с большим размером частиц, что приводит к затруднению испарения соединений определяемого элемента из крупных частиц.

Согласно химическому составу фруктовых соков [6] одними из их основных компонентов являются моно- и дисахариды, содержание которых может достигать до 30 г/100 мл. Для того, чтобы установить характер и степень матричных влияний на абсорбционность Cu, Fe, Zn в качестве матричных компонентов использовали дисахарид сахарозу $C_{12}H_{22}O_{11}$ и моносахарид глюкозу $C_6H_{12}O_6$.

Методика работы была следующей: готовили серию растворов сахарозы и глюкозы с содержанием 2,5 г/25 мл и 5 г/25 мл. Аналогичным образом готовили растворы глюкозы. Во все приготовленные растворы вносили аликвоты стандартных растворов определяемых металлов Fe(III), Cu(II), Zn(II). Конечная концентрация металлов в растворе составила (мкг/мл): 4,0; 1,0; 1,0 соответственно. Растворы разбавляли до метки дистиллированной водой и перемешивали. Учитывали холостой опыт.

Измерение проводили на атомно-абсорбционном спектрофотометре «Сатурн-3» в ацетилен-воздушном пламени при разных расходах ацетилена (обедненное и обогащенное пламя) при длине волны и ширине щели монохроматора соответственно для железа – 248,3 нм и 0,1 нм; для цинка – 213,9 нм и 0,5 нм; для меди – 324,7 и 0,1 нм. Величину аналитического сигнала регистрировали в единицах интегральной абсорбции по цифровому интегратору. Полученные данные представлены в табл. 1, в котрой введены следующие обозначения: * – расход C_2H_2 составляет 150 л/ч; ** – расход C_2H_2 составляет 90 л/ч; A – абсорбционность определяемых элементов в присутствии добавки моно- или дисахарида; A_0 – абсорбционность определяемых элементов в безматричных растворах.

Из табл. 1 видно, что глюкоза и сахароза приводят к снижению абсорбционности исследуемых элементов. Депрессирующий эффект более выражен для сахарозы. Причина снижения сигнала состоит в увеличении вязкости раствора, что делает капли аэрозоля кинетически более инертными и влияет на эффективность и скорость распыления исследуемого раствора в пламя. Известно, что скорость распыления раствора в пламя и, следовательно, количество вносимого в единицу времени аэрозоля в аналитическую

Таблица 1

Влияние моно- и дисахаридов на аналитический сигнал Cu, Fe, Zn

Добавка	A/A_0					
	Fe		Cu		Zn	
	обогащен.* пламя	обеднен.** пламя	обогащен. пламя	обеднен. пламя	обогащен. пламя	обеднен. пламя
Глюкоза 2,5 г/25 мл	0,79	0,88	0,87	0,88	0,79	0,87
Глюкоза 5 г/25 мл	0,67	0,63	0,75	0,77	0,71	0,80
Сахароза 2,5 г/25 мл	0,75	0,72	0,85	0,77	0,98	0,90
Сахароза 5 г/25 мл	0,53	0,57	0,74	0,77	0,89	0,87

зону, определяется формулой Пуазейля и зависит от параметров капилляра (перепад давления по длине капилляра распылителя, радиус и длина капилляра), которые, как правило, постоянны, и от вязкости раствора. С увеличением вязкости раствора скорость его распыления в пламя уменьшается.

Для подтверждения этого была измерена относительная вязкость (ОВ) модельных растворов вискозиметрическим методом при помощи капиллярного вискозиметра Оствальда по стандартной методике [7]. Полученные данные представлены в табл. 2.

Как видно из табл. 2 вязкость исследуемых модельных растворов растет с увеличением концентрации растворенных в растворе сахаридов, а вязкость анализируемого сока выше, чем у раствора с концентрацией сахарозы 2,5 г/25 мл.

Таблица 2

Модельный раствор	ОВ $\times 10^{-3}$, Па·с
Раствор глюкозы, 2,5 г/25 мл	1,26
Раствор сахарозы, 2,5 г/25 мл	1,28
Раствор глюкозы, 5 г/25 мл	1,62
Раствор сахарозы, 5 г/25 мл	1,82
Сок яблочный осветленный	1,45

Как было указано выше, для устранения влияний органической матрицы применяют методы кислотного разложения проб. Нами было исследовано влияние некоторых кислот, которые добавляют при стандартной процедуре кислотного вскрытия, на величину атомно-абсорбционного сигнала железа, меди и цинка. Были использованы кислоты–окислители (азотная, серная) и кислоты-комплексообразователи (соляная, фосфорная).

Методика исследования была следующей. Готовили серии растворов, для чего в мерные колбы вместимостью 25 мл вносили 12,5 мл исследуемого сока, аликвоты стандартных растворов железа, меди и цинка. Добавляли аликвоты исследуемой кислоты с тем, чтобы ее концентрация варьировалась в пределах от 0 до 5 моль/л. Разбавляли до метки дистиллированной водой. Результаты влияния добавки кислот на абсорбционность Cu, Fe, Zn в матрице яблочного сока представлены в табл. 3, в которой введены следующие обозначения: A_0 – абсорбционность определяемых элементов в матричном растворе (сок) без кислоты; А – абсорбционность определяемых элементов в присутствии добавки кислоты, КД – концентрация добавки (моль/л).

Видно, что разбавленные (с концентрацией ≤ 1 М) соляная и азотная кислоты существенно не влияют на аналитический сигнал железа, цинка и меди, а 5 М кислоты снижают поглощение исследуемых элементов примерно на 35%. Фосфорная кислота в количествах до 0,5 моль/л не влияет на сигнал железа, а при росте концентрации кислоты сигнал железа падает, так как в конденсированной фазе образуется стойкое соединение железа с фосфорной кислотой. Наибольшее депрессирующее влияние на атомно-абсорбционный сигнал железа, меди и цинка оказывает серная кислота. Причиной этого является, вероятно, повышенная вязкость серной кислоты (24,2 мПа·с) по сравнению с растворами элементов в азотной (0,8 мПа·с) и соляной (1,7 мПа·с) кислотах, что приводит к снижению скорости поступления аэрозоля в пламя и уменьшению аналитического сигнала.

Таблица 3

Добавка	КД	A/A_0		
		Fe	Cu	Zn
Азотная кислота	0,5	0,97	0,98	0,98
	1	0,92	0,92	0,92
	5	0,74	0,65	0,65
Соляная кислота	0,5	0,96	0,97	0,96
	1	0,91	0,92	0,91
	5	0,60	0,64	0,60
Фосфорная кислота	0,5	0,95	0,97	0,98
	1	0,80	0,85	0,87
	5	0,50	0,65	0,70
Серная кислота	0,5	0,91	0,89	0,88
	1	0,75	0,74	0,72
	5	0,40	0,42	0,48

Одним из способов снижения матричных помех в атомно-абсорбционном анализе является разбавление раствора (если позволяет предел обнаружения элемента). С другой стороны, в атомно- абсорбционном анализе наблюдается повышение чувствительности определения большинства элементов с введением некоторых органических добавок в анализируемый раствор [8]. Это связано в первую очередь с увеличением дисперсности аэрозоля и возрастанием эффективности распыления раствора из-за изменения плотности, вязкости и поверхностного натяжения раствора. Кроме того, введение органических веществ изменяет состав топливной смеси пламени, смещает ее в восстановительную область, что приводит к сдвигу равновесия ряда химических реакций в пламени.

С целью устранения матричных помех нами было исследовано влияние органических добавок на абсорбционность определяемых металлов при их определении во фруктовых соках. В качестве модифицирующих добавок использовали этиловый и изопропиловый спирты, ацетон. При выборе органических растворителей учитывали безопасность, стоимость, распространенность, растворимость в воде.

Методика исследования была следующей. Готовили серии растворов, для чего в мерные колбы вместимостью 25 мл вносили 12,5 мл исследуемого сока, аликвоты стандартных растворов железа, меди и цинка, аликвоту 10 мл одного из органических растворителей (что соответствует 40% содержанию). До метки разбавляли дистиллированной водой. Полученные растворы использовали для измерения аналитического сигнала железа, меди и цинка. Результаты измерений влияния добавки органических растворителей (40 % об.) на абсорбционность Cu, Fe, Zn в матрице яблочного сока представлены в табл. 4, в которой: A_0 – абсорбционность определяемых элементов в матричном растворе (сок) без добавки реактива; A – абсорбционность определяемых элементов в присутствии добавки органического растворителя.

Таблица 4

Добавка	Физические свойства растворителей (при T = 20°C) [9]		A/A_0		
	$T_{кип.}$, °C	η, мПа·с	Fe	Cu	Zn
Изопропанол	82,4	2,39	0,85	0,90	0,95
Этанол	78,2	1,20	1,1	1,1	1,1
Ацетон	56,2	0,32	1,6	1,6	1,7

Видно, что в отличие от кислот, органические растворители наоборот увеличивают поглощение всех исследуемых элементов. Из данных табл. 3 и 4 видно, что сигналы определяемых элементов увеличиваются в ряду неорганические кислоты - спирты – кетоны. Вероятно, это связано с тем, что органические вещества, вводимые в пламя, способны образовывать комплексы с определяемыми элементами (сольваты). Десольватация протекает быстрее, чем дегидратация и значительно лучше происходит для кетонов и эфиров, чем для спиртов и кислот. Из спиртов наименее эффективным является изопропиловый спирт. А наиболее эффективной добавкой является ацетон. Кроме того, из результатов, представленных в табл. 4, явно прослеживается зависимость эффективности добавки от вязкости раствора и температуры кипения. Видно, что у самой эффективной добавки – ацетона наименьшая величина вязкости раствора и самая низкая температура кипения.

Все проведенные исследования стали основой для разработки новой ускоренной атомно-абсорбционной методики определения Cu, Fe, Zn во фруктовых соках. Суть методики заключается в непосредственном определении биогенных металлов из пробы сока с добавлением к ней 40 % ацетона без предварительной длительной пробоподготовки методом сухой или мокрой минерализации.

Аликвоты сока объемом 12,5 мл вносили в мерные колбы емкостью 25 мл, добавляли 10 мл ацетона, разбавляли до метки дистиллированной водой и тщательно перемешивали. Градуировочный раствор готовили методом добавок. Абсорбционный сигнал определяемых элементов измеряли в воздушно-ацетиленовом пламени в оптимальных условиях. Проверку правильности результатов определения железа, меди и цинка проводили сравнением с результатами определения этих элементов по стандартной методике, предусматривающей разрушение органических веществ пробы при нагревании с азотной концентрированной кислотой с добавлением пероксида водорода по ГОСТ [1]. Результаты определения содержания Fe, Cu, Zn во фруктовых соках (n=5; P=0,95) представлены в табл. 5.

Таблица 5

Объект исследований, технические условия, производитель	Определяемый элемент	Найдено: атомно-абсорбционным методом по разработанной методике		Найдено: атомно-абсорбционным методом по ГОСТ 26929-94 после мокрой минерализации [1]	
		$\overline{C} \pm \frac{t \cdot S}{\sqrt{n}}$, мг/кг	S_r	$\overline{C} \pm \frac{t \cdot S}{\sqrt{n}}$, мг/кг	S_r
Сок яблочный. ТУУ15.322430008.033:2005 ООО«Сандора»	Fe	0,72 ± 0,04	0,045	0,71 ± 0,06	0,071
	Cu	0,26 ± 0,02	0,054	0,25 ± 0,03	0,11
	Zn	0,19 ± 0,02	0,079	0,17 ± 0,03	0,12
Сок вишневый. ТУУ31168558.002-2000 ООО «Регион»	Fe	0,75 ± 0,04	0,043	0,74 ± 0,06	0,067
	Cu	0,30 ± 0,02	0,047	0,29 ± 0,03	0,082
	Zn	0,15 ± 0,01	0,047	0,14 ± 0,02	0,11

Сравнение полученных данных по F-и t-критерию свидетельствует, что результаты, полученные разными методами, принадлежат одной выборке и разница результатов статистически незначима. Разработанная ускоренная методика прямого пламенного атомно-абсорбционного определения железа, цинка и меди в соках позволяет значительно сократить время анализа при сохранении метрологических характеристик воспроизводимости, исключить использование большого количества концентрированных кислот.

Выводы. Таким образом, исследовано влияние различных кислот и органических растворителей на определение железа, цинка, меди. Показаны преимущества ацетона в качестве органической добавки при определении железа, цинка и меди в соках. Разработана прямая, без предварительной минерализации, ускоренная методика пламенного атомно-абсорбционного определения железа, цинка, меди в соках.

РЕЗЮМЕ

Досліджено матричні впливи при прямому атомно-абсорбційному визначенні Fe, Cu, Zn в соках та розроблено прискорену методику їх визначення з метрологічними характеристиками, що не поступаються стандартній методиці.
Ключові слова: фруктові соки , атомно-абсорбційний метод аналізу, залізо, цинк, мідь.

SUMMARY

The matrix influences at Fe, Zn Cu direct atomic absorption determination in juices were investigated and accelerated technique of their determination with metrological characteristics that are not inferior to those of standard technique was developed.
Keywords: fruit juices, atomic absorption method of analysis, iron, zinc, and copper.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сырье и продукты пищевые. Подготовка проб. Минерализация для определения содержания токсичных элементов: ГОСТ 26929-94. – [Дата введения 1996-01-01]. – Минск: Межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации, 2008. – 16 с. – (Межгосударственный стандарт).
2. Okeri H.A. Determination of trace metals presence in drinking water and fruit juice in Benin City, Nigeria / H.A. Okeri, A.C. Mmeremikwu, A.N. Ifeadi // Journal of Applied Biosciences. – 2009. - Vol. 13. – P. 700-702.
3. Krejpcio Z. Safety of Fresh Fruits and Juices Available on the Polish Market as Determined by Heavy Metal Residues / Z. Krejpcio, S. Sionkowski, J. Bartela // Polish Journal of Environmental Studies. – 2005. – Vol. 14, No 6. – P. 877-881.
4. Stafilov T. Atomic Absorption Spectrometry in wine analysis / T. Stafilov, I. Karadjova // Macedonian Journal of Chemistry and Cemical Engineering. – 2009. – Vol. 28, No 1. – P. 17-31.
5. Карпов Ю. А. Методы пробоотбора и пробоподготовки / Ю.А. Карпов, А.П. Савостин. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009. – 243 с.
6. Шобингер У. Фруктовые и овощные соки: научные основы и технологии / У. Шобингер; [пер. с нем. под общ. научн. ред. А.Ю. Колеснова, Н.Ф. Берестеня, А.В. Орещенко]. – СПб: Профессия, 2004. – 640 с.
7. Лабораторные работы и задачи по коллоидной химии / [ред. Фролов Ю.Г., Гродский А.С., Назаров В.В. и др.]. – М.: Химия, 1986. – 216 с.
8. Пупышев А.А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ / Пупышев А.А. – М.: Техносфера, 2009. – 782 с.
9. Краткий справочник химика / [сост. Гороновский И.Т., Назаренко Ю.П., Некряч Е.Ф.; ред. Пилипенко А.Т.]. – К.: Наукова думка, 1987. – 830 с.

Поступила в редакцию 27.01.2012 г.

БІОЛОГІЯ

УДК 612.8.015+577.3

РОЛЬ ИОНОВ ВОДОРОДА В ОРГАНИЗАЦИИ МОЗГОВОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

И. Г. Герасимов
НИИ медицинских проблем семьи Донецкого национального медицинского университета, г. Донецк

Сопоставлены литературные данные о pH в головном мозге, спинномозговой жидкости (СМЖ) и крови человека и животных (млекопитающих). Исходя из установленного факта, заключающегося в том, что в мозге pH ниже, чем в крови (pH в СМЖ, очевидно, занимает промежуточное положение) обсуждается возможность участия ионов водорода в организации мозговой деятельности, в частности, их участие в информационных процессах.

Ключевые слова: мозг, спинномозговая жидкость, кровь, H^+, pH, pH_e, pH_i.

Введение. Одной из важнейших задач физиологии является выяснение механизмов, обеспечивающих высшую нервную деятельность. Уже И. П. Павлов отмечал, что в мозге нет процессов, которые не имели бы материальной основы и что каждый физиологический акт нервной деятельности приурочен к структуре (цит. по [5]). Разумеется, речь здесь идет об анатомических структурах головного мозга. С развитием клеточной и молекулярной биологии стало ясно, что образованиями, обеспечивающими функционирование мозга, являются объединения молекул и клеток, специфично локализованных в соответствующих тканях и организующих их структуру.

Постановка задачи. Рассматривая различные биологические молекулы в качестве потенциальных носителей памяти, отмечают, что ДНК слишком стабильна для кодирования такого рода информации, РНК весьма неустойчива для этих целей, а концентрация пептидов, образующихся при обучении, становится очень низкой, как только информация закрепляется, тогда как память не исчезает. В общем, не обнаружено сколько-нибудь значимых изменений концентрации полимерных или олигомерных молекул, которые исключительно могли бы обеспечить функции мозга, а биохимические изменения, наблюдаемые при протекании нервных процессов, могут быть следствием побочных эффектов, как это имеет место, например, при обучении. Поэтому, в частности обсуждая механизмы памяти, приходят к заключению, что пониманию явлений, происходящих в мозге, существенную пользу может принести их рассмотрение с позиций изменения ионной конъюнктуры.

С такой точки зрения, анализируя вопрос о возможных носителях информации, необходимой для принятия решений человеком приходят к выводу, что известные физические частицы не подчиняются тем законам статистики, которые могли бы обеспечить наблюдаемый результат. На этом основании считают, что необходим поиск других, неизвестных физике, частиц. Однако, насколько нам известно новые элементарные частицы если и обнаруживаются, то вряд ли становятся претендентами на роль носителей информации в мозге, поскольку, будь это иначе, соответствующие сообщения не заставили себя ждать. Оставим в стороне один из аспектов, на основании которых постулировано существование неизвестных физике частиц, обеспечивающих мозговую деятельность, а именно то, что рассматривались процессы в мозге исключительно человека. Принципиальная уникальность последнего по этому поводу не обсуждается, словно природа использовала для функционирования головного мозга человека специально сконструированные лишь для этих целей частицы. Тем не менее по-прежнему выдвигаются гипотезы и на их базе строятся теории, в которых основным постулатом является наличие специальных физических частиц, обеспечивающих в головном мозге человека предельно низкую энергетичность процессов получения, передачи и хранения информации – информационных процессов (речь ведут вообще об их безэнергетичности, безэнтропийности). Но, прежде, чем искать гипотетические частицы, с целью построения правдоподобной модели функционирования головного мозга логично попытаться применить другую статистку (имея ввиду не функцию описания, а закономерности поведения), поскольку частицы даны природой, а статистика придумана человеком, и рассмотреть возможность участия в низкоэнергетических процессах известных частиц, которые могли бы обеспечить высшую нервную деятельность вообще и человека, в частности.

Ионы водорода, как частицы, обеспечивающие информационные процессы. По указанным причинам, необходимо определиться с частицами, которые в принципе могут обеспечивать процессы получения, хранения и передачи информации. С этих позиций в первую очередь следует рассмотреть ионы водорода (H^+). Их уникальность среди других ионов очевидна, на что внимание обращают лишь в специальных случаях. Во-первых, H^+ образуются и расходуются или обеспечивают кислотно-щелочное состояние (pH) среды во многих биохимических процессах. Во-вторых, H^+ – это элементарные частицы (протоны), что принципиально, поскольку их поведение подчиняется законам физики микрочастиц. Втретьих, H^+, согласно расчетам, могут переноситься без затрат энергии под энергетическим барьером, обеспечивая так называемый туннельный эффект. Теми же, что и H^+ преимуществами, исключая, разумеется, способность непосредственного влияния на pH, обладают электроны, зачастую сопряженные с протонами. Собственно, перенос электрона в соответствующих реакциях можно рассматривать, с другой стороны, как перенос протона. Электроны, и вероятно, протоны способны переноситься без затрат энергии посредством туннельного эффекта, который заключается в переходе частицы под энергетически барьером реакции. Туннельный эффект представляется особенно важным для частиц, обеспечивающих информационные процессы, поскольку, повторимся, он протекает без затрат энергии, нарушая тем самым традиционную статистику. Реализация туннельного эффекта при переносе электронов не вызывает сомнений. О возможности проявления этого эффекта в случае переноса H^+ говорят такие авторитеты в области химии протона и биофизики, как Р. Белл (R. Bell), М. Волькенштейн, А. Рубин, Р. Чанг (R. Chang). По таким причинам, H^+ могут претендовать на роль искомых частиц и эту возможность представляется целесообразным обсудить.

Концентрация H^+ ($[H^+]$), как правило, выражается ее отрицательным десятичным логарифмом (pH). Различия pH на 0,5–0,7 единиц, обычно наблюдаемые в разных компартментах клетки и отделах организма, а также при изменении функционального состояния, соответствуют увеличению или уменьшению $[H^+]$ в 5 раз и более. Такие изменения $[H^+]$ сопоставимы разве что с межклеточными градиентами концентраций ионов натрия и калия, которые, впрочем, в отличие от $[H^+]$, вне клетки и внутри нее не претерпевают столь значительных пертурбаций, когда они совместимы с жизнью. Изменение же, например, внеклеточного и внутриклеточного pH (соответственно pH_e и pH_i) на указанные величины – хорошо известные явления, обеспечивающее нормальное функционирование клеток.

Значения pH в мозге и его отделах, а также в спинномозговой жидкости (СМЖ) и в крови человека и животных (млекопитающих) приведены в таблице. Авторы измеряли pH в цельном мозге, его полушариях, центральных отделах, сером и белом веществе, лобных долях, мозжечке, кортексе. Ввиду значительного количества источников, цитируются работы, в которых обнаружено минимальное и максимальное значения показателей. Как видно из таблицы, в головном мозге человека средний pH (по сути pH_e) меньше, чем в крови. В случае крысы наблюдается большой разброс величин pH в мозге и, по данным разных авторов, можно выделить две группы с низкими и высокими значениями показателя. Однако третья группа данных обнимает две первые, причем приведенный диапазон значений найден не одним коллективом авторов. Вполне вероятно, что указанные различия могут быть обусловлены методическим разнообразием приемов определения pH, приводящих к разным результатам. Так или иначе, наблюдаемая для человека закономерность выявляется и в случае животных: pH ниже в мозге, чем в крови (табл.).

Таблица 1

Значения pH в мозге и его отделах, СМЖ и крови человека и животных

Объект	Мозг и его отделы	СМЖ	Кровь
Кошка	7,04–7,09 [2]	–	7,37–7,43 [3]
Кролик	6,00–7,31 [4, 5]	–	7,40–7,46** [6]
Крыса	6,60–7,30 [7, 8]	7,13–7,35 [29, 50]	7,36±0,20** [9]
Морская свинка	7,23–7,29 [10]	–	7,40** [11]
Мышь	7,20±0,03 [12]	–	7,40–7,50*** [13]
Свинья	6,607,00 [14]	7,34±0,01 [15]	7,38±0,01** [15]
Собака	7,10–7,33 [16, 17]	–	7,38±0,02* [18]
Человек	6,86–7,11 [19, 20]	7,27–7,43 [3, 21]	7,26–7,36* [22] 7,36–7,42** [22]

Примечание. Приведены значения pH венозной (*), артериальной (**) или смешанной (***) крови.

В клетках тканей мозга pH_i, как обычно, ниже, чем pH_e, и у человека составляет 6,55–7,04. Авторы оригинальных работ указывают на то, что вариации pH_i в регионах и у отдельных индивидуумов весьма значительны. При этом, например в перфузированном сердце и других хорошо оксигенированных тканях и в эритроцитах, pH_i, который на 0,2–0,5 единицы меньше, чем pH_e, равен примерно 7,2. В разных клетках мозга крысы pH_i 6,95–7,05, а в срезах перфузированного мозга получено даже значение pH_i 6,2±0,1. Однако имеется группа работ, где в клетках мозга крысы pH_i 7,26–7,36. В общем, ситуация аналогична той, которая имеет место для крысы в случае pH_e, что, однако, не нарушает общей закономерности, и $pH_i < pH_e$. В мозге у собаки pH_i 7,05–7,06, у кошки – 7,07±0,04, у свиньи (поросенка) – 6,51±0,14, у кролика – 6,99–7,03, у мыши – 7,10±0,05, что также ниже, чем в крови (табл. 1).

Судя по всему, pH спинномозговой жидкости (СМЖ) занимает промежуточное положение между pH мозга и крови. В данном случае важны параллельные исследования, поскольку, приводимые в справочниках и учебных пособиях значения pH или их диапазоны для СМЖ человека вряд ли отличимы от таковых в крови. (В одной работе в СМЖ человека pH 7,44 вообще необычайно велико, однако здесь следует предполагать методическую погрешность, поскольку этими же авторами при шоке в СМЖ получено pH 7,38, что выше, чем в нормальном состоянии, тогда как шок приводит к уменьшению pH.) В параллельных исследованиях у собаки и свиньи (поросенка), найдены значения pH в СМЖ, которые ниже, чем в артериальной крови.

В плане значений [H+] мозг (и, возможно, СМЖ) представляется уникальным. Так, у человека, например в мышцах, тканевая жидкость которых имеет pH 6,7–6,9, по величине сопоставимый с мозгом, даже в результате физической нагрузки, когда нарабатывается молочная кислота, закисляющая среду, средний pH 7,2 (скелетная мышца) остается более высоким, чем в головном мозге (табл.). Во многих жидкостях организма pH близок к таковому в крови (межклеточная и синовиальная жидкости, лимфа, эякулят, сперма, грудное молоко) или выше (лимфа, желчь, сок панкреатический, тонкого и толстого кишечника, слезы, слизистые выделения матки), порой весьма существенно (жидкость передней камеры глаза, слизистые выделения матки). Даже в серозной жидкости pH больше, чем в крови. В жидкостях, связанных с пищеварением (слюна, желчь, сок тонкого и толстого кишечника), pH может быть более низким по сравнению с кровью (и мозгом) зачастую значительно (желудочный сок, слизистая желудка). Жидкости, выделяемые из организма (моча, пот, выделения мужских и женских половых органов, грудное молоко), по сравнению с кровью имеют более низкий pH, обеспечивающий их бактерицидность. Кроме того, посредством мочи и пота из организма таким образом могут выводиться избыточные H^+ и понижаться $[H^+]$. При этом сок тонкого и толстого кишечника (в зависимости от отдела), желчь (в зависимости от происхождения), слюна, моча и кал (очевидно, в зависимости от режима питания) имеют широкие пределы колебаний pH от кислых до щелочных значений.

Поскольку в мозге не происходит образование экскретируемых из организма жидкостей, гематоэнцефалический барьер препятствует проникновению в мозг бактерий и мышечная работа в нем не совершается, постольку все перечисленные причины, которые могут обеспечивать наблюдаемый pH в мозге, неприложимы к нему. Таким образом, имеется необходимость, по которой в мозге $[H^+]$ в несколько раз выше, по сравнению с другими не специфическими в обсуждаемом смысле органами и тканями. Существенно, что, как известно, наблюдаемый pH головного мозга имеет место безотносительно умственной деятельности. Поэтому единственное, что остается предположить с целью объяснения наблюдаемой закономерности, это необходимость дополнительного количества H^+ в мозге для реализации высшей нервной деятельности, и, возможно, не случайно в мозге плодов, например крысы, по мере созревания pH_i уменьшается.

Имеется достаточно фактов об участии pH в функционировании нейронов. Так (исследования проведены преимущественно на крысах), отмечают, что в мозге существуют нейроны, стимулируемые H^+; от pH_e и/или pH_i зависит мембранный потенциал мотонейронов; нейронная активность сопровождается флуктуациями локального pH и открытием H^+-каналов и это может играть роль в нейротрансмиссии или нейромодуляции; в синаптосомах мозга быстрая деполяризация плазматической мембраны наблюдается при pH 6,0, наиболее вероятно, по мнению авторов оригинальной работы, вследствие ингибирования натриевого насоса и блокады калиевых каналов; уменьшение pH играет важную модуляторную роль в функционировании хемочувствительных сенсорных нейронов; снижение pH_e от 7,4 до 7,0 и ниже генерирует потенциалы действия разных типов нейронов, как предполагают авторы исследования, вследствие ингибированя Na^+/H^+-обменника, хотя не более половины из них в ретротрапециевидных центрах неонатальных крыс реагируют подобным образом и имеет место специфика в локализации пониженного pH (дендриты или сома). При этом прохождение спайка и деполяризация в срезах ствола мозга и в блуждающих нервах приводит к снижению pH на 0,5, а стимуляция хемочувствительных нейронов головного мозга сопровождается уменьшением pH на 0,2 и, напротив, ингибированию другой части этих же нейронов сопутствует увеличение pH на такую же величину. Соответственно, реакция нейронов не наблюдается при pH выше критических величин. Обсуждаются следующие контуры регуляции между нейронами и pH_i: изменение pH_i вследствие нейронной активности и эффект влияния pH_i на электрические свойства нейронов и другие возбудимые клетки.

Кроме того, показано участие H^+ в реализации эффектов нейромодуляторов. Так, уменьшение pH снижает в нейронах ответ на ацетилхолин, тогда как увеличение pH не влияет на действие медиатора. Такая закономерность наблюдается, возможно, потому, что высокий pH_e вовлекает холин в синтез ацетилхолина, а кроме того, по мере снижения pH, начиная с некоторых значений, уменьшается активность ацетилхолинэстеразы. Ухудшение памяти на выполнение задания у крыс-алкоголиков коррелирует с уменьшением выделения ацетилхолина в гиппокампе in vivo, вероятно, потому, что при гидролизе ацетилхолина образуются H^+, которые могут оказаться избыточными. Частота и продолжительность открывания каналов, зависимых от γ-аминомасляной кислоты, регулируется pH_i. В нейронах гиппокампа pH_i опосредует эффекты действия глутамата, снижение pH ингибирует его выделение из изолированных синаптосом, концентрация глутамата в крови мозга коррелирует с pH мозговой ткани, а в синаптосомах с рецепторами глутамата взаимодействуют чувствительные к pH фосфатазы, опосредующие влияние инозитолфосфата.

Наконец, согласно имеющимся данным, экспрессия, по крайней мере некоторых генов, обеспечивающих функционирование головного мозга, может быть связана с pH_e, и наоборот, полиморфизм определенных генов митохондриальной ДНК обусловлен низким pH_i мозга, причем различный полиморфизм одного и того же гена наблюдается при разных значениях pH.

Одним из параметров, определяющих нервную деятельность, является модальность спектра значений показателя, в частности [H^+]. Важно, что уже несколько различных по своим параметрам субстанций при условии, что значения характеризующих их параметров перекрываются, могут давать несметное число комбинаций, обеспечивающих все многообразие параметров целостной системы. В таком аспекте интересно, что эндосомы и лизосомы аксонов имеют бимодальное распределение по pH, в ветвях зон роста аксонов распределение органелл по pH тримодальное, причем в обоих случаях имеется градиент pH вдоль аксона, а в астроцитах интерстициальной области мозга при разных pH обнаруживаются четыре компартмента с разным содержанием внутри- и внеклеточного фосфора.

О влиянии H^+ на психические процессы может указывать также тот факт, что препараты, ингибирующие эпилептоидную активность, приводят, в частности, к снижению pH_i в нейронах гиппокампа. Вообще же у больных эпилепсией pH_i понижен, по крайней мере в лобных долях головного мозга. С другой стороны, психостимуляторы (наркотики), например кокаин, приводят к уменьшению градиента между pH_e и pH_i в культурах дофаминергических нейронов среднего мозга и к увеличению выделения нейротрансмиттеров (показано на дофамине). Кроме того, предполагают, что повышение pH в мозжечке у ВИЧ-инфецированных лиц обусловливает их неврологическую податливость, и замечено, что повышение концентрации молочной кислоты, приводящее к уменьшению pH, в мозге отрицательно влияет на функционирование нейронов.

Приведенные факты указывают на то, что для обеспечения высшей нервной деятельности необходимы H^+ в концентрациях, превышающих таковые в большинстве биологических жидкостей других органов и тканей. Участие H^+ в функционировании головного мозга не вызывает сомнения, однако ответ на вопрос, в состоянии ли они самостоятельно либо в сопряжении с электронами обеспечивать информационные процессы, требует предметных исследований.

РЕЗЮМЕ

Зіставлені літературні данні про pH у головному мозку, спинномозкової рідини (СМР) и крові людини та тварин (ссавців). Виходячи з встановленого факту, який полягає в тому, що у мозку pH нижче, ніж у крові (pH в СМР, очевидно, займає проміжне положення) обговорюються можливості участі іонів водню в організації мозкової діяльності, зокрема, їх участь в інформаційних процесах.

Ключеві слова: мозок, спинномозкова рідина, кров, H^+, pH, pH_e, pH_i.

SUMMARY

Literary data on pH in a brain, cerebrospinal liquid (SL) and blood of human and animals (mammals) are compared. Coming from the found out fact that in a brain pH is below, than in blood (pH in SL, obviously, occupies intermediate state) the possibility of hydrogen ions participation in organization of brain work, in particular, their role in informative processes is discussed.

Keywords: brain, cerebrospinal liquid, blood, informative processes, H^+, pH, pH_e, pH_i.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Данилова Н. Н. Физиология высшей нервной деятельности / Н. Н. Данилова, А. Л. Крылова. – Ростов н/Д: Феникс, 2002. – 288 с.
2. Unterberg A. W. Cerebral energy metabolism following fluid-percussion brain injury in cats / A. W. Unterberg, Andersen, G. D. J. Clarke et al/ // Neurosurg. – 1988. – Vol. 68, № 4. – P. 594 – 600.
3. Song D. Effect of hemorrhagic hypotension on cortical oxygen pressure and striatal extracellular dopamine in cat brain / D. Song, J. Marczis, M. Olano et al. // Neurochem. – 1997. – Res. 22, № 9. – P. 1111 – 1117.
4. Inao S. Production and clearance of lactate from brain tissue, cerebrospinal fluid, and serum following experimental brain injury / S. Inao, A. Marmarou, G. D. Clarke et al. // Neurosurg. – 1988. – Vol. 69, № 5. – P. 736 – 744.
5. Passero S. Platelet embolism in rabbit brain / S. Passero, N. Battistini, C. Fieschi / Stroke. – 1981. – Vol. 12, № 6. – P. 781 – 786.
6. Savel R. H. Protective effects of low tidal volume ventilation in a rabbit model of Pseudomonas aeruginosa-induced acute lung injury / R. H. Savel, E. C. Yao, M. A. Gropper // Crit. Care. Med. – 2001. – Vol. 29, № 2. – P. 392 – 398.
7. Jahde E. pH distributions in transplanted neural tumors and normal tissues of BDIX rats as measured with pH microelectrodes / E. Jahde, M. F. Rajewsky, H. Baumgartl // Cancer. Res. – 1982. – Vol. 42, 4. – P. 1498 – 1504.
8. Nemoto E. M. Brain tissue pH after global brain ischemia and barbiturate loading in rats / E. M. Nemoto, S. Frinak // Stroke. – 1981. – Vol. 12, № 1. – P. 77 – 82..
9. Arnold J. B. In vivo measurement of regional brain and tumor pH using [^{14}C]dimethyloxazolidinedione and quantitative autoradiography. II: Characterization of the extracellular fluid compartment using pH-sensitive microelectrodes and

[^{14}C]sucrose. J / J. B. Arnold, R. P. Kraig, D. A. Rottenberg // Cereb. Blood Flow Metab. – 1986. –Vol. 6, № 4. – P. 435 – 440.
10. Kauppinen R. A. Detection of mobile proteins by proton nuclear magnetic resonance spectroscopy in the guinea pig brain ex vivo and their partial purification / R. A. Kauppinen, H. Kokko, S. R. Williams // J. Neurochem. – 1992. – Vol. 58, № 3. – P. 967 – 974.
11. Tanaka M. Influence of acidosis on cardiotonic effects of milrinone / M. Tanaka, T. Ishikawa, T. Nishikawa et al. // Anesthesiology. – 1998. – Vol. 88, № 3. – P. 725 – 734.
12. Mitsufuji N. Intracellular alkalosis during hypoxia in newborn mouse brain in the presence of systemic acidosis: a phosphorus magnetic resonance spectroscopic study / N. Mitsufuji, H. Yoshioka, M. Tominaga // Brain Dev. – 1995 – Vol. 17, № 4. – P. 256 – 260.
13. Billker O. Determination of mosquito bloodmeal pH in situ by ion-selective microelectrode measurement: implications for the regulation of malarial gametogenesis / O. Billker, A. J. Miller, R. E. Sinden // Parasitology. – 2000. –Vol. 120 , No 6. – P. 547–551.
14. Corbett R. J. I. Cerebral acid buffering capacity at different ages measured in vivo by 31P and 1H nuclear magnetic resonance spectroscopy / R. J.Corbett, A. R. Laptook, D. Garcia et al. // J. Neurochem. – 1992. – Vol. 59, № 1. – P. 216 – 226.
15. Wagerle L. C. Blood-brain barrier to hydrogen ion during acute metabolic acidosis in piglets / L. C. Wagerle, S. P. Kumar, J. Belik et al. // J. Appl. Physiol. – 1988. – Vol. 65, № 2. – P. 776 – 781.
16. Katsumura H. Influence of total body hyperthermia on normal brain tissue [Article in Japanese] / H. Katsumura, M. Kabuto, K. Hosotani et al. // No To Shinkei. – 1991. – Vol. 43, № 6. – P. 569 – 575.
17. Nioka S. Relationship between intracellular pH and energy metabolism in dog brain as measured by ^{31}P-NMR / S. Nioka, B. Chance, M. Hilberman et al.// J. Appl. Physiol. – 1987. – Vol. 62, № 5. – P. 2094 – 2102.
18. Bellorin-Font E. Effect of metabolic acidosis on the PTH receptor-adenylate cyclase system of canine kidney / E. Bellorin-Font, J. Humpierres, J. R. Weisinger et al. // Am. J. Physiol. – 1985. – Vol. 249, № 4, 2. – P. F566 – 572.
19. Martin G. B. Nuclear magnetic resonance spectroscopy study of human brain after cardiac resuscitation / G. B. Martin, N. A. Paradis, J. A. Helpern et al. // Stroke. – 1991. – Vol. 22, № 4. – P. 462 – 468.
20. Patton H. Alkaline pH changes in the cerebellum of asymptomatic HIV-infected individuals / H. K. Patton, W. J. Chu, H. P. Hetherington et al. // NMR Biomed. – 2001. – Vol. 14, № 1. – P. 12 – 18.
21. Tang P. [^{31}P]/[^{1}H] nuclear magnetic resonance study of mitigating effects of GYKI 52466 on kainate-induced metabolic impairment in perfused rat cerebrocortical slices / P. Tang, S. Liachenko, J. A. Melick et al. // Epilepsia. – 1998. – Vol. 39, № 6. – P. 577 – 583.
22. Комаров Ф. И. Биохимические исследования в клинике / Ф. И. Комаров, Б. Ф. Коровкин, В. В. Меньшиков Элиста: Джангар, 1998. – 259 с.

Поступила в редакцию 11.01.2012 г.

УДК 581.132

АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ ТРАНСГЕННИХ РОСЛИН ЦИКОРІЮ *CICHORIUM INTYBUS* L. З ГЕНОМ ІНТЕРФЕРОНУ- α2b ЛЮДИНИ

О. Ю. Кваско, Н. А. Матвєєва, А. М. Шаховський
Інститут клітинної біології та генетичної інженерії НАН України, м. Київ

Досліджено антиоксидантну активність трансгенних рослин цикорію *Cichorium intybus* L. з геном інтерферону-α2b людини. Показано, що у рослин дев'яти ліній (з десяти) антиоксидантна активність коливалася від 11,2±0,69 x10^{-6} до 23,30±0,97 x10^{-6} мг/мг хв залежно від лінії та була вище, ніж у контрольних нетрансформованих рослин (8,8±1,14 x10^{-6} мг/мг хв). Не виявлено безпосереднього зв'язку між транскрибуванням гена *ifn– α2b*, а також наявністю інтерфероноподібної активності екстрактів трансгенних рослин та збільшенням антиоксидантної активності. Підвищення АОА, можливо, пов'язано саме з генетичною трансформацією – перенесенням чужорідного гена до рослин.

Ключові слова: антиоксидантна активність, генетична трансформація, *Cichorium intybus* L., інтреферон -α2b людини.

Вступ. Створення трансгенних рослин розпочалося близько 30 років тому. Нині такі рослини культивують на площах до 148 млн га (за даними ISAAA, 2010 р.). Разом з тим, останнім часом все частіше ставиться питання щодо безпеки використання рослин зі штучно модифікованим геномом. Так, існує деяка загроза для навколишнього середовища через можливість неконтрольованого переносу трансгенів. Крім того, в результаті генетичної трансформації можуть змінюватись фізіологічні та біохімічні характеристики рослин, а також є дані щодо того, що процес генетичної трансформації є стресом для рослин, причому кожен з етапів трансформації, зокрема *Agrobacterium*-опосередкованої, може бути стресовим для рослин [1]. Стресова реакція викликається такими факторами як сам процес генетичної трансформації (поранення, контакт з патогеном, проникнення бактерії), перенесення чужорідного гена до геному рослин, синтез відповідних білків, біологічна активність білку. Відповідь рослинного організму на такі стресові впливи може проявлятись у зміні фізіологічних та біохімічних параметрів, у тому числі активності антиоксидантної системи.

Біологічна роль антиоксидантної системи (АОС) в організмі повязана із захистом геному, мембран та ферментів від активних форм кисню (АФК), вільних радикалів та інших продуктів, що утворюються при вільнорадикальному окисленні. При дії таких стресорів як посуха, засолення, екстремальні температури, біотичні чинники, відбувається утворення і накопичення АФК, що призводить до виникнення оксидативного стресу [2 – 4]. Ці зміни в рослинних клітинах супроводжуються підвищенням активності АОС, зокрема ферментів [5 – 7]. Отже, антиоксидантна активність може бути «маркером» ступеню дії стресових факторів на рослини. За активністю антиоксидантної системи також можна оцінити дію генетичної трансформації як стресового фактору.

При надмірній кількості АФК та інших вільних радикалів в клітині існує загроза розвитку таких хвороб як анемія, ішемія, артрит, атеросклероз, рак, нейродегенеративні захворювання, діабет. Значна роль в нейтралізації цього негативного впливу вільних радикалів на клітину належить речовинам-антиоксидантам. Тому рослини з підвищеним рівнем антиоксидантної активності можуть бути використані з метою профілактики цих захворювань.

В роботі [8] показано, что інтерферон-α забезпечує підвищення рівня цинк- та марганецьвмісної супероксиддисмутази, зниження рівня продуктів перекисного окислення та оксидативного вибуху, викликаного надмірною кількістю АФК. Отже, рослини, що синтезують активний інтерферон-α також, можливо посилюватимуть біологічний захист клітин проти оксидативного стресу.

В даній роботі досліджено, чи відбуваються зміни активності АОС трансгенних рослин цикорію з геном інтерферону людини як відповідь на біотичний стресовий чинник - агробактеріальну трансформацію.

Матеріали та методи. В дослідженнях використовували трансгенні рослини цикорію *Cichorium intybus* L. var *foliosum* Hegi з геном інтерферону α-2b людини, отримані за допомогою *Agrobacterium tumefacience*-опосередкованої трансформації [9]. Антиоксидантну активність (АОА) визначали за методом, описаним в [10]. Для цього брали листки 10 ліній трансформованих рослин, що росли в умовах *in vitro*. Контрольними слугували нетрансформовані рослини цикорію, що росли в тих самих умовах. Для приготування екстрактів 300 мг рослинного матеріалу розтирали у фарфоровій ступці в 1,5 мл 0,25М фосфатного буферу (рН 7,4). Отриманий гомогенат кількісно переносили в пробірки Eppendorf та центрифугували в мікроцентрифузі Eppendorf Centrifuge 5415 С при 2 000 g протягом 10 хв. До кювети для фотоелектроколориметра КФК-2 товщиною 1 см вносили 1,5 мл 0,25 М фосфатного буфера (рН 7,4), 0,5 мл 0,8 мМ 2,6-дихлорфеноліндофеноляту натрію, 0,5 мл сульфату заліза (II) та 0,5 мл супернатанту (дослід) або 0,5 мл дистильованої води (контроль). Після цього кожні 30 с протягом 5 хв вимірювали оптичну густину розчину в кюветі (D_τ) при довжині хвилі 510 нм. Крім того визначали оптичну густину розчину, в який замість 0,5 мл сульфату заліза (II) додавали 0,5 мл дистильованої води (D_∞). За даних умов 2,6-дихлорфеноліндофенолят натрію повністю окислений. Константу швидкості окислення 2,6-дихлорфеноліндофеноляту натрію визначали як тангенс кута нахилу прямої на графіку залежності натурального логарифму ΔD_τ ($\Delta D_\tau = D_\infty - D_\tau$) від часу. Як показник антиокислювальної активності рослинного матеріалу використовували значення константи інгібування (K_i) окислення 2,6-дихлорфеноліндофеноляту натрію, яку обчислювали як різницю констант швидкості окислення 2,6-дихлорфеноліндофеноляту натрію в контрольному та дослідному варіанті (мл/л хв), поділену на концентрація рослинного матеріалу в кюветі, мг/мл.

Результати і обговорення. Усього було досліджено 10 ліній трансгенних рослин цикорію з геном інтерферону-α2b людини. Антиоксидантна активність девяти ліній суттєво перевищувала АОА контрольних нетрансформованих рослин (рис. 1). Так, для шести ліній (№№ 3, 4, 6, 7, 8, 9) АОА перевищувала активність контрольних рослин в 1,96-2,64 рази. В той же час для трьох досліджуваних ліній (№№ 5, 10, 11) АОА виявилась меншою, ніж у вказаних вище, але в 1,27-1,40 рази більшою у порівнянні з контролем. Лише для одної лінії (№ 2) АОА була на рівні контролю. Таким чином, для більшості досліджуваних ліній АОА перевищувала активність рослин дикого типу. Вірогідно, такий ефект може розглядатися як відповідь на стрес, якому піддається рослина у процесі генетичної трансформації.

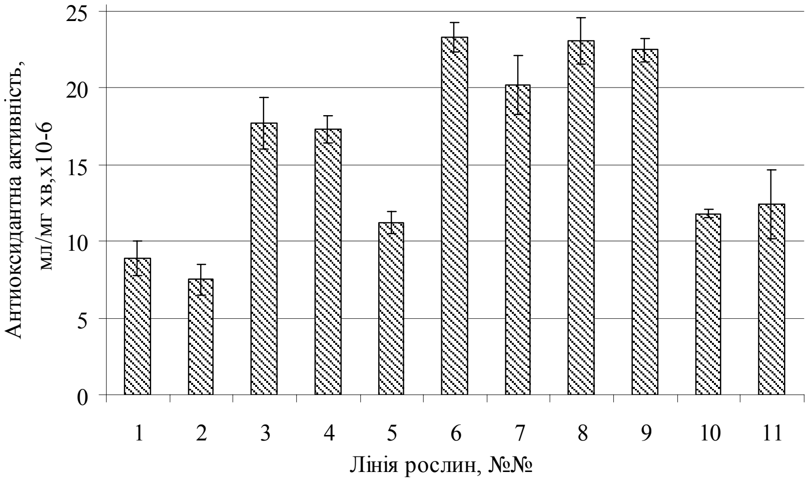


Рис. 1. Антиоксидантна активність трансгенних рослин цикорію з геном інтерферону людини: 1- контроль (нетрансформовані рослини); 2-11 - лінії трансформованих рослин.

Становить інтерес співставлення АОА з наявністю перенесеного гена *ifn– α2b,* його транскрипцією, синтезом біологічно активного білку та з'ясування причини підвищення АОА – сам факт трансформації або синтезування біологічно активного інтерферону-α2b. Раніше нами було проведено ПЛР-аналіз ліній №№ 2-11 [9]. Наявність гена інтерферону людини показана в рослинах усіх досліджуваних ліній. Отже, перенесення гену *ifn– α2b* дійсно відбулося. Для рослин девяти з десяти ліній (№ 3-11) показане зростання АОА в порівнянні з контролем, лише у рослин лінії № 2 АОА достовірно не відрізнялась від активності контрольних рослин. Таким чином, збільшення АОА у ліній № 3-11, можливо є наслідком перенесення чужорідного гена.

Для ліній №№ 2, 5, 8, 11 проведено ЗТ-ПЛР аналіз та виявлено, що ген інтерферону транскрибувався лише у рослин лінії № 8, тоді як для решти ліній зворотні транскритпти не було виявлено. Отже, для трьох з чотирьох тестованих ліній спостерігали «мовчання» гена *ifn– α2b* і, очевидно, білок не синтезувався. Антиоксидантна активність ліній № 5 та №11 (відсутні зворотні транскрипти) перевищувала активність нетрансформованих рослин в 1,27-1,41 разів, а активність лінії № 2 суттєво не відрізнялась від контролю. Антиоксидантна активність рослин лінії № 8, у яких синтез зворотніх транскриптів відбувався, була найвищою та складала $23{,}03 \pm 1{,}54 \times 10^{-6}$ мг/мг хв, що є в 2,6 разів вищим за активність контрольних рослин (рис. 1.). Таким чином, можливо, що транскрипція гена *ifn– α2b* є лише однією з причин підвищення АОА.

Екстракти з рослин ліній №№ 2, 5, 8, 11 було протестовано на інтерфероноподібну активність (ІПА) по відношенню до вірусу везикулярного стоматиту (неопубліковані дані). Тестування білкового екстракту з рослин лінії № 8 показало наявність інтерфероноподібної активності (9327 МО/г маси рослин або 3291,44 МО/мг білку), а для решти проаналізованих ліній ІПА екстрактів не була виявлена. Антиоксидантна активність рослин лінії № 8 була вищою в 1,85-3,07 разів у порівнянні з рештою ліній, протестованих на ІПА проти вірусу везикулярного стоматиту.

Оскільки високу АОА мали як рослини з ІПА, так і ті, в яких ген *ifn– α2b* не транскрибувався, вірогідно, що транскрипція гена інтерферону не є єдиною причиною для підвищення рівня антиоксидантної активності. Можна припустити, що такий ефект зумовлює ряд факторів, у першу чергу, вірогідно, перенесення гена, а також присутність біологічно активного інтерферону-α2b. Встановлення причини підвищення антиоксидантної активності трансгенних рослин цикорію з геном інтерферону *α2b* потребує подальших досліджень, спрямованих на вивчення синтезу інтерферона більшої кількості ліній та аналіз трансгенних рослин, які не несуть гена інтерферона *α2b* або мають інший трансген.

Речовини, що мають антиоксидантну активність відіграють значну роль у знешкодженні токсичної дії активних форм кисню та інших вільних радикалів, які є однією з причин розвитку ряду захворювань. Цінною природною сировиною для отримання речовин з АОА є лікарські рослини. До таких рослин належить цикорій, який має гепатопротекторну, кардіотонічну, протипухлинну дію, а також природну антиоксидантну активність, переважно завдяки наявності поліфенолів [11]. Отже, рослини цикорію із штучно підвищеною антиоксидантною активністю може слугувати джерелом антиоксидантів.

Підвищення рівня антиоксидантної активності рослин сприяє зростанню їх толерантності до дії різних стресових факторів [12, 13]. Рослини з підвищеним рівнем АОА мають більшу стійкість до оксидативних пошкоджень, спричинених дією стресових факторів [14, 15]. Тому отримані трансгенні рослини цикорію з високим рівнем АОА можуть бути більш стійкими до дії цих факторів.

Висновки. Проведені дослідження показали, що дев'ять з десяти ліній трансгенних рослин цикорію з геном інтерферону людини мали більшу антиоксидантну активність, ніж контрольні нетрансформовані рослини. Для шести ліній рослин показана висока антиоксидантна активність – від $17{,}25\pm0{,}88\times10^{-6}$ до $23{,}30\pm0{,}97\times10^{-6}$ мг/мл хв залежно від лінії, в той же час АОА контрольних рослин складала лише $8{,}8\pm1{,}14\times10^{-6}$ мг/мл хв. Підвищення АОА, на нашу думку, можливо, викликано рядом факторів – транкрибуванням трансгена, наявністю біологічно активного інтерферону, але, вірогідно, у першу чергу - саме перенесенням чужорідного гену. Остаточне встановлення причини підвищення антиоксидантної активності трансгенних рослин цикорію потребує більш детального вивчення: збільшення вибірки та порівняння з лініями трансгенних рослин, які містять різні трансгени.

Автори виражають подяку Кудрявцю Ю. Й. (Інститут експериментальної патології, онкології та радіобіології ім.. Р. Е. Кавецького НАН України) за допомогу у визначенні інтерфероноподібної активності екстрактів з трансгенних рослин.

РЕЗЮМЕ

Изучена антиоксидантная активность трансгенных цикория *Cichorium intybus* L. с геном интерферона-α2b человека. Показано, что для девяти из десяти линий растений антиоксиданая активность варьировала в пределах от $11{,}2\pm0{,}69\ \times10^{-6}$ до $23{,}30\pm0{,}97\ \times10^{-6}$ мг/мг мин в зависимости от линии и была више по сравнению с активностью контрольних нетрансформированных растений ($8{,}8\pm1{,}14\ \times10^{-6}$ мг/мг хв). Не виявлено непосредственной зависимости увеличения антиоксидантной активности от транскрипции гена *ifn– α2b* и наличия интерфероноподобной активности. Повышение антиоксидантной активности у трансгенных растений, возможно, вызывается именно генетической трансформацией – перенесением чужеродного гена в растения.

Ключевые слова: антиоксидантная активность, генетическая трансформация, *Cichorium intybus* L., интреферон -α2b человека.

SUMMURY

Antioxidant activity of transgenic chicory plants with interferon-α2b gene was investigated. The antioxidant activity of nine plant lines from ten investigated varied from $11{,}2\pm0{,}69\ \times10^{-6}$ to $23{,}30\pm0{,}97\ \times10^{-6}$ mg/ml min and was higher than activity of control nontransformed plants ($8{,}8\pm1{,}14\ \times10^{-6}$ mg/ml min). Direct relation between the presence of *ifn-α2b* gene reverse transcripts and interferon-like activity with increasing of antioxidant activity was not found. The increase of antioxidant activity may be caused by genetic transformation - transferring of the foreign gene in plants.

Key words: antioxidant activity, genetic transformation, *Cichorium intybus* L., human interferon-α2b.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Enikeev A. G. Agrobacterial transformation as complex biotical stressing factor / A. G. Enikeev, T. V. Kopytina, L. A. Semenova, et al. // Journal of stress Physiology and Biochemistry. – 2008. – Vol. 4., No 1. – P. 11-19.
2. Колупаев Ю. Е. Антиоксидантная система растений: участие в клеточной сигнализации и адаптации к действию стрессоров / Ю. Е. Колупаев, Ю. В. Карпец, А. И. Обозный // Вісник Харківського національного університету Серія Біологія. – 2011. – Вип. 1, № 22. – С. 6-34.
3. Foyer C. H. Protection against oxygen radicals: an important defense mechanism studied in transgenic plants // C. H. Foyer, P. Descourvierse, K. J. Kunert // Plant Cell Environ. – 1994. – Vol. 17, No 5. – P. 507-523.
4. Asada K. The water cycle in chloroplasts: scavenging of active oxygens and dissipation of excess photons / K. Asada // Annual Review of Plant Physiology and Plant Molecular Biology. – 1999. – Vol. 50. –. 601-639
5. Gossett D. G. Antioxidant response to NaCl stress in salt-tolerant and salt-sensitive cultivars of cotton / D. G. Gossett, E. P. Millhollon, M. C. Lucas // Crop Sci. – 1994. –Vol. 34, No 3. – P. 706-714.
6. Olmos E. Induction of severa1 antioxidant enzymes in the selection of a salt-tolerant cell line of *Pisum sativum.* / E. Olmos, J. A. Hernandez, F. Sevilla, E. Hellin // J. Plant Physiol. – 1994. – Vol. 144, No 4. – P. 594-598.

7. Salt-induced oxidative stress in chloroplasts of pea plants / J. A. Hernandez, E. Olmos, F. J. Corpas et al. // Plant Sci. – 1995. – Vol. 105, No 2. – P. 151-167.
8. Lu G. Interferon-alpha enhances biological defense activities against oxidative stress in cultured rat hepatocytes and hepatic stellate cells / G. Lu , I. Shimizu , X. Cui et al // J. Med Invest. – 2002. – Vol. 49, No 3-4. – P. 172-81.
9. Перенесення гена біосинтезу інтерферону-*α2b* в рослини цикорію (*Cichorium intybus* L.) методом агробактеріальної трансформації / Н.А. Матвєєва, АМ. Шаховський, І.М Герасименко та ін. // Біополімери і клітина. – 2009. – Т.25, № 2. – С. 120-125.
10. Семенов В. Л. Метод определения антиокислительной активности биологического материала / В. Л. Семенов, А. М. Ярош // Украинский биохимический журнал. – 1985. – Т. 57, № 3. – С. 50-52.
11. Lavelli V. Antioxidant Activity of Minimally Processed Red Chicory (Cichorium intybus L.) Evaluated in Xanthine Oxidase-, Myeloperoxidase-, and Diaphorase-Catalyzed Reactions / V. Lavelli // J. Agric. Food Chem. – 2008. – Vol. 56, No 16. – P. 7194-7200.
12. Kim Y.-H. Expression of Arabidopsis NDPK2 increases antioxidant enzyme activities and enhances tolerance to multiple environmental stresses in transgenic sweetpotato plants / Y.-H. Kim, S. Lim, K.-S. Yang // Mol. Breeding. – 2009. – Vol. 24, № 3. – P. 233-244.
13. Yang L. Enhancement of stress tolerance in transgenic tobacco plants constitutively expressing AtIpk2b, an inositol polyphosphate 6-/3-kinase from Arabidopsis thaliana / L. Yang, R. Tang, J. Zhu // Plant Mol. Biol. – 2008. – Vol. 66, No 4. – P. 329–343.
14. Harper D. B. Mechanisms of paraquat tolerante in perennial ryegrass. Role of superoxide dismutase, catalase, and peroxidase / D. B. Harper, B. M. R. Harvey // Plant Cell Environ. – 1978. – Vol. 1, No. 3 – P. 211-215.
15. Wise R. R. Chilling-enhanced photooxidation. Evidence for the role of singlet oxygen and endogenous antioxidants / R. R. Wise, A. W. Naylor // Plant Physiol . 1987. – Vol. 83, No. 2. – P. 278-282.

Надійшло до редакції 17.10.2011 р.

УДК 577

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЫШЦЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕПРЕРЫВНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННО РАСПРЕДЕЛЕННОЙ МОДЕЛИ

А. М. Мищенко, С. В. Беспалова

Важными динамическими характеристиками мышцы являются её переходные характеристики. Интерпретация этих характеристик позволяет пролить свет на механизм работы мышцы на молекулярном уровне. Существующие механизмы не однозначны. На основе предложенной ранее пространственно распределенной модели, в работе моделируются силовой отклик полусаркомера на ступенчатое изменение его длины с малой амплитудой. Рассматривается ряд альтернативных молекулярных механизмов, лежащих в основе силового отклика. Обсуждается их связь с имеющимися экспериментальными данными, а также существующими теоретическими механизмами и моделями.

Ключевые слова: модель; мышца; переходная характеристика; ступенчатое изменение длины; молекулярный механизм.

Введение. Переходные характеристики мышцы являются важным источником информации о механизме мышечного сокращения. Пример такой характеристики – переходный процесс изменения напряжения мышцы в ответ на быстрое изменение её длины [1 – 3]. Длину изометрически сокращающейся мышцы меняют за очень короткое время на величину порядка 1 нм на полусаркомер, а затем длина мышцы снова фиксируется. Изменение напряжения состоит из нескольких фаз, имеющих различные характерные времена и амплитуды. Обычно различают 4 фазы. Фаза 1 – это мгновенное изменение напряжения, следующее за ступенчатым изменением длины; эта фаза отражает наличие последовательного эластичного элемента в структуре поперечного мостика (ПМ). В фазе 2 сила начинает быстро возвращаться к исходному изометрическому уровню, однако в этой фазе сила не достигает исходного уровня, восстановление силы замедляется, прекращается (сила выходит на плато) или даже приобретает обратный знак – это фаза 3. Фаза 3 более медленная по скорости, чем фаза 2. За фазой 3 следует еще одна фаза восстановления силы, это фаза 4, однако её скорость значительно меньше, чем скорость фазы 2. За время порядка 1 с сила возвращается на исходный изометрический уровень. Отклик напряжения на ступенчатое растяжение и сокращение практически являются зеркальным отражением друг друга, хотя и присутствует некоторая асимметрия. Фазы 2–4 связывают с отдельными этапами механохимического цикла, а так же вязкоупругими свойствами самого ПМ. Однако существуют значительные дискуссии по поводу того, каким именно этапам механохимического цикла соответствуют фазы переходного процесса. Для сопоставления эффективных процессов силового отклика и лежащих в их основе элементарных процессов механохимического цикла, изучают влияние на скорости фаз 2–4 температуры, концентрации лигандов (АТФ, АДФ, $Ф_н$) [4 – 10]. В работах [4 – 7] изучались амплитудно-фазово-частотные характеристики (АФЧХ) мышечных волокон позвоночных. Полученные характеристики описывались эмпирической передаточной функцией, включающей три экспоненциальных процесса, аналогичных трем переходным процессам в фазах 2, 3 и 4 силового отклика на ступенчатое изменение длины. Согласно [4 – 7], в основе быстрой фазы 2 лежат стадии отрыва ПМ, в ригорном состоянии, от актина при связывании новой молекулы АТФ. Среднюю по скорости фазу 3 связывают с этапом совершения рабочего хода ПМ, за которым следует отрыв фосфата. Количественно полученные экспериментальные закономерности и лежащий в их основе предполагаемый молекулярный механизм были представлены в виде точечной кинетической модели [4 – 7]. Однако такое описание является приближенным, не учитывает пространственные эффекты, связанные с неоднородностью распределения взаимодействующих молекул (актин и миозин) в пространстве и не принимает во внимание зависимость констант скоростей реакций от деформации ПМ.

Целью данной работы является получение силовых откликов полусаркомера на его ступенчатое растяжение и сокращение в рамках пространственно-распределенной модели [11].

Модель. В рамках модели [11] проводился численный эксперимент по ступенчатому изменению длины полусаркомера. При этом были использованы наборы параметров из работы [11] (модель 1 и модель 2), а так же набор параметров приведенный в таблице (модель 3). В модели 3 была упрощена константа скорости отрыва ПМ k_{41}, она была заменена следующей кусочно-линейной функцией:

$$k_{41}(\xi_1)=\begin{cases} a_{41}^2 & \xi_4 \geq x_{41}^1 \\ a_{41}^1 & x_{41}^1 > \xi_4 \geq x_{41}^2 \\ a_{41}^3 & \xi_4 < x_{41}^2 \end{cases} \tag{1}$$

где a_{ij}^k, x_{41}^1 – константы.

Таблица 1

Параметры модели

Параметр	Единицы измерения	Модель 3	Параметр	Единицы измерения	Модель 3	Параметр	Единицы измерения	Модель 3	Параметр	Единицы измерения	Модель 3
T	C°	20	d_1, d_3	нм	0	a_{12}^1	c^{-1}	150	a_{41}^1	c^{-1}	10
l_{cb}	нм	14.3	G_1	в ед. RT	0	a_{12}^2		7	a_{41}^2	c^{-1}	30
l_{bs}	нм	5.5	G_2	в ед. RT	–2	a_{23}^1	c^{-1}	100	a_{41}^3	c^{-1}	300
k_{cb}	н/м	0.3e-3	G_3	в ед. RT	–4.3	a_{34}^1	c^{-1}	30	x_{41}^1	нм	9
d_2	нм	10	G_4	в ед. RT	–7	a_{23}^2, a_{34}^2		0	x_{41}^2	нм	12.8

где T – абсолютная температура; l_{cb} – расстояние между соседними ПМ на толстом филаменте; k_{cb} – жесткость эластичного элемента ПМ; d_j – рабочий ход, совершаемый ПМ при переходе $i \to j$; G_i – свободная энергия актомиозинового комплекса в i-м химическом состоянии; R – постоянная Больцмана; a_{ij}^k – параметры константы скорости k_{ij}.

В численном эксперименте полусаркомер сокращался в изометрическом режиме в течении 1 с. Затем он растягивался либо сокращался на 1 нм за время 10^{-6} с и после чего снова сокращался в изометрическом режиме в течении 1 с. В численном эксперименте рассчитывались следующие величины: $C_i(t,\Delta)$ – распределение заселенности связных ПМ в i-м химическом состоянии по расстоянию Δ между ПМ и связывающим центром на актине, в различные моменты времени t; P_i – сила на ПМ, генерируемая фракцией связанных ПМ в полусаркомере, в i-м химическом состоянии; P – сила на ПМ, генерируемая всеми связанными ПМ полусаркомера. Так же рассчитывались потоки между химическими состояниями. Результирующие потоки для модели, допускающей связывание ПМ только с левым ближайшим связывающим центром на актине (модель 1), определяется как:

$$J_{ij}(t) = \frac{1}{l_{bs}} \int_{-h}^{h} \left[k_{ij}(x) C_i^l(x,t) - k_{ji}(x) C_j^l(x,t) \right] dx \tag{2}$$

где l_{bs} – расстояние между соседними связывающими центрами на тонком филаменте; h - предел интегрирования по пространственной переменной; $k_{ij}(\xi_i)$ - константа скорости перехода между химическим состояниями i и j в механохимическом цикле ПМ; в общем случае является функцией деформации ξ_i ПМ; t – время. Для модели, также допускающей связывание с правым связывающим центром (модели 2, 3), результирующий поток определяется как:

$$J_{ij}(t) = \frac{1}{l_{bs}} \left[\int_{-h}^{0} \left[k_{ij}(x) C_i^l(x,t) - k_{ji}(x) C_i^l(x,t) \right] dx + \int_{0}^{h} \left[k_{ij}(x) C_i^r(x,t) - k_{ji}(x) C_i^r(x,t) \right] dx \right] \tag{3}$$

где $C_i^l\left(t,\Delta^l\right)$ и $C_i^r\left(t,\Delta^r\right)$ распределения заселенностей связных ПМ в i-м химическом состоянии, связавшихся с ближайшим левым и правым связывающими центрами соответственно.

Результаты модели сравнивались с переходными характеристиками, полученными при помощи комплексного модуля [4]:

$$Y(if) = H + \frac{Aif}{a+if} - \frac{Bif}{b+if} + \frac{Cif}{c+if} \tag{4}$$

где Y – комплексный модуль; A, B, C – амплитуды экспоненциальных процессов; a, b, c – характерные частоты экспоненциальных процессов; H – значение эластичного модуля при нулевой частоте; $i = \sqrt{-1}$. Единицы измерения полученного таким образом силового отклика пересчитывались на один ПМ, аналогично [11]. Параметры передаточной функции (4), выбирались аналогично [11].

Результаты. На рис. 1 показано изменение силы полусаркомера ΔP после ступенчатого растяжения (кривые $\Delta P > 0$) и сокращения (кривые $\Delta P < 0$). Кривые 1 – результаты численного эксперимента; кривые 2, 3 – силовой отклик полученный при помощи (4). Результаты моделей 1, 2 и 3 представлены на рис. a, b и c соответственно. Сила для кривых 2 и 3 пересчитана на ПМ в предположении, что в ПМ силу генерирует одна головка или две головки соответственно. Ступенчатое изменение длины начинается в нулевой момент времени. Во всех откликах присутствуют фазы 1-4. Отклики на растяжение и сокращение не симметричны. В отклике на сокращение длительность фазы 2 несколько больше, чем при растяжении. Необходимо заметить, что модели 1 и 2 были оптимизированы для получения частотных характеристик [11]. Модель 3 оптимизировалась для описания временных характеристик.

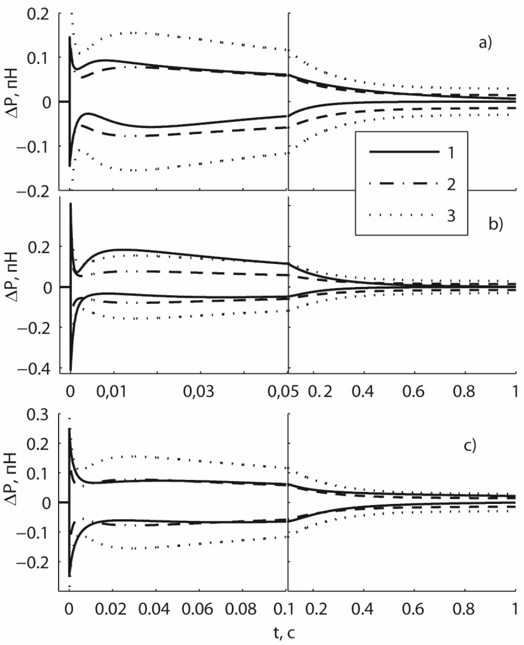


Рис. 1

Далее рассмотрим механизм, лежащий в основе наблюдаемых изменений силы после ступенчатого изменения длины (рис. 2). На рис 2 показана зависимость сил P и P_i от времени, при ступенчатом растяжении (a, c, e) и сокращении (b, d, f) полусаркомера, в моделях 1 (a, b), 2 (c, d) и 3 (e, f). На всех графиках на верхней оси абсцисс номерами отмечены отдельные моменты времени, соответствующие различным этапам фаз силового отклика. Фаза 2 силового отклика соответствует моментам времени с номерами 2-4, фаза 3 – моментам 4-6, фаза 4 – моментам 6-8. В каждом случае первый номер – начало фазы, второй промежуточный момент, третий – окончание фазы. Как видно из рис. 2, a,b, в модели 1 при ступенчатом растяжении и сокращении форма силового отклика (P) в фазах 2 и 3 обусловлены главным образом изменением компоненты P_3. Её быстрые изменения в этих фазах модулированы медленными изменениями компоненты P_2. Амплитуда компоненты P_4 на порядок меньше P_3. В фазе 4 изменения силы обусловлены медленными изменениями компоненты P_2.

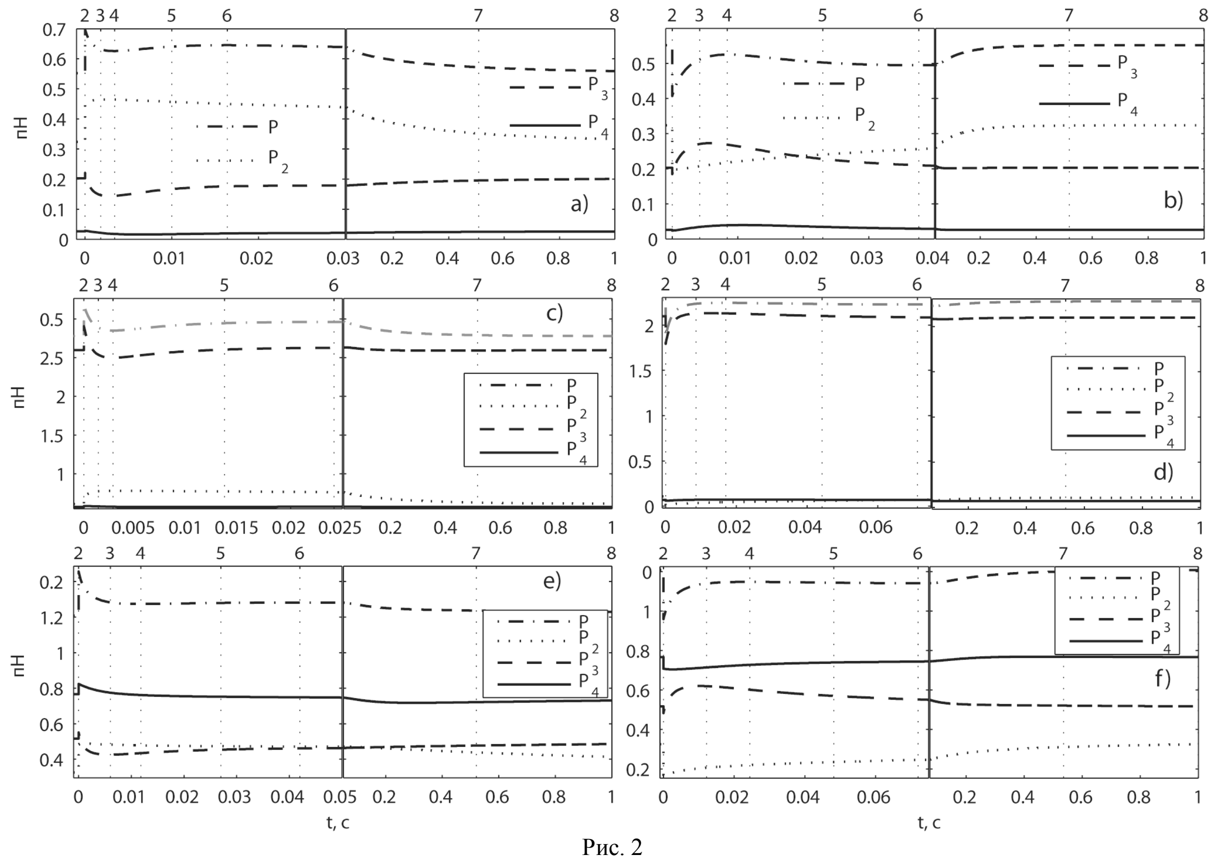


Рис. 2

В модели 2 закономерности аналогичны (рис. 2, c, d), однако амплитуда компоненты P_2 здесь приблизительно на порядок меньше P_3, соответственно изменения P в фазах 2 и 3 практически обусловлены только изменениями P_3.

В модели 3 ситуация меняется (рис. 2, e, f): значительная доля ПМ находится в сильносвязанном состоянии 4, наибольший вклад в P дает компонента P_4. В фазе 2, при растяжении, изменения P обусловлены изменениями компонент P_3 и P_4; при сокращении, аналогично предыдущим моделям, только изменениям P_3. Рост силы в фазе 3 при растяжении связан с ростом P_3, но модулируемым P_4; аналогично при сокращении, но с противоположным знаком. В фазе 4 восстановление силы связано с изменениями P_2, однако теперь эти изменения значительно модулируются изменениями P_3 и P_4.

Рассмотренные выше, закономерности изменения компонент силы P_i, в различных фазах силового отклика, обусловлены изменениями распределений заселенностей соответствующих состояний ($C_i(\Delta,t)$), а так же химических потоков ($J_{mn}(\Delta,t)$). Ступенчатое изменение длины полусаркомера будет приводить к смещению стационарных изометрических распределений $C_i(\Delta,t)$ вдоль Δ. Распределения, не меняя формы, смещаются вправо (растяжение) или влево (сокращение) на 1 нм. Новые неравновесные распределения постепенно возвращаются к исходной изометрической форме, в процессе этого возвращения сила постепенно также восстанавливается до изометрической. Благодаря отличию констант скоростей между различными этапами механохимического цикла, а также благодаря их зависимости от деформации ПМ, распределения различных фракций ПМ, а также различные части одного и того же распределения возвращаются к исходной форме с различной скоростью. Далее рассмотрим эти изменения подробней.

Модель 1, фаза 2. В модели 1 после ступенчатого растяжения происходит резкое изменение величины потоков J_{12} и J_{23} по сравнению с изометрическим уровнем (рис. 3, a). В фазе 2 поток J_{12} возрас-

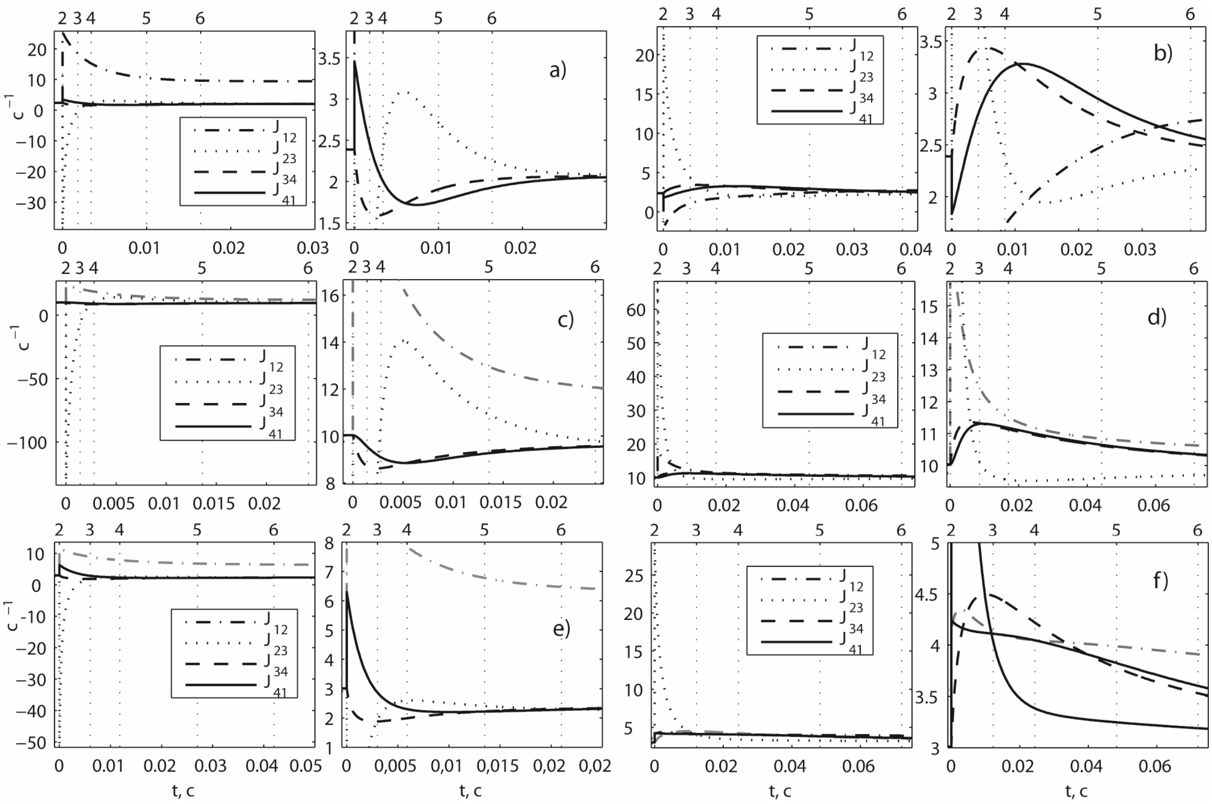


Рис. 3. Зависимость потоков (J_{mn}) от времени, при ступенчатом растяжении (a,c,e) и сокращении (b,d,f) полусаркомера, в моделях 1 (a,b), 2 (c,d) и 3 (e,f)

тает, а J_{23} уменьшается и становится отрицательным, причем J_{23}, сразу после растяжения уменьшается в большей степени, чем возрастает J_{12}. Увеличение потока $J_{12} = j_{12} - j_{21}$ связано с уменьшением j_{21}, а отрицательность $J_{23} = j_{23} - j_{32}$ означает резкое увеличение оттока 3→2 сильносвязанных ПМ. Поток J_{12} возрастает за счет уменьшения количества переходов 2→1 в области $\Delta \approx 0-1$ нм (деформация ПМ в состоянии 2 будет $\xi_2 = \Delta$) (рис. 4, a, $J_{12}(\Delta,t)$), поскольку после ступенчатого растяжения заселенность $C_2(\Delta,t)$ в этой области становится равной нулю (рис. 4, a).

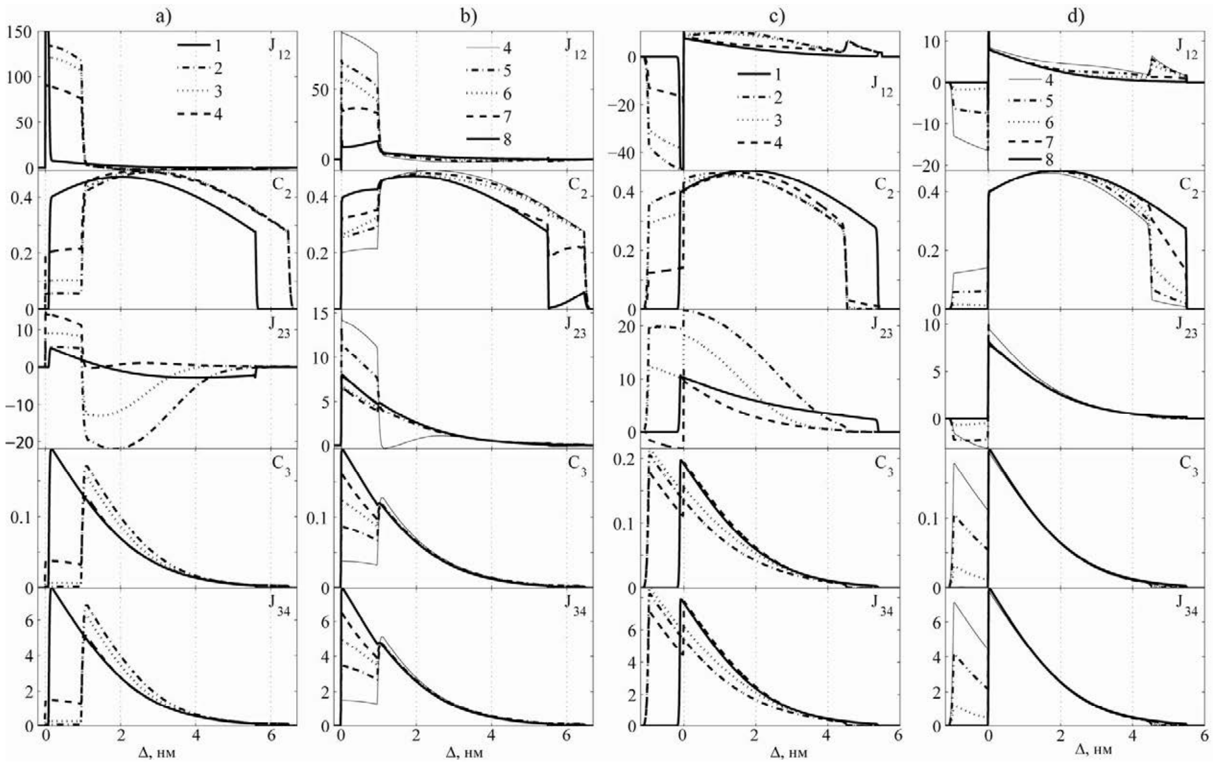


Рис. 4. Мгновенные распределения заселенностей $C_i(\Delta,t)$ и потоков $J_{km}(\Delta,t)$ на различных этапах ступенчатого изменения длины полусаркомера в модели 1. Графики в столбцах a и b соответствуют растяжению, в столбцах c и d сокращению полусаркомера. Кривые 1-8 соответствуют различным этапам переходного процесса. Изометрический режим кривые 1; фаза 2 кривые 2-4; фаза 3 – кривые 4-6; фаза 4 – кривые 6-8. В каждом случае первый номер – начало фазы, второй – промежуточный момент, третий – окончание фазы. Единицы измерения потоков с$^{-1}$.

Уменьшение потока J_{23} связанно с увеличением заселенности $C_3(\Delta,t)$ в области $\Delta \approx$1-4 нм ($\xi_3 = \Delta + d_2 = \Delta + 10\,нм$) в результате смещения сюда изометрического распределения (рис. 4, a). Увеличение C_3 в этой области ведет к росту обратного потока j_{32} (рис. 4, a). Именно быстрый отток j_{32} приводит к резкому падению силы в фазе 2.

При сокращении силовой отклик является зеркальным отражением такового при ступенчатом растяжении, молекулярные события, лежащие в основе этого отклика, также являются зеркальным отражением таковых при растяжении. В начале фазы 2 поток J_{12} резко уменьшается, а J_{23} резко возрастает (рнис. 3, b), так же, как и в случае растяжения, это связано с изменениями правого края распределения C_2 и левого края распределения C_3 соответственно (рис. 4, c). Однако теперь изометрические распределения смещаются на 1 нм влево, что ведет к увеличению заселенности C_2 в области $\Delta \approx$-1 – 0 нм и уменьшению заселенности C_3 в области $\Delta \approx$-0 – 4 нм, что соответственно ведет к увеличению j_{21} ($J_{12} < 0$) и уменьшению j_{32} (J_{23} возрастает).

Модель 1, фаза 3. В модели 1, при растяжении, в конце фазы 2 поток J_{23} доходит до своего изометрического уровня (рис. 3, a). Поток J_{12} восстанавливается медленнее, в конце фазы 2 и в фазе 3 он продолжает быть выше изометрического значения (рис. 3, a). В фазе 3 поток J_{23} продолжает расти, становясь выше изометрического уровня. Последнее связано с восстановлением распределения C_3 в области $\Delta \approx$0-1 нм (рис. 4, b). К началу фазы 3, поток J_{12} частично восстанавливает распределение C_2, в этой области Δ, что в свою очередь приводит к возникновению в этой области положительного потока J_{23}.Т.о. в фазе 3 ПМ поступают в сильносвязанное состояние 3 более интенсивно (переходы 2→3), чем в изометрическом режиме, это обуславливает рост силы P_3. Необходимо заметить, что процесс восстановления левого края распределения C_3 происходит и в первой фазе, однако этот более медленный процесс становится заметен, когда остальная часть распределения принимает изометрическую форму.

При сокращении наблюдается зеркальная картина событий. Падение силы – результат увеличения числа переходов 3→2 и 3→4 в области $\Delta \approx$-1-0, обусловленное увеличением заселенности C_3 в этой области в результате механического смещения, причем преобладают переходы 3→4 (рис. 4, d). Сами по себе переходы 3→4 не могут привести к понижению силы, так как ПМ в состояниях 3 и 4 генерируют одинаковую силу, за переходами 3→4 должны следовать быстрые переходы 4→1. Поток J_{41}, повторяет по форме J_{23} и несколько выше него.

Модель 1, фаза 4. При растяжении медленное падение силы в фазе 4 обусловлено медленными отрывами ПМ из слабосвязанного состояния в области $\Delta \approx$4-6.5 нм (правый край распределения C_2); в этой области поток J_{12} отрицателен, так как после растяжения заселенность этой области увеличивается, что увеличивает поток j_{21}. Параллельно с восстановлением правого края C_2 идет восстановление и левого края, однако наибольший вклад в силу дают ПМ правого края (рис. 4, b).

При сокращении, наоборот, медленный рост силы обусловлен снижением заселенности C_2 в области $\Delta \approx$3-5.5 нм, поток J_{12} превышает изометрический уровень (рис. 4, d).

Модель 2. В модели 2 ситуация аналогична модели 1 (рис. 3, c-d, рис. 5), однако меняются области деформаций распределений заселенности, восстановление в которых формирует особенности динамики силового отклика (рис. 5). В фазе 2 при растяжении восстанавливается правый край C_3, $\Delta \approx$0–4 нм;

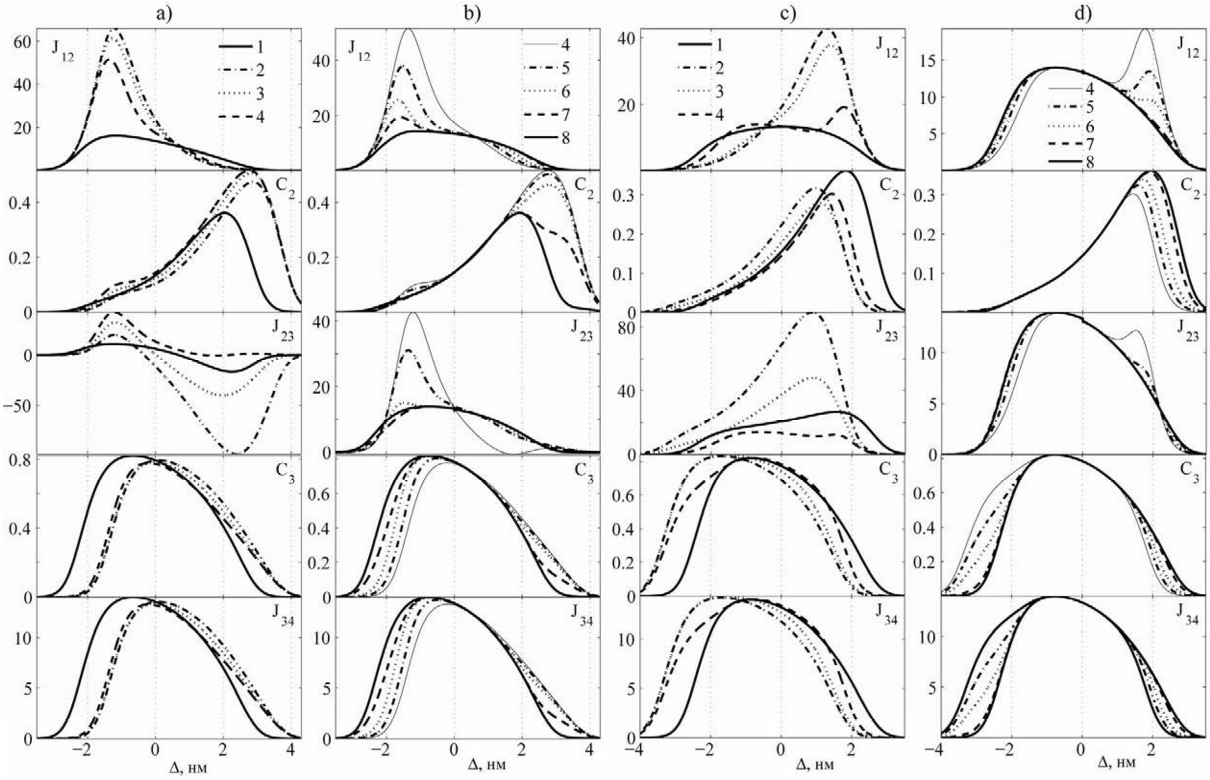


Рис. 5. Мгновенные распределения заселенностей $C_i(\Delta,t)$ связанных ПМ, а так же потоков $J_{km}(\Delta,t)$ на различных этапах ступенчатого изменения длины полусаркомера в модели 2

при сокращении $\Delta \approx$-1-3 нм. В фазе 3 при растяжении восстанавливается левый край C_3, $\Delta \approx$-3–0 нм; при сокращении $\Delta \approx$-4– -2 нм. В фазе 4 восстанавливается правый край C_2, $\Delta \approx$2–4 нм; при сокращении $\Delta \approx$1–3 нм.

Модель 3. В модели 3 сохраняются закономерности предыдущих моделей, однако дополнительно на динамику развития силы полусаркомера влияет компонента P_4. Анализ распределений заселенностей и потоков (рис. 3, e-f, рис. 6) дает следующую картину. Падение силы в фазе 2 при растяжении определяется уменьшением заселенности C_3 в области $\Delta \approx$-1–3 нм (правый край распределения), благодаря уменьшению $J_{23} < 0$ (увеличение j_{32}), а также C_4 в области $\Delta \approx$2.8–4 нм (правый край), благодаря увеличению J_{41}. Увеличение потоков происходит вследствие роста заселенности в этих областях. Рост силы в фазе 2 при сокращении: увеличение C_3 в области $\Delta \approx$-2–2 нм, благодаря росту J_{23} (j_{23} преобладает над упавшим j_{32}), из-за уменьшения заселенности в этой области.

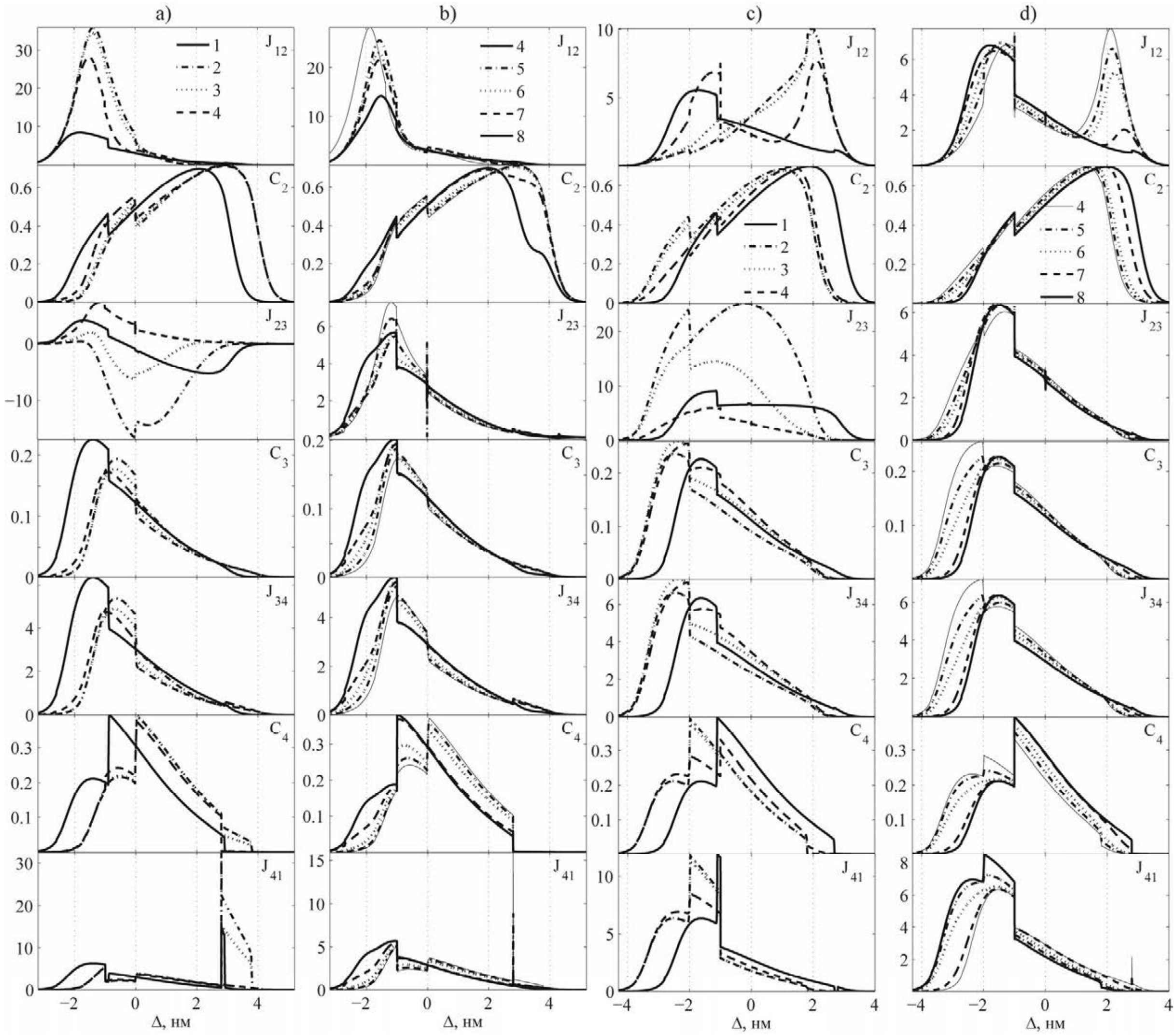


Рис. 6. Мгновенные распределения заселенностей $C_i(\Delta,t)$ связанных ПМ, а так же потоков $J_{km}(\Delta,t)$ на различных этапах ступенчатого изменения длины полусаркомера в модели 3

Рост силы в фазе 3 при растяжении: рост C_3 в области $\Delta \approx$-3 – -1 нм (левый край) из-за уменьшения оттока ПМ J_{34}, а также благодаря частичному увеличению притока J_{23}. Изменение потоков – результат уменьшения заселенности в этой области. Падение силы при сокращении: уменьшение C_3 при $\Delta \approx$-4– -2 нм (левый край) из-за возросшего оттока J_{34} (из-за увеличения заселенности в этой области).

Падение силы в фазе 4 при растяжении: медленное уменьшение C_2 при $\Delta \approx$2.5–5 (правый край) из-за уменьшения J_{12} и увеличения J_{23}. Рост силы при сокращении: рост C_2 при $\Delta \approx$2–3.5 (правый край) из-за увеличения J_{12} и уменьшения J_{23}.

Обсуждение результатов. Представленные в работе модели, по крайней мере, качественно, достаточно хорошо воспроизводят экспериментальные результаты (рис. 1). Однако целью работы было не получение точных количественных аппроксимаций, а рассмотрение различных вариантов принципиально возможных, механизмов силового отклика мышцы на ступенчатое растяжение в пространственно распределенной модели и сравнение таковых с имеющимися кинетическими моделями. Модели 1, 2 и 3 показывают примеры двух различных механизмов силового отклика при ступенчатом изменении длины.

В моделях 1 и 2 силовой отклик связан с быстрым и средним по скорости восстановлением распределения C_3, а также медленным восстановлением распределения C_2. Фазы 2 и 3 связаны с более быстрым восстановлением распределения C_3, тогда как фаза 4 с медленным восстановлением распределения C_2. Наличие фазы 2 в силовом отклике моделей 1 и 2 связано с быстрыми переходами между состояниями ПМ 2 и 3 (растяжение 3→2, сокращение 2→3) в области больших деформаций ξ_3 (правый край распределения C_3). При ступенчатом растяжении ПМ приобретают дополнительную деформацию, которая обращает их рабочий ход. Переходы этих перерастянутых ПМ в слабосвязанное состояние ведет к резкому падению силы. При сокращении переходы 2→3, сопровождающиеся совершением рабочего хода, восстанавливают заселенность ПМ с большими деформациями, резко увеличивая силу полусаркомера. Фаза 3 связана со средним по скорости восстановлением левого края распределения C_3, т.е. заселенности ПМ в состоянии 3 с меньшей деформацией, в результате переходов между состояниями 2 и 3, а также 3 и 4 (растяжение 2→3 и 4→3, сокращение 3→2 и 3→4→1). После растяжения заселенность таких ПМ уменьшается, при сокращении увеличивается. Соответственно восстановление их заселенности до изометрического уровня будет приводить к росту и падению силы. Фаза 4 – это медленное восстановление правого края распределения C_2 в результате переходов между состояниями 1 и 2 (при растяжении происходят отрывы ПМ, при сокращение – связывание новых). Состояние 4 моделях 1 и 2 заселено незначительно и не оказывает влияния на динамику силового отклика.

В модели 3 ситуация меняется: здесь значительную роль начинает играть состояние 4, благодаря тому, что увеличивается его заселенность. При ступенчатом растяжении, в отличие от моделей 1 и 2, быстрое снижение силы в фазе 2 определяется быстрым уменьшением двух компонент: P_3 и P_4. Уменьшение P_3, аналогично моделям 1 и 2 связано с переходами 3→2 из силогенерирующего состояния 3. В то же время, резкое уменьшение силы компоненты P_4 связано с тем, что в данной модели при увеличении деформации ПМ в сильносвязанном состоянии 4 резко возрастает скорость их отрыва (1). Такой механизм аналогичен механизму, предложенному в работе [12]. Однако, в отличие от [12], этот механизм не симметричен, при сокращении силовой отклик в фазе 2 определяется только увеличением заселенности состояния 3 через переходы 2→3. В работе [12] предполагается, что константа k_{41} уменьшается при уменьшении деформации ПМ. Однако в модели 3 уменьшение константы k_{41} при уменьшении деформаций ПМ не приводит к нужному эффекту, поскольку константа k_{41} при Δ =0 нм уже имеет достаточно малое значение. Увеличение же значения k_{41} в области Δ =0 нм в модели 3 будет приводить к уменьшению заселенности состояния 4, поскольку в отличие от [12], предполагается, что обратная константа k_{14} равна нулю. В [12] обратная константа перехода k_{14} не равна нулю и сравнима с прямой константой k_{41}, однако интерпретация таких обратных переходов 4→1, в терминах пространственно распределенной модели, затруднительна. Предполагается, что генерация силы в силогенерирующем состоянии осуществляется растянутым эластичным элементом ПМ, который приобретает деформацию на начальных этапах механохимического цикла, благодаря внутренним конформационным изменениям в ПМ. Эти конформационные изменения определенным образом сопряжены с процессам отрыва продуктов гидролиза от молекулы миозина. После отрыва такого ПМ запасенная в его эластичном элементе потенциальная энергия перейдет в тепловую. Для связывания в обратном направлении ПМ должен получить эту энергию обратно, энергии тепловых колебаний для такой деформации ПМ не достаточно. Возможно, ПМ будет связываться с другим связывающим центром на актине, расположенным от него ближе того, от которого он оторвался, однако такое связанное состояние не будет создавать такой же силы (оно будет аналогично слабосвязанному состоянию 2). Такие обратные переходы будут заселять области с малой деформацией. Кроме того, уменьшение констант скоростей прямых реакций, предполагаемое в механизме [12], с уменьшением деформации ПМ, противоречит некоторым математическим (в том числе классической модели Хаксли [13]) и структурным моделям [14], а также экспериментальным данным [15, 16], в которых, в частности для константы скорости отрыва АДФ (k_{34}), предполагается, что константа скорости увеличивается с уменьшением деформации ПМ. Увеличением константы скорости k_{34} с уменьшением деформации, например, объясняют высокую КПД мышцы, зависимость сила-скорость, эффект Фенна [17].

Выводы. В пространственно распределенной модели получены силовые отклики полусаркомера на ступенчатое изменение его длины, результаты модели близки к экспериментальным. Аналогично экспериментальным, отклики имеют три фазы. Фаза 2 связана с этапом совершения ПМ его рабочего хода (модели 1, 2 и 3), а так же этапом отрыва ПМ в конце механохимического цикла (модель 3). Последний механизм не симметричен, и участвует в формировании фазы 2 только при ступенчатом растяжении. Так же реализация подобного механизма в пространственно распределенной модели имеет определенные трудности. Фаза 3 связана с переходами между слабосвязанными ПМ и сильносвязанными, а так же с этапом отрыва АДФ. Фаза 4 связана с медленным восстановлением заселенности фракции слабосвязанных ПМ.

РЕЗЮМЕ

Важливими динамічними характеристиками м'яза є його перехідні характеристики. Інтерпретація цих характеристик дозволяє пролити світло на механізм роботи м'яза на молекулярному рівні. Існуючі механізми не однозначні. На основі запропонованої раніше просторово розподіленої моделі, в роботі моделюється силовий відгук полусаркомера на ступеневу зміну його довжини з малою амплітудою. Розглядається ряд альтернативних молекулярних механізмів, що лежать в основі силового відгуку. Обговорюється їх зв'язок з наявними експериментальними даними, а також існуючими теоретичними механізмами і моделями

Ключові слова: модель; м'яз; перехідна характеристика; ступеневу зміна довжини; молекулярний механізм

SUMMARY

An important dynamical characteristic of muscle is its transient response. The interpretation of these characteristics can shed light on the molecular mechanism of the muscle contraction. The existing mechanisms are not clear. Based on previously proposed spatially distributed model, in this paper, we simulated the transient response of halfsarcomere to a step change in length. We consider a number of alternative mechanisms, discuss their relationship with the available experimental data, as well as existing theoretical mechanisms and models.

Keywords: model; muscle; transient response; step length change; molecular mechanism

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Huxley A.F. Mechanical properties of the cross-bridges of frog striated muscle / A.F. Huxley, R.M. Simmons // J. Physiol. – 1971. – Vol. 218, No 1. – P. 59P-60P.
2. Ford L.E. Tension responses to sudden length change in stimulated frog muscle fibres near slack length / L.E. Ford, A.F. Huxley, R.M. Simmons // J Physiol. – 1977. – Vol. 269, No 2. – P. 441-515.
3. Heinl P. Tension responses to quick length changes of glycerinated skeletal muscle fibres from the frog and tortoise / P. Heinl, H.J. Kuhn, J.C. Ruegg // J Physiol. – 1974. – Vol. 237, No 2. – P. 243-58.
4. Kawai M. Sinusoidal analysis: a high resolution method for correlating biochemical reactions with physiological processes in activated skeletal muscles of rabbit, frog and crayfish / M. Kawai, P.W. Brandt // J Muscle Res Cell Motil. – 1980. – Vol. 1, No 3. – P. 279-303.
5. Kawai M. Role of MgATP and MgADP in the cross-bridge kinetics in chemically skinned rabbit psoas fibers. Study of a fast exponential process (C) / M. Kawai, H.R. Halvorson // Biophys J. – 1989. – Vol. 55, No 4. – P. 595-603.
6. Kawai M. Two step mechanism of phosphate release and the mechanism of force generation in chemically skinned fibers of rabbit psoas muscle / M. Kawai, H.R. Halvorson // Biophys J. – 1991. – Vol. 59, No 2. – P. 329-42.
7. Kawai M. Cross-bridge scheme and force per cross-bridge state in skinned rabbit psoas muscle fibers / M. Kawai, Y. Zhao // Biophys J. – 1993. – Vol. 65, No 2. – P. 638-51.
8. Davis J.S. Force generation and temperature-jump and length-jump tension transients in muscle fibers / J.S. Davis, M.E. Rodgers // Biophys J. – 1995. – Vol. 68, No 5. – P. 2032-40.
9. Force generation examined by laser temperature-jumps in shortening and lengthening mammalian (rabbit psoas) muscle fibres / K.W. Ranatunga, M.E. Coupland, G.J. Pinnigerи et al. // J Physiol. – 2007. – Vol. 585, Pt 1. – P. 263-77.
10. Bershitsky S.Y. Tension responses to joule temperature jump in skinned rabbit muscle fibres / S.Y. Bershitsky, A.K. Tsaturyan // J Physiol. – 1992. – Vol. 447. – P. 425-48.
11. Мищенко А.М. Моделирование частотных характеристик мышцы с использованием непрерывной пространственно распределенной модели / А.М. Мищенко, С.В. Беспалова // Проблемы экологии и охраны природы техногенного региона. – 2012. – № 1. – С. 38-46.
12. M. Kawai Force transients and minimum cross-bridge models in muscular contraction / M. Kawai, H.R. Halvorson // J. Muscle Res Cell Motil. – 2007. – Vol. 28, No 7-8. – P. 371-95.
13. Huxley A.F. Muscle structure and theories of contraction / A.F. Huxley // Prog Biophys Biophys Chem. – 1957. – Vol. 7. – P. 255-318.
14. Smith D.A. Strain-dependent cross-bridge cycle for muscle / D.A. Smith, M.A. Geeves // Biophys J. – 1995. – Vol. 69, No 2. – P. 524-37.
15. Siemankowski R.F. ADP dissociation from actomyosin subfragment 1 is sufficiently slow to limit the unloaded shortening velocity in vertebrate muscle / R.F. Siemankowski, M.O. Wiseman, H.D. White // Proc Natl Acad Sci USA. – 1985. – Vol. 82, No 3. – P. 658-662.
16. Load-dependent kinetics of force production by smooth muscle myosin measured with optical tweezers / C. Veigel, J.E. Molloy, S. Schmitzи et al. // Nat Cell Biol. – 2003. – Vol. 5, No 11. – P. 980-985.
17. Nyitrai M. Adenosine diphosphate and strain sensitivity in myosin motors / M. Nyitrai, M.A. Geeves // Philos Trans R Soc Lond B Biol Sci. – 2004. – Vol. 359, No 1452. – P. 1867-1877.

Поступила в редакцию 27.02.2012 г.

УДК 581.132:631.559

ВПЛИВ ПОХІДНИХ ФЕНІЛАНТРАНІЛОВОЇ КИСЛОТИ НА РІСТ ЛИСТКІВ, СУМАРНИЙ ВМІСТ ХЛОРОФІЛУ А І В ТА ВРОЖАЙНІСТЬ ОЗИМОЇ ПШЕНИЦІ

С. О. Приплавко, В. М. Гавій, О. В. Суховєєв, В. В. Суховєєв*
Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя, м. Ніжин
**Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України, м. Київ*

У статті подано результати впливу похідних фенілантранілової кислоти на основі біометалів на окремі фізіолого-біохімічні показники рослин. Встановлено, що застосування досліджуваних речовин для інкрустації насіння у нормі 10 г/т ефективно впливає на фотохімічну активність хлоропластів листків на різних фазах вегетації та врожайність озимої пшениці сорту Переяславська.

Ключові слова: фенілантранілові комплекси, площа асиміляційного апарату, накопичення хлорофілу, фази вегетації, врожайність.

Вступ. На сьогодні велика роль у підвищенні продуктивності сільськогосподарських культур належить регуляторам росту рослин. У списку дозволених для впровадження в сільськогосподарське виробництво України нараховується лише декілька десятків регуляторів росту рослин [1 – 5], із яких понад п'ятдесят є біостимуляторами. Незначна кількість із цих препаратів рекомендована для використання на зернових культурах [1, 5]. Їх застосування надає можливість спрямовано регулювати найважливіші процеси у рослинному організмі, найповніше реалізувати потенційні можливості сорту, закладені в геномі природою та селекцією. Важливим аспектом дії регуляторів росту є підвищення стійкості рослин до несприятливих факторів середовища – високих і низьких температур, нестачі вологи, фітотоксичної дії пестицидів, ураження хворобами та шкідниками [6, 7].

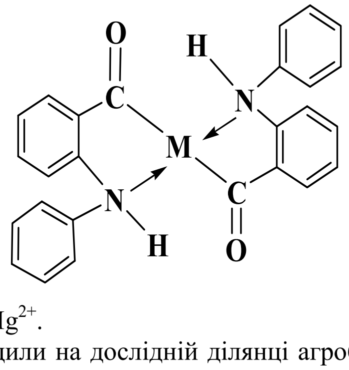
Сучасні традиційні технології сільськогосподарського виробництва є досить енергоємкими [3]. Тому, постає необхідність інтенсифікації виробництва продуктів харчування при значному скороченні енергетичних витрат. Таким шляхом підвищення продуктивності сільськогосподарських культур є впровадження екологічно безпечних регуляторів росту рослин нового покоління на основі біометалів.

Відомо, що природа металу суттєво впливає на біологічні функції рослин. Так іони Магнію, Кальцію, Феруму, Кобальту, Купруму, Цинку, Мангану, Молібдену, діючи через ферментативні системи (або безпосередньо зв'язуючись з біополімерами), можуть стимулювати чи гальмувати процеси росту, розвитку та репродуктивні функції рослин [8]. При цьому прискорюється наростання зеленої маси та кореневої системи, більш активно використовуються поживні речовини, збільшуються захисні можливості рослин. Це дає змогу зменшити кількість використання фунгіцидів та протруювачів без погіршення їх захисної дії [9].

Більшість металів здатні утворювати з органічними сполуками комплекси (хелати). Показано, що в комплексній сполуці активність біометалів зростає в багато разів [10]. Такими сполуками можуть бути фенілантранілові металокомплекси, рістрегулююча активність яких вивчалася раніше у лабораторних умовах [11, 12].

Метою роботи є дослідження впливу фенілантранілових препаратів на основі біометалів на ріст листків, сумарний вміст хлорофілу a і b та врожайність озимої пшениці сорту Переяславська.

Матеріали та методи. Для досліджень використовували комплексні сполуки на основі фенілантранілової кислоти, які містять іони мікро- та макроелементів загальної формули:



де M: Mn^{2+}, Co^{2+}, Cu^{2+}, Fe^{2+}, Ca^{2+}, Mg^{2+}.

Польові дослідження проводили на дослідній ділянці агробіостанції Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя протягом 2007-2010 років. Ділянку розбивали на варіанти та повторності. Насіння інкрустували досліджуваними речовинами. Нами були використані такі варіанти: контроль (без обробки насіння препаратами), емістим – відомий стимулятор росту рослин як еталон та розчини фенілантранілових комплексів, що містили мікроелементи Mn^{2+}, Co^{2+}, Cu^{2+}, або макроелементи Fe^{2+}, Ca^{2+}, Mg^{2+}.

Загальна площа поля становила 400 м², площа однієї ділянки – 12 м². Кількість ділянок – 32, варіантів – 8, повторність – чотириразова. На одну ділянку висівали по 300 г (250 кг/га) насіння озимої пшениці сорту Переяславська, яке обробляли відповідним комплексом у загальному розрахунку 10 г/т насіння з додаванням клейкої речовини – 1% NaКМЦ.

Кліматичні умови під час проростання насіння відповідали середнім багаторічним даним для території Полісся. Протягом росту озимої пшениці було достатньо вологи та суттєвих відхилень від норм не спостерігалось.

Для визначення площі листкового апарату застосовували метод висічок [13]. Площу листкового апарату рослин виражали в $м^2$/га.

Вміст хлорофілу визначали фотометричним методом, який базується на реєстрації оптичних характеристик спиртової витяжки пігментів із листків рослин [13]. Екстракцію пігментів проводили у різні фази вегетації 96% етиловим спиртом. Отриману витяжку колориметрували на фотоелектроколориметрі (КФК-2) при червоному світло-фільтрі. Отримані значення сумарного вмісту хлорофілів a і b виражали у мг/г. Урожайність озимої пшениці визначали ваговим методом [14]. Результати отриманих даних опрацьовували за допомогою дисперсійного аналізу з виведенням НІР.

Результати дослідження та їх обговорення. Процесом первинного утворення органічних речовин у рослинному організмі є фотосинтез. З навколишнього середовища рослини за рахунок фотосинтезу засвоюють вуглець, вміст якого близько 42-45% маси сухої речовини рослин [15 – 16]. Найбільше накопичення сухої маси урожаю (90-95%) відбувається за рахунок фотосинтезу [17]. Тому, добре розвинутий фотосинтетичний апарат, оптимальний за площею, динамікою й інтенсивністю функціонування, є важливим критерієм високої продуктивності на рівні агрофітоценозу. Він повинен забезпечувати оптимальне проходження процесів фотосинтезу в усі фази росту й розвитку рослин. Продуктивність роботи фотосинтетичного апарату впливає на загальну продуктивність посівів. Формування урожаю в результаті фотосинтетичної діяльності рослин в посівах визначається розмірами асиміляційної поверхні листків [18].

Нами визначалася площа листкової поверхні рослин озимої пшениці сорту Переяславська за передпосівної обробки насіння досліджуваними препаратами. Результати досліджень узагальнено у табл. 1.

Таблиця 1

Площа листків озимої пшениці у фазу осіннього кущіння при застосуванні фенілантранілатів металів для передпосівної обробки насіння, тис. $м^2$/га

Варіант		Площа поверхні листків, тис. $м^2$/га			
		2007 р.	2008 р.	2009 р.	Середня
Контроль		35,3	35,9	36,1	35,7
Емістим		38,1	39,1	38,7	38,6
Центральний атом фенілантранілату:	Mn^{2+}	45,9	46,9	46,7	46,5
	Co^{2+}	41,0	40,4	41,2	40,9
	Cu^{2+}	39,3	39,0	38,6	39,0
	Fe^{2+}	44,1	45,2	45,7	45,0
	Mg^{2+}	37,9	38,4	38,7	38,3
	Ca^{2+}	36,5	38,8	38,5	37,9
$НІР_{0,95}$		1,6	1,4	1,9	–

Результати проведених нами досліджень показали, що при передпосівній обробці насіння озимої пшениці досліджуваними препаратами площа асиміляційного апарату у фазі осіннього кущіння зростала в усіх варіантах порівняно до контролю. Найбільшу ефективність виявили фенілантранілати з центральним атомом Mn^{2+} та Fe^{2+}. Вони перевищували показники контролю на 30% та 26%, а емістиму на 20 та 16% відповідно. Також, збільшенню площі листкової поверхні сприяє застосування фенілантранілового комплексу на основі Co^{2+}, який підвищує даний показник на 14% порівняно до контролю та на 6% – до емістиму.

Продуктивність рослин озимої пшениці залежить певною мірою від функціонування асиміляційного апарату. Фотосинтетичний асиміляційний листковий апарат характеризується передусім, оптимальністю розмірів, швидкістю формування і тривалістю функціонування. Від його просторової орієнтації як оптичної системи, насиченості хлорофілом, інтенсивності та продуктивності фотосинтезу й інших складових фотосинтетичної діяльності залежить повнота використання відновлювального і найбільш екологічно чистого фактора інтенсифікації – сонячної радіації. До того ж, одним з факторів оптимізації функціонування асиміляційного апарату є рівень мінерального живлення.

З'ясовано, що сумарний вміст хлорофілів a і b у листках озимої пшениці в ході її вегетації при інкрустації насіння фенілантранілатами на основі біометалів Mn^{2+}, Fe^{2+}, Cu^{2+} є на досить стабільному рівні (6, 43-6,94 мг/г сирої речовини). Помітне зниження вмісту хлорофілів у листках цих рослин зафіксовано лише на кінцевих етапах вегетації (від фази колосіння до повної стиглості), що пов’язано з природним старінням і відмиранням листкового апарату (табл. 2)

Таблиця 2

Динаміка накопичення сумарного вмісту хлорофілу а і б у верхніх листках озимої пшениці сорту Переяславська при інкрустації насіння фенілантранілатами на основі біометалів (середнє за 2007-2010 роки), мг/г сирої речовини

Фаза онтогенезу	Сумарний вміст хлорофілу a і b, мг/г сирої речовини							
	Конроль	Емістим	Центральний атом фенілантранілату:					
			Mn^{2+}	Co^{2+}	Cu^{2+}	Mg^{2+}	Fe^{2+}	Ca^{2+}
Осіннє кущіння	5,93	6,42	6,71	6,52	6,54	6,22	6,63	6,10
Весняне відростання	5,84	6,25	6,67	6,34	6,43	6,11	6,45	5,91
Вихід у трубку	6,21	6,32	6,94	6,76	6,64	6,54	6,75	6,36
Колосіння	5,63	6,20	6,52	6,55	6,42	6,32	6,43	6,23
Квітування	4,25	4,07	4,74	4,32	4,35	4,01	4,41	4,12
Молочна стиглість	3,03	3,72	3,82	3,61	3,93	3,13	3,64	2,95

Відомо, що процеси фотосинтезу є основними факторами, які впливають на формування врожаю у рослин. Дослідження, які були проведені для встановлення впливу фенілантранілових комплексів на формування врожаю озимої пшениці сорту Переяславська показали, що всі фенілантранілати на основі біометалів сприяють збільшенню врожайності в середньому на 21,3–44,7%. Найбільшу ефективність за даним показником виявили фенілантранілати на основі Mn^{2+}, Fe^{2+} та Cu^{2+}, які збільшували врожайність озимої пшениці відповідно на 44,7, 33,9 та 30,0% порівняно до контролю (таблиця 3). Також, вони виявили більшу ефективність порівняно до еталону – емістиму (в середньому на 26,3, 16,8 та 13,8 % відповідно).

Таблиця 3

Урожайність озимої пшениці сорту Переяславська при застосуванні фенілантранілатів металів для передпосівної обробки насіння, ц/га

Варіант		Урожайність озимої пшениці, ц/га			
		2008 р.	2009 р.	2010 р.	Середня
Контроль		44,5	43,5	31,4	39,8
Емістим		50,6	51,1	35,1	45,6
Центральний атом фенілантранілату:	Mg^{2+}	55,8	52,9	36,2	48,3
	Co^{2+}	57,6	57,9	37,4	50,9
	Cu^{2+}	58,2	59,1	38,5	51,9
	Fe^{2+}	60,3	59,6	40,1	53,3
	Mn^{2+}	66,8	64,8	41,4	57,6
	Ca^{2+}	54,8	55,8	35,9	48,8
$НІР_{0,95}$		3,6	3,5	3,5	–

Відповідно до отриманих даних урожайність озимої пшениці симбатно корелює з площею асиміляційного апарату та вмістом хлорофілу у листках озимої пшениці.

Висновки. Таким чином, застосування досліджуваних речовин для інкрустації насіння у нормі 10 г/т ефективно впливає на ріст листків, сумарний вміст хлорофілу а і б на різних фазах вегетації та врожайність озимої пшениці сорту Переяславська. Тому, металокомплексні сполуки на основі фенілатранілової кислоти можуть мати практичний інтерес для пошуку нових регуляторів росту сільськогосподарських культур і потребують подальших досліджень.

РЕЗЮМЕ

В статье приведены результаты влияния производных фенилантраниловой кислоты на основе биометаллов на отдельные физиолого-биохимические показатели растений. Установлено, что применение исследуемых веществ для инкрустации семян в норме 10 г/т эффективно влияет на фотохимическую активность хлоропластов листьев на разных фазах вегетации и урожайность озимой пшеницы сорта Переяславская.

Ключевые слова: фенилантраниловые комплексы, площадь ассимиляционного аппарата, накопление хлорофилла, фазы вегетации, урожайность.

SUMMURY

The article shows the results of the influence of phenylanthranilic acid derivatives based on biometalls on some individual physiological and biochemical indexes of plants. It is determined that the application of these substances for the incrustation of seeds in the norm of 10 g/t effectively influences on photo-chemical activity of chloroplast of leaves at different phases of vegetation and the yield of winter wheat of Pereyaslovskaya variety.

Keywords: phenylanthranilic complexes, the area of the assimilation system, the accumulation of chlorophyll, productivity.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Регулятори росту рослин. Перелік пестицидів і агрохімікатів, дозволених до використання в Україні. – К.: Юнівест Маркетинг, 1996. – С. 94-96.
2. Елементи регуляції в рослинництві: зб. наук. пр. – К.: Компас, 1998. – 358 с.
3. Шевченко А.О. Регулятори росту в рослинництві – ефективний елемент сільськогосподарських технологій. Стан та перспективи / А.О. Шевченко, В.О. Тарасенко // Регулятори росту рослин у землеробстві: Зб. наук. пр. – К.: УДНДПТІ Агроресурси, 1998 – С. 8-14.
4. Регуляторы роста растений. Список химических и биологических средств борьбы с вредителями, болезнями растений и сорняками и регуляторов роста растений, разрешенных для применения в сельском хозяйстве Украины на 1992–1996 гг. – К., 1992. – Ч. 2. – С. 232-257.
5. Регулятори росту рослин. Додаток № 2 до „Переліку пестицидів і агрохімікатів, дозволених до використання в Україні". – К., 1996. – С. 14.
6. Регулятори росту на основі природної сировини та їх застосування в рослинництві / В.К. Яворська, І.В. Драговоз, Л.О. Крючкова та ін. – К.:Логос, 2006. – 176 с.
7. Самойлов Л.Н., Комплексное применение средств химизации при возделывании ячменя / Л.Н. Самойлов, З.К. Благовещенская // Химизация сельского хозяйства. – 1991. – № 6. – С. 101–105.
8. Суховєєв В.В. Металокомплексні сполуки – диригенти фотосинтезу / В.В. Суховєєв, Г.Г. Сенченко, Г.О. Ковтун. – К.: ІБОНХ НАНУ, 1997. – 126 с.
9. Пономаренко С.П. Регуляторы роста растений / С.П. Пономаренко – К.: Институт биоорганической химии и нефтехимии, 2003. – 319 с.
10. Коць С.Я. Мінеральні елементи і добрива в живленні рослин / С.Я. Коць, Н.В. Петерсен – К.: Логос, 2005. – 150 с.
11. Рострегулирующая активность солей и комплексов металлов с производными N-фенилантраниловой кислоты / Е.Е. Крисс, Л.И. Рейдалова, В.П. Борисенко [и др.] // Физиологически активные вещества. – 1985. – Вып. 17. – С. 49-53.
12. Исследование гиббереллиноподобного действия фенилантранилатов на основе микроэлементов на проростках льна / В.В. Суховеев, С.А. Приплавко, А.В. Суховеев, В.Н. Гавий // Telavis saxelmwifo universiteti. Samecniero Sromebis krebuli. Сборник научных трудов. – Telavi – 2010. – Т. 1 – С.48-55.
13. Грицаєнко З.М. Методи біологічних та агрономічних досліджень рослин та ґрунтів / З.М. Грицаєнко, А.О. Грицаєнко, В.П. Карпенко – К.: ЗАТ „НІЧЛАВА", 2003. – 320 с.
14. Основи наукових досліджень в агрономії / В.О.Єщенко, П.Г. Копитко, В.П. Опришко, П.В. Костогриз. – К.: Дія, 2005. – 288 с.
15. Бабич А.О. Сучасне виробництво і використання сої / А.О. Бабич. – К.: Урожай, 1993. – 429 с.
16. Бабич А.А. Фотосинтетическая деятельность и продуктивность сои при известковании, внесении удобрений и инокуляции в условиях Лесостепи Украины / А.А. Бабич, В.Ф. Петриченко // Вестн. с.-х. науки. – 1992. – № 5-6. – С. 110-117.
17. Злобін Ю.А. Курс фізіології і біохімії рослин / Злобін Ю.А. – Суми: Університетська книга, 2004. – 463 с.
18. Грицаєнко З.М. Гербіциди і врожай. Фізіолого-біохімічні аспекти формування продуктивності сої при застосуванні гербіцидів і регуляторів росту / З.М. Грицаєнко, О.В. Голодрига // Карантин і захист рослин. – № 7. – 2004. – С. 21-22.

Надійшло до редакції 19.09.2011 р.

УДК 633.854.78:631.524.5

НАСЛЕДОВАНИЕ ЖИЛКОВАНИЯ ЛИСТЬЕВ У ПОДСОЛНЕЧНИКА КУЛЬТУРНОГО

А. И. Сорока
Институт масличных культур НААН Украины, г. Запорожье

Изучено наследование веерного жилкования листа у культурного подсолнечника. Гибриды F_1 от скрещивания мутантов с разным типом веерного жилкования характеризовались обычным для подсолнечника сетчатым жилкованием листовой пластинки, а в F_2 кроме сетчатого выделяли оба типа веерного жилкования, а также класс растений с совместным их проявлением. Делается вывод об участии в генетическом контроле веерного жилкования двух неаллельных рецессивных генов с комплементарным типом взаимодействия, а также о детерминировании сетчатого жилкования комбинацией как минимум двух доминантных аллелей генов.
Ключевые слова: подсолнечник культурный, мутант, наследование, лист, жилкование.

Введение. В настоящее время подсолнечник (*Helianthus annuus* L.) – одна из важнейших технических культур в мире. В Украине посевные площади под подсолнечником составляют более 3 млн. га. Известно достаточно большое количество работ по расширению генетической изменчивости подсолнечника с помощью индуцированного мутагенеза. Результаты многих из них оказались плодотворными [1, 2]. Несмотря на кажущуюся многочисленность наследуемых изменений, полученных в результате индуцированного мутагенеза, вопрос расширения генофонда этой культуры стоит до сих пор остро.

Интерес экспериментаторов к подсолнечнику как к культуре, требующей существенного генетического улучшения, подтверждают регулярные международные встречи по вопросам индуцированного мутагенеза у растений. Так, в последние годы индийские исследователи получили мутант подсолнечника, имеющий 125 листьев по сравнению с 30-35 у родительской линии и карлик высотой около 11 см при высоте 180 см у родителя. При этом обе мутации имели простой генетический контроль [3]. Получен ряд мутантов подсолнечника со значительно измененным качеством масла, в частности с увеличенным содержанием отдельных жирных кислот [4, 5]. Оригинальным направлением является получение с помощью индуцированного мутагенеза генотипов подсолнечника с измененной степенью поглощения отдельных элементов из почвы с целью их использования для фитоэкстракции токсичных металлов [6]. Предпринимаются попытки индуцировать изменчивость у подсолнечника и других культур семейства Астровые (*Asteraceae*), используя мутагенез *in vitro* и подвергая обработке либо каллус, полученный из эксплантов, либо сами экспланты [7].

Ограниченность исходного материала сказывается не только на генетическом однообразии передаваемых в производство сортов и гибридов подсолнечника, но обуславливает и слабую изученность частной генетики этой культуры. В силу вышесказанного получение новых мутантных признаков у этой культуры и изучение их генетического контроля является важным и актуальным.

Целью данной работы было изучить наследование двух типов веерного жилкования листьев подсолнечника, выделенных в результате индуцированного мутагенеза.

Материал и методы исследований. В качестве исходного материала использовали мутанты с измененным, по сравнению с исходной формой, типом жилкования двух самоопыленных линий подсолнечника селекции Института масличных культур НААН, которые являются компонентами уже созданных коммерческих гибридов и широко используются в настоящее время для получения новых удачных комбинаций скрещивания.

Один из мутантов был выделен в M_2 в результате обработки химическим мутагеном этилметансульфонатом зрелых семян линии ЗЛ-9. У него основная часть боковых жилок первого порядка отходит не от центральной жилки, а от черешка. Изменен также угол отклонения боковых жилок от центральной жилки. У мутанта он более острый и составляет 30-35º, тогда как в контроле – 60-70º. Нередко боковые жилки доходят до края листовой пластинки и даже выступают за него в виде зубцов или щетинок. Эту мутацию с частотой 1,2% наблюдали с концентрацией мутагена 0,5% при 6-ти часовой экспозиции.

Второй мутант был выделен в M_3 в результате обработки незрелых зародышей 9-10 дневного возраста линии ЗЛ-95 0,02%-ным водным раствором этилметансульфоната в течение 16-ти часов. Для растений, несущих эту мутацию, характерным было отсутствие ярко выраженной центральной жилки, гофрированность листовой пластинки в местах расположения главных жилок вплоть до наличия на пластинке израстаний. Для исходных линий ЗЛ-9 и ЗЛ-95 характерен сетчатый тип жилкования, когда боковые жилки, не доходя до края листовой пластинки, многоразово ветвятся и их многочисленные ответвления соединяются между собой, образуя сетку из отдельных петель. Для получения семян гибридов F_1 мутантные растения линии ЗЛ-9 кастрировали согласно стандартной методики [8] и опыляли пыльцой мутанта линии ЗЛ-95, который являлся отцовским компонентом в данной гибридной комбинации. Для получения семян F_2 гибридные растения F_1 индивидуально изолировали и самоопыляли. Сбор семян проводили вручную. Семена F_2 высевали в полевых условиях и на соответствующей стадии развития растений проводили визуальный анализ на наличие мутантного или нормального признака. Наследование мутантных признаков выполняли по общеизвестным методикам генетического анализа качественных признаков [9]. Расщепления и проверку гипотез проводили по критерию χ^2 [10].

Результаты исследований и обсуждение. На рис. 1 представлен мутант, выделенный при обработке незрелых зародышей линии ЗЛ-95 с веерным жилкованием листьев у которого центральная жилка выражена не четко. Часто такие листья несли еще и израстания у основания листа.

Рис. 1. Мутант с веерным жилкованием и израстаниями у основания листа, выделенный из линии ЗЛ-95

Первоначально было изучено наследование данного признака в скрещиваниях с исходной формой. Гибриды первого поколения по типу жилкования листа ничем не отличались от контроля. Листья всех растений F_1 характеризовались сетчатым жилкованием, свойственным исходной линии. В F_2 большинство растений несли такой же признак, как и гибриды F_1, а приблизительно четвертая часть – имела веерное жилкование листа. Проведенный гибридологический анализ (табл. 1) свидетельствует о том, что признак измененного (веерного) жилкования листьев является рецессивным и наследуется моногенно в скрещиваниях с исходной линией.

Таблица 1

Наследование признака «веерное жилкование» при скрещивании мутанта подсолнечника с исходной линией ЗЛ-95

Фенотип растений F_1	Всего растений, шт.	Расщепление в F_2		Модель расщепления	$\chi 2$
		сетчатое жилкование	веерное жилкование		
Сетчатое жилкование листа	95	73	22	3:1	0,22

Примечание: χ^2_{05} (df=1)=3,84.

Похожая мутация веерного жилкования листа была ранее нами обнаружена при обработке зрелых семян линии ЗЛ-9. В этом случае четко выделялась центральная жилка, а остальные жилки располагались веерообразно по направлению от черешка к краям листовой пластинки (рис. 2).

Тест на аллелизм показал, что гены, детерминирующие веерное жилкование у обеих линий, различны, поскольку листья гибридов от скрещивания этих мутантов между собой имели обычное сетчатое жилкование. В F_2 наблюдали расщепление на 4 фенотипических класса: листья с сетчатым жилкованием, листья с веерным жилкованием, характерным для линии ЗЛ-95, листья с веерным жилкованием, от линии ЗЛ-9 и листья с комбинированным веерным жилкованием. В последнем случае кроме веерного жилкования по типу мутанта линии ЗЛ-9 листья характеризовались очень сильной зубчатостью и пузырчатостью, а сами растения несли признаки угнетенности (рис. 3).

Рис. 2. Мутант с веерным жилкованием листа, выделенный из линии ЗЛ-9

Рис. 3. Мутантная форма с веерным жилкованием и сильной изрезанностью листа, выделенная из популяции F_2 ЗЛ-95 × ЗЛ-9

Проведенный гибридологический анализ двух популяций F_2 указывает на расщепление, типичное для дигибридного скрещивания при комплементарном взаимодействии двух генов (табл. 2). Очевидно, гены, отвечающие за веерный тип жилкования этих двух мутантов независимы, т.е. локализованы, скорее всего, в разных хромосомах и являются рецессивными. Несмотря на то, что оба этих гена обуславливают веерный тип жилкования листа, каждый из них имеет свои особенности фенотипического проявления, что позволяет легко проводить их визуальную идентификацию. Двойная рецессивная гомозигота, являясь в данном случае новообразованием, имеет веерное жилкование листа, подобное мутанту линии ЗЛ-9, сильно деформированный лист и отставание в росте и развитии. Такие растения фенотипически легко отличаются от обоих мутантных генотипов.

Таблица 2

Расщепление в F_2 при скрещивании мутантов с разным типом веерного жилкования листа, выделенных из линий ЗЛ-9 и ЗЛ-95

Вариант	Классы фенотипов в F_2			
	жилкование сетчатое	жилкование веерное от ЗЛ-9	жилкование веерное от ЗЛ-95	лист изрезанный с жилкованием веерным по типу ЗЛ-9
Фенотип родителей		♂	♀	
Фенотип гибрида F_1	F1			
Популяция № 1				
Фактическое расщепление в F_2	45	12	16	7
Теоретически ожидаемое расщепление в F_2	45	15	15	5
Ожидаемое соотношение	9	3	3	1
χ^2	1,47			
Популяция № 2				
Фактическое расщепление в F_2	23	5	5	1
Теоретически ожидаемое расщепление в F_2	20	6	6	2
Ожидаемое соотношение	9	3	3	1
χ^2	1,28			

Примечание: χ^2_{05} (df=3)=7,84.

Таким образом, при изучении генетики жилкования листа у подсолнечника было установлено, что в генетическом контроле данного признака участвуют два неаллельных гена, очевидно, локализованных в разных хромосомах с комплементарным типом взаимодействия. Рецессивное состояние любого из этих генов обуславливает один из типов веерного жилкования, а комбинация как минимум двух доминантных аллелей приводит к появлению сетчатого жилкования. Двойная рецессивная гомозигота имеет собственное фенотипическое проявление.

Выводы. Гибриды подсолнечника F_1 от скрещивания между собой индуцированных этилметансульфонатом мутантов с разным типом веерного жилкования характеризуются сетчатым жилкованием листовой пластинки. По результатам гибридологического анализа в F_2 выявлено четыре класса фенотипов растений в соотношении, близком к 9:3:3:1.

Установлено, что в генетическом контроле жилкования листьев принимают участие два гена, локализованных в разных хромосомах. Рецессивное их состояние обуславливает появление веерного жилкования, а комбинация как минимум двух доминантных аллелей детерминирует сетчатое жилкование.

РЕЗЮМЕ

Вивчено успадкування віялового жилкування листка у культурного соняшнику. Гібриди F_1 від схрещування мутантів з різним типом віялового жилкування характеризувалися звичайним для соняшнику сітчастим жилкуванням листкової пластинки, а в F_2 крім сітчастого виділяли обидва типи віялового жилкування, а також клас рослин зі спільним їх проявом. Робиться висновок про участь в генетичному контролі віялового жилкування двох неалельних рецесивних генів з комплементарним типом взаємодії, а також про детермінованість сітчастого жилкування комбінацією як мінімум двох домінантних алелів генів.

Ключові слова: соняшник культурний, мутант, успадкування, лист, жилкування.

SUMMARY

The inheritance of fan-shaped leaf venation in cultivated sunflower was studied. F_1 hybrids from crosses of mutants with different types of fan-shaped venation were characterized by an ordinary for sunflower reticulate venation of a leaf blade, and in F_2 aside from reticulated venation, both types of fan-shaped venation were isolated, as well as the class of plants with their co-expression. It is concluded that two non-allelic recessive genes with a complementary type of interaction participated in the genetic control of fan-shaped venation, as well as that reticulated venation is determined by a combination of at least two dominant alleles of the genes.

Keywords: cultivated sunflower, mutant, inheritance, leaf, venation.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Российский солнечный цветок / А.А. Калайджян, Л.В. Хлевной, Н.Н. Нещадим и др. – Краснодар: Совет. Кубань, 2007. – 352 с.
2. Лях В.А. Индуцированный мутагенез масличных культур / В.А. Лях, И.А. Полякова, А.И. Сорока. – Запорожье: Запорожский национальный университет, 2009. – 266 с.
3. Jambhulkar S.J. Development and Utilization of Genetic Variability through Induced Mutagenesis in Sunflower (Helianthus annuus L.) / S.J. Jambhulkar, A.S. Shitre // Induced Plant Mutations in the Genomics Era. : Q.Y. Shu (ed.). - Rome: Food and Agriculture Organization of the United Nations – 2009. – P. 104-105.
4. Inheritance of high stearic acid content in sunflower mutant CAS-14 / B. Perez-Vich, L. Velasco, J. Munoz-Ruz, Fernandez-Martinez J.M. // Crop Science. – 2006. – Vol. 46. – P. 22-29.
5. Velasco L. A new sunflower mutant with increased levels of palmitic acid in the seed oil / L. Velasco, B. Perez-Vich, J.M. Fernandez-Martinez. // Helia. – 2008. – Vol. 31, No 48. – P. 56-60.
6. Chemical mutagenesis - a promising technique to increase metal concentration and extraction in sunflowers / E. Nehnevajova, R. Herzig, G. Federer et al. // Int. J. Phytoremediation. – 2007. – Vol. 9, No 2. – P. 149-165.
7. Latado R.R. In vitro Mutation of Chrysanthemum (Dendranthema grandiflora Tzvelev) with Ethylmethanesulphonate (EMS) in Immature Floral Pedicels / R.R. Latado, A.H. Adames, A.T. Neto // Plant Cell, Tissue and Organ Culture. – 2004. – Vol. 77, No 1. – P. 103-106.
8. Пустовойт Г.В. Селекция подсолнечника на групповой иммунитет методом межвидовой гибридизации / Г.В. Пустовойт // Подсолнечник. – М.: Колос, 1975. – С. 164-209.
9. Серебровский А. С. Генетический анализ / А. С. Серебровский. − М.: Наука, 1970. – 342 с.
10. Айала Ф. Введение в популяционную и эволюционную генетику / Ф. Айала .– М.: Мир, 1984. – 232 с.

Поступила в редакцию 13.10.2011 г.

УДК 591.473.3: 577.12

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ СТЕРОИДНОГО И НЕСТЕРОИДНОГО АНАБОЛИКОВ НА ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ СКЕЛЕТНОЙ МЫШЦЫ БЕЛЫХ КРЫС

В. В. Труш

В экспериментах на молодых белых крысах-самках с помощью методов электромиографии и эргографии установлено, что хроническое введение тестостерон-пропионата оказывало первоначальный (спустя 5-15 инъекций) облегчающий эффект на синаптическую передачу и приводило (спустя 5 инъекций) к увеличению максимально достижимой амплитуды сокращения и улучшения скоростных характеристик передней большеберцовой мышцы, которые сохранялись по мере дальнейшего введения тестостерона в организм (вплоть до 30-ти инъекций) и косвенно свидетельствовали в пользу возможного изменения метаболического профиля мышцы в сторону увеличения удельной доли быстрых мышечных волокон. Хроническое введение нестероидного анаболика инозина на начальных этапах его применения (спустя 10-20 инъекций) обусловило улучшение силовых характеристик мышцы без изменения ее массы, тогда как в дальнейшем – сопровождалось появлением признаков увеличения удельной доли медленных или промежуточного типа волокон в мышце (спустя 30-60 инъекций) и увеличением ее массы (спустя 60 инъекций).

Ключевые слова: анаболики, тестостерон, инозин, скелетная мышца, одиночное сокращение мышцы, латентный период возбуждения мышцы.

Введение. Естественные и синтетические анаболики стероидной и нестероидной природы нашли широкое применение в клинической практике и спортивной медицине в связи с выраженным анаболическим эффектом на многие органы организма: скелетные мышцы, сердце, почки, печень, лимфоидные органы, костную ткань и ряд других структур. Анаболическое действие андрогенов и нестероидных анаболиков проявляется как в нормальных физиологических условиях, так и при различных патологических состояниях, сопровождающихся усиленным катаболизмом белков: хронических инфекциях, тяжелых травмах, хирургических вмешательствах, наследственно обусловленных миодистрофиях и при других патологиях [1, 2]. В литературе существует мнение [3, 4], согласно которому стероидные и нестероидные анаболические препараты могут даже частично компенсировать недостаток других анаболических гормонов в организме, например, инсулина при инсулинзависимом сахарном диабете, и кроме того, замедлить дегенерацию β-клеток островков Лангерганса. Некоторые авторы [5 – 7] высказывают предположение относительно способности стероидных анаболиков замедлять катаболизм белков в тканях, индуцированный избытком других гормонов (например, глюкокортикоидов) или определенными нарушениями обмена веществ.

Несмотря на широкое применение естественных или синтетических анаболических препаратов стероидной и нестероидной природы в современной медицине, характер их влияния на скелетные мышцы изучен недостаточно. В частности, в литературе существует мнение [8], согласно которому анаболический эффект андрогенных препаратов на скелетные мышцы является индивидуальным и зависит от исходного метаболического профиля мышцы, характера нейтрофического ее контроля, режима работы при мышечной деятельности и многих других обстоятельств.

Одним из хорошо изученных нестероидных анаболиков в плане влияния на миокард сердца является нуклеозид рибозы – инозин (или рибоксин), который синтезируется в клетках животного организма в результате естественных метаболических реакций, принимает участие в образовании пуринового нуклеотида аденозина, благодаря малым размерам, по сравнению с АТФ, способен проникать внутрь клеток и выступает в качестве универсального анаболического стимулятора, усиливающего процессы регенерации и репарации в любых периферических тканях [9 – 11].

В многочисленных экспериментах на животных и клинических исследованиях на людях установлено его иммуностимулирующее, радиопротекторное, антиоксидантное и анаболическое действие [9, 10, 12, 13]. Учитывая же универсальность анаболического действия инозина на периферические ткани [9, 10], а также тот факт, что после введения в организм рибоксин преимущественно накапливается в миокарде, почках, печени и скелетных мышечных волокнах [14], можно предположить, что он должен определенным образом влиять не только на миокард, но и на функциональное состояние скелетных мышц при хроническом его введении, тем более в связи с тем, что экспериментально подтверждено [9, 14, 15] его анаболическое и инотропное действие на миокард сердца, являющийся, подобно скелетным мышцам, разновидностью исчерченной мышечной ткани. В литературе имеются сообщения [16], согласно которым инозин обладает способностью стимулировать потребление глюкозы и синтез гликогена в мышцах, увеличивать концентрацию АТФ в мышечных волокнах, тем самым улучшая условия снабжения им миофибрилл. Вместе с тем, литературные данные относительно характера влияния инозина на скелетную мышечную ткань при длительном его введении в организм весьма ограничены.

Целью работы является изучение влияния хронически вводимых тестостерона и рибоксина в терапевтических дозах на функциональное состояние передней большеберцовой мышцы белых крыс, относящейся к категории локомоторных мышц смешанного типа с преобладанием быстрых мышечных волокон [17].

Материалы и методы исследований. Эксперименты проводились на 130 половозрелых молодых (2-4 месячных) крысах-самках с исходной массой 220-240 г, первоначально разделенных на 3 группы: контрольную (n=10) и две опытных (n=60 в каждой), животные первой из которых подвергались хроническому введению тестостерон-пропионата, а второй – инозина в терапевтических дозах (0,6 мг/кг, подкожно, через день для тестостерона и 6 мг/кг, внутрибрюшинно, ежедневно для инозина) на протяжении от 10 до 60 дней. Таким образом, в пределах каждой из опытных групп в последующем было выделено по 6 подгрупп животных, получивших разное количество инъекций стероидного или нестероидного анаболиков (5, 10, 15 и т.д. вплоть до 30 инъекций для тестостерона и 10, 20, 30 и т.д. вплоть до 60 инъекций для инозина).

По окончании срока введения тестостерон-пропионата или инозина на животных проводили острый опыт, в котором с помощью электромиографии и эргографии исследовали некоторые параметры функционального состояния передней большеберцовой мышцы крыс при вызванном ее сокращении. Сокращение мышцы индуцировали путем раздражения сверхпороговым электрическим током (напряжение 200 мВ) малоберцового нерва. Частота электрической стимуляции нерва варьировала в диапазоне от 8 до 100 Гц, а внешняя нагрузка составляла 20 г. При каждой частоте электрического раздражения нерва мышца работала в течение 7 секунд, после чего следовал 1-минутный отдых и дальнейшая работа мышцы при следующей частоте раздражения нерва. Степень укорочения мышцы измерялась с помощью потенциометрического датчика ПТП-1, включенного в мост постоянного тока МОД-61. Напряжение разбаланса моста через аналогово-цифровой преобразователь подавалось на вход компьютера и регистрировалось с помощью специально разработанной программы.

Перед работой мышцы и по окончании ее работы проводилась регистрация электромиограммы, на основании которой оценивали продолжительность латентного периода вызванного возбуждения мышцы. Электрический ответ мышцы вызывали путем электрического раздражения малоберцового нерва пороговыми импульсами длительностью в 0,15 мс с частотой 4 Гц. Для усиления биопотенциалов мышцы применялся дифференциальный электрометрический усилитель с режекторным гираторным фильтром (50 Гц), соединенный с цифровым интерфейсом и компьютером.

Экспериментальные данные обрабатывались с использованием непараметрического критерия Манна-Уитни. На всех этапах эксперимента придерживались требований "Общих этических принципов экспериментов на животных". Эвтаназию животных по окончании острого опыта проводили путем введения летальной дозы тиопентала натрия.

Результаты исследований. Сравнительный анализ влияния стероидного и нестероидного анаболика на функциональное состояние передней большеберцовой мышцы показал следующее.

Инъецирование тестостерон-пропионата в животный организм сопровождалось первоначальным (спустя 5-15 инъекций) облегчающим его эффектом на синаптическую передачу, в пользу чего свидетельствует укорочение латентного периода вызванного возбуждения передней большеберцовой мышцы ($p<0{,}05$ относительно контроля), тогда как в дальнейшем, несмотря на введение гормона, продолжительность латентного периода вызванного возбуждения мышцы нормализовывалась (табл. 1). Рибоксин не

Таблица 1

Средние значения ($\overline{X} \pm m$) латентного периода вызванного возбуждения передней большеберцовой мышцы, продолжительности достижения ею максимальной амплитуды сокращения и удержания амплитуды сокращения на максимальном уровне у интактных крыс, животных, получивших от 10-ти до 60-ти инъекций инозина (И), и крыс, получивших от 5-ти до 30-ти инъекций тестостерон-пропионата (Т)

Группа животных	Латентный период возбуждения мышцы, мс		Продолжительность периодов, с	
	исходный	после работы мышцы	достижения максимальной амплитуды сокращения	удержания максимальной амплитуды сокращения
Контроль	2,3±0,10	2,3±0,11	1,2±0,18	5,1±0,38
10 инъекций **И**	2,3±0,08	2,4±0,11	0,9±0,12	4,8±0,28
20 инъекций **И**	2,0±0,10	2,1±0,10	1,1±0,17	4,6±0,27
30 инъекций **И**	2,1±0,11	2,2±0,12	0,4±0,08*	6,7±0,15*
40 инъекций **И**	2,0±0,11	2,3±0,12	0,3±0,07*	6,9±0,21*
50 инъекций **И**	2,2±0,14	2,4±0,17	0,1±0,06*	6,9±0,26*
60 инъекций **И**	2,1±0,09	2,2±0,10	0,1±0,08*	6,9±0,23*
5 инъекций **Т**	2,0±0,04*	2,0±0,05*	2,7±0,28*	0,9±0,07*
10 инъекций **Т**	2,0±0,05*	2,0±0,04*	2,8±0,27*	0,6±0,04*
15 инъекций **Т**	2,0±0,05*	2,1±0,05*	3,2±0,34*	0,5±0,03*
20 инъекций **Т**	2,1±0,05	2,2±0,08	3,7±0,39*	0,6±0,05*
25 инъекций **Т**	2,1±0,07	2,2±0,10	3,7±0,41*	0,6±0,05*
30 инъекций **Т**	2,2±0,11	2,5±0,13	3,4±0,36*	0,7±0,06*

* – различия статистически значимы ($p<0{,}05$) относительно соответствующих значений контрольной группы

оказал влияния на исходную скорость синаптической передачи и не вызвал удлинения латентного периода возбуждения мышцы после ее длительной работы (табл. 1), что было характерно и для интактных животных и свидетельствует в пользу отсутствия развития утомления в синапсе, а, следовательно, нормальной надежности нервно-мышечной передачи.

Укорочение латентного периода возбуждения передней большеберцовой мышцы, имевшее место спустя 5-15 инъекций стероидного анаболика, свидетельствует в пользу ускорения нервно-мышечной передачи. Отсутствие же изменений длительности латентного периода возбуждения мышцы после ее работы относительно исходного уровня, имевшее место у интактных животных, а также крыс, получивших 5-30 инъекций тестостерона, указывает на то, что хроническое введение андрогена не оказало влияния на надежность нервно-мышечной передачи.

Возможными причинами ускорения нервно-мышечной передачи под действием мужских половых гормонов могут служить повышение чувствительности постсинаптической мембраны к ацетилхолину или некоторое облегчение возбуждения внесинаптической мембраны мышечного волокна под влиянием постсинаптического потенциала. Так, в исследованиях некоторых авторов [18] получен факт повышения чувствительности под действием тестостерона постсинаптической мембраны нервно-мышечных синапсов к миорелаксантам. Отмеченный факт свидетельствует в пользу повышения чувствительности холинорецепторов под действием половых стероидов не только к блокаторам, но и к естественному их стимулятору – ацетилхолину, происходящему, очевидно, по типу аллостерического облегчения взаимодействия холнорецепторов с ацетилхолином или холинолитиками. Кроме того, установлено, что тестостерон способен повышать натриевую проницаемость мембран мышечных волокон путем влияния на синтез белков натриевых каналов [19]. Повышение же проницаемости мембран мышечных волокон для натрия должно сопровождаться некоторой исходной их деполяризацией, которая может обусловить временное умеренное повышение возбудимости мембран, а, значит, и облегчение передачи возбуждающего сигнала от постсинаптической мембраны на внесинаптическую.

Вместе с тем, как показали результаты наших исследований, облегчающий эффект анаболического стероида на синаптическую передачу наблюдался только в первый месяц его введения в организм (спустя 5-15 инъекций, табл. 1), тогда как в дальнейшем, несмотря на введение гормона, продолжительность латентного периода вызванного возбуждения мышцы нормализовывалась. В основе нормализации латентного периода возбуждения мышцы после первоначального облегчающего влияния тестостерона на синаптическую передачу, по всей видимости, могут лежать два механизма. Первый механизм заключается в постепенной нормализации первоначально повышенной чувствительности холинорецепторов к ацетилхолину в результате их частичной десенситизации. Вторым механизмом нормализации первоначально укороченного под действием тестостерона латентного периода возбуждения мышцы, возникающего, несмотря на продолжающееся введение гормона, могут служить адаптивные процессы в самой внесинаптической мембране мышечных волокон, направленные на компенсацию их частичной деполяризации, вызванной тестостероном. Такая адаптивная нормализация поляризации мембран мышечных волокон, возникающая в ответ на де- или гиперполяризацию мембраны, является закономерной реакцией независимо от причин, вызвавших отклонение мембранного потенциала и показана в многочисленных исследованиях на различных возбудимых тканях при длительных изменениях исходной нормальной поляризации их мембраны, вызванных самыми различными факторами [20]. Постепенно развивающаяся нормализация мембранного потенциала мышечных волокон обуславливает нормализацию их первоначально повышенной возбудимости, что может послужить одной из причин нормализации первоначально ускоренной синаптической передачи, несмотря на продолжающееся введение тестостерона в организм.

Хроническое введение стероидного и нестероидного анаболиков по-разному влияло на силовые и скоростные характеристики передней большеберцовой мышцы. Тестостерон-пропионат вызывал улучшение силовых и скоростных характеристик исследуемой мышцы, тогда как хроническое введение инозина неоднозначно сказывалось на силовых и скоростных характеристиках мышцы в динамике его введения в организм.

Так, уже спустя 5 инъекций стероидного анаболика максимально достижимая абсолютная амплитуда сокращения мышцы превышала уровень контроля ($p<0,05$, табл. 2) и сохранялась увеличенной по мере дальнейшего введения тестостерона в организм (вплоть до 30 инъекций гормона). Причем наибольшее увеличение абсолютной максимально достижимой амплитуды сокращения передней большеберцовой мышцы наблюдалось у крыс, получивших 30 инъекций стероидного анаболика. Вместе с тем, масса передней большеберцовой мышцы начинала увеличиваться относительно контроля только спустя 15 инъекций тестостерон-пропионата ($p<0,05$), и наибольшее ее увеличение, подобно максимально достижимой абсолютной амплитуде сокращения мышцы, наблюдалось спустя 30 инъекций стероидного анаболика (табл. 2).

При сопоставлении характера изменения максимально достижимой абсолютной амплитуды сокращения мышцы с изменением ее массы по мере увеличения количества инъекций тестостерона наблюдается следующая закономерность, предопределившая определенные особенности изменения удельной максимально достижимой амплитуды сокращения мышцы и отчасти позволившая высказать предположе-

Таблица 2

Средние значения ($\overline{X} \pm m$) максимально достижимой амплитуды сокращения и массы передней большеберцовой мышцы интактных крыс, животных, получивших от 10-ти до 60-ти инъекций инозина (И), и крыс, получивших от 5-ти до 30-ти инъекций тестостерон-пропионата (Т)

Группа животных	Масса мышцы, мг	Максимально достижимая амплитуда сокращения, мм	Максимально достижимая удельная амплитуда сокращения, мм/ 1 г массы мышцы
Контроль	430,5±13,25	3,2±0,28	7,4±0,43
10 инъекций **И**	426,6±10,43	4,5±0,38*	10,5±0,83*
20 инъекций **И**	429,8±10,01	5,6±0,49*	13,1±1,07*
30 инъекций **И**	425,3±13,52	2,9±0,20	6,9±0,43
40 инъекций **И**	433,5±14,00	2,1±0,18*	4,8±0,47*
50 инъекций **И**	468,5±11,46	1,5±0,09*	3,3±0,20*
60 инъекций **И**	494,8±14,43*	3,7±0,24	7,6±0,42
5 инъекций **Т**	429,7±14,19	4,2±0,32*	9,7±0,62*
10 инъекций **Т**	464,8±16,46	4,3±0,35*	9,2±0,64*
15 инъекций **Т**	514,8±6,85*	5,0±0,53*	9,6±0,72*
20 инъекций **Т**	515,0±8,37*	4,9±0,53*	9,8±0,78*
25 инъекций **Т**	557,5±19,79*	5,5±0,52*	9,7±0,78*
30 инъекций **Т**	610,3±25,56*	5,7±0,51*	9,4±0,69*

* – различия статистически значимы ($p<0,05$) относительно соответствующих значений контрольной группы

ние относительно возможных причин увеличения мышечной силы при хроническом введении андрогенного гормона. В частности, как было отмечено ранее, спустя 5-15 инъекций тестостерона абсолютная максимально достижимая амплитуда сокращения передней большеберцовой мышцы увеличивалась относительно контроля ($p<0,05$), тогда как масса мышцы не претерпевала значимых изменений, что обусловило увеличение удельной максимальной достижимой амплитуды сокращения мышцы ($p<0,05$ относительно контроля, табл. 2). Увеличение максимально достижимой амплитуды сокращения мышцы на фоне отсутствия значимых изменений ее массы свидетельствует в пользу того, что улучшение силовых характеристик мышцы спустя 5-15 инъекций тестостерона не было вызвано ее гипертрофией. Наиболее вероятной же причиной увеличения максимально достижимой амплитуды сокращения мышцы, регистрируемой при вызванном ее сокращении, индуцированном раздражением сверхпороговым электрическим током иннервирующего мышцу нерва, что имело место в условиях нашего опыта, является улучшение силовых характеристик мышечных волокон, которое может быть связано с частичной переквалификацией медленных или промежуточного типа волокон в быстрые.

Спустя 15-30 инъекций тестостерона максимально достижимая абсолютная амплитуда сокращения мышцы превышала уровень контроля ($p<0,05$), но при этом увеличивалась и масса мышцы ($p<0,05$ относительно контроля, табл. 2). Вместе с тем, несмотря на сочетанное увеличение максимально достижимой амплитуды сокращения передней большеберцовой мышцы и ее массы, удельная амплитуда сокращения мышцы превышала уровень контроля ($p<0,05$, табл. 2). Отмеченный факт свидетельствует в пользу того, что и спустя 15-30 инъекций анаболического стероида, несмотря на увеличение массы передней большеберцовой мышцы под его влиянием, улучшение силовых характеристик мышцы нельзя объяснить только лишь ее гипертрофией, поскольку удельная амплитуда сокращения, подобно тому, что имело место спустя 5-10 инъекций тестостерона, остается увеличенной относительно контроля. И в данном случае, одной из возможных причин улучшения силовых характеристик передней большеберцовой мышцы спустя 15-30 инъекций тестостерона, наряду с некоторой гипертрофией мышцы, может служить и сдвиг ее метаболического профиля в сторону увеличения доли быстрых мышечных волокон в ее составе.

Хроническое введение инозина сопровождалось неоднозначным изменением силовых характеристик передней большеберцовой мышцы. Так, спустя 10-20 инъекций нестероидного анаболика максимально достижимая амплитуда сокращения мышцы увеличивалась относительно контроля ($p<0,05$), тогда как масса мышцы не претерпевала значимых изменений (табл. 2). Повышение амплитуды сокращения мышцы на фоне неизменной ее массы спустя 10-20 инъекций инозина обусловило увеличение и удельной амплитуды мышечного сокращения ($p<0,05$ относительно контроля, табл. 2) и свидетельствовало в пользу первоначального улучшения силовых характеристик мышцы. Спустя 30 инъекций инозина, масса мышцы, подобно животным, получившим 10-20 инъекций нестероидного анаболика, не претерпевала значимых изменений, а максимально достижимая амплитуда сокращения возвращалась к контрольному уровню (табл. 2), что указывало в пользу нормализации первоначально повышенных силовых характеристик мышцы. Вместе с тем, спустя 40-50 инъекций инозина наблюдалось даже снижение максимально достижимой амплитуды сокращения мышцы ($p<0,05$ относительно контроля) на фоне неизменной ее массы, что обусловило снижение и удельной амплитуды мышечного сокращения ($p<0,05$ относительно контроля, табл. 2). Спустя 60 инъекций инозина масса мышцы увеличивалась относительно контроля ($p<0,05$, табл. 2), что свидетельствует в пользу некоторой ее гипертрофии, развивающейся под действием нестероидного анаболика к этому экспериментальному сроку. Между тем, максимально достижимая амплитуда сокращения мышцы после 60 инъекций инозина не изменялась относительно контроля, несмотря на увеличение ее массы (табл. 2).

Таким образом, хроническое введение инозина сопровождалось неоднозначным изменением силовых характеристик передней большеберцовой мышцы: на начальных этапах введения нестероидного анаболика (после 10-20 инъекций) максимально достижимая амплитуда сокращения мышцы увеличивалась на фоне отсутствия изменения ее массы, затем (спустя 30 инъекций) она нормализовывалась, тогда как по мере дальнейшего введения препарата (спустя 40-50 его инъекций) снижалась, а к окончанию 2-х месячного периода введения инозина возвращалась к уровню контроля, несмотря на увеличение массы мышцы. Неоднозначный характер изменения силовых характеристик исследуемой мышцы в динамике введения нестероидного анаболика, а также отсутствие улучшения силовых характеристик мышцы на фоне увеличения ее массы, имевшего место по окончании 60-дневого периода введения инозина, может быть вызвано определенными сдвигами метаболического профиля мышцы, для косвенной оценки которого необходимо проанализировать характер изменения некоторых скоростных параметров исследуемой мышцы.

С целью проверки допустимости выдвинутого нами предположения относительно влияния стероидного и нестероидного анаболиков на гистохимический профиль передней большеберцовой мышцы мы сочли необходимым проанализировать изменение ряда скоростных ее характеристик по мере увеличения количества инъекций тестостерона и инозина. Анализ характера изменения продолжительности фаз одиночного сокращения мышцы животных, получивших от 5 до 30 инъекций тестостерон-пропионата и от 10 до 60 инъекций инозина, показал следующее.

Уже спустя 5 инъекций стероидного анаболика наблюдается укорочение относительно контроля ($p<0,05$) как общей продолжительности одиночного сокращения мышцы, так и длительности всех его фаз: латентного периода сокращения, фазы укорочения, плато и расслабления (табл. 3), которое сохраняется и по мере дальнейшего введения тестостерона в организм (вплоть до 30 инъекций) и свидетельствует в пользу улучшения скоростных характеристик передней большеберцовой мышцы.

Таблица 3

Средние значения ($\bar{X} \pm m$) продолжительности периодов одиночного сокращения передней большеберцовой мышцы интактных крыс, животных, получивших от 10-ти до 60-ти инъекций инозина (И), и крыс, получивших от 5-ти до 30-ти инъекций тестостерон-пропионата (Т)

Группа животных	Продолжительность периодов, мс				
	латентный период сокращения	фаза укорочения	фаза плато	фаза расслабления	продолжительность одиночного сокращения
Контроль	12,8±0,51	32,2±1,82	13,3±0,92	32,1±1,28	89,5±4,05
10 инъекций **И**	10,5±0,45*	28,9±1,33	12,3±0,72	33,4±1,22	85,4±3,86
20 инъекций **И**	9,1±0,29*	32,1±0,83	11,0±0,74	34,9±1,41	87,0±3,60
30 инъекций **И**	11,8±0,31	37,5±0,94*	15,8±0,95	38,4±1,38*	102,4±3,42*
40 инъекций **И**	14,3±0,56	38,9±1,37*	15,6±0,98	38,3±1,37*	107,2±2,37*
50 инъекций **И**	14,4±0,49	38,2±1,46*	16,1±1,02	39,8±1,96*	108,5±2,50*
60 инъекций **И**	13,9±0,32	37,8±1,54*	15,1±1,03	40,7±1,77*	107,6±2,15*
5 инъекций **Т**	9,5±0,41*	24,1±1,36*	9,6±0,78*	27,2±1,05*	70,4±2,28*
10 инъекций **Т**	9,1±0,38*	23,5±1,33*	9,2±0,67*	28,1±1,12*	69,9±2,15*
15 инъекций **Т**	9,0±0,32*	26,8±1,32*	10,5±0,82*	28,0±1,17*	74,4±3,21*
20 инъекций **Т**	10,1±0,42*	24,2±1,21*	10,4±0,85*	27,7±1,16*	72,4±3,68*
25 инъекций **Т**	10,1±0,42*	26,2±1,21*	10,5±0,82*	28,2±1,16*	75,0±2,63*
30 инъекций **Т**	9,9±0,38*	27,2±0,96*	10,6±0,77*	27,5±1,10*	75,0±2,10*

* – различия статистически значимы ($p<0,05$) относительно соответствующих значений контрольной группы

Укорочение длительности фаз одиночного сокращения и особенно фазы укорочения должно обусловить сдвиг частоты электрического раздражения мышцы, при которой осуществляется ее переход к гладкому тетанусу в сторону более высоких частот. Анализ частот электрического раздражения малоберцового нерва, при которых передняя большеберцовая мышца контрольных крыс, и животных, получивших от 5 до 30 инъекций тестостерона, переходит к гладкому тетанусу, показал следующее. У животных контрольной группы исследуемая мышца начинает развивать гладкий тетанус при частотах электрической стимуляции малоберцового нерва 26-28 Гц, тогда как у большинства животных, получивших 5-30 инъекций тестостерона – в диапазоне частот 30-35 Гц. Вместе с тем, среди животных, получивших 5-10 инъекций анаболического стероида, встречаются такие особи (по 1 из 10 в каждой из этих групп), мышца которых переходит к гладкому тетанусу, при частоте 29 Гц, что все же превышает частоту тетанизации мышцы у интактных крыс. Увеличение частоты тетанизации передней большеберцовой мышцы спустя 5-

30 инъекций тестостерон-пропионата, наряду с укорочением длительности фаз одиночного сокращения, служит свидетельством в пользу улучшения скоростных характеристик мышцы, обусловленных возможными сдвигами ее метаболического профиля, вызванными действием анаболического стероида.

Между тем, увеличение доли быстрых мышечных волокон в составе мышцы, возникающее вследствие преобразования части медленных или промежуточного типа волокон в быстрые, наряду с повышением силовых и скоростных характеристик мышцы, должно сопровождаться снижением ее устойчивости к утомлению [21]. И действительно, как показали результаты наших исследований, продолжительность периода удержания амплитуды сокращения мышцы на максимально возможном уровне уже после 5-ти инъекций тестостерон-пропионата снижается относительно контроля ($p<0,05$, табл. 1) и остается сниженной по мере дальнейшего введения андрогенного анаболика в организм (вплоть до 30-ти инъекций).

Обращает на себя внимание и тот факт, что наряду с укорочением периода максимальной устойчивой работоспособности мышцы, у животных, получивших от 5-ти до 30-ти инъекций тестостерона, имеет место и удлинение относительно контроля периода врабатывания мышцы ($p<0,05$, табл. 1). Удлинение периода врабатывания мышцы, сочетаемое с укорочением периода максимальной устойчивой работоспособности у крыс, получивших от 5-ти до 30-ти инъекций стероидного анаболика, служит косвенным подтверждением в пользу выдвинутого нами предположения относительно способности тестостерон-пропионата оказывать влияние на гистохимический профиль мышцы и, в частности, способствовать увеличению доли быстрых мышечных волокон в исследуемой нами передней большеберцовой мышце, относящейся к смешанному типу.

Анализ временных параметров одиночного сокращения передней большеберцовой мышцы крыс, получивших от 10-ти до 60-ти инъекций инозина, показал следующее. Продолжительность одиночного сокращения мышцы и его фаз претерпевала определенные изменения относительно контроля только после 30-ти инъекций нестероидного анаболика, тогда как у животных, получивших 10-20 инъекций инозина, общая продолжительность одиночного сокращения, длительность фаз укорочения, плато и расслабления значимо не отличались от соответствующих контрольных значений (табл. 3). Аналогично продолжительности сокращения мышцы, частота ее тетанизации также претерпевала значимые изменения относительно контроля только после 30-ти инъекций нестероидного анаболика, тогда как мышца животных, получивших 10-20 инъекций инозина, переходила к гладкому тетанусу в том же диапазоне частот электростимуляции малоберцового нерва (26-29 Гц), что и мышца контрольных животных (26-28 Гц). Вместе с тем, латентный период сокращения мышцы уже после 10-ти инъекций нестероидного анаболика укорачивался относительно контроля ($p<0,05$) и оставался укороченным и после 20-ти его инъекций (табл. 3), что свидетельствует в пользу улучшения степени синхронизации электромеханического сопряжения в мышечных волокнах, очевидно, обусловленного улучшением энергетического метаболизма в них под действием инозина.

Отсутствие изменений длительности одиночного сокращения и частоты тетанизации мышцы крыс, получивших 10-20 инъекций нестероидного анаболика, косвенно свидетельствует в пользу отсутствия каких-либо сдвигов гистохимического профиля мышцы. Между тем, как было отмечено ранее, у животных, получивших 10-20 инъекций инозина, силовые характеристики исследуемой мышцы улучшались, тогда как ее масса не изменялась (табл. 2).

Повышение амплитуды сокращения передней большеберцовой мышцы на фоне отсутствия изменений ее скоростных параметров и массы свидетельствует в пользу того, что улучшение силовых характеристик мышцы не могло быть вызвано увеличением удельной доли быстрых мышечных волокон в ней или ее гипертрофией и, вероятнее всего, связано с улучшением условий энергетического обмена или какими-то функциональными сдвигами в мышечных волокнах под действием инозина. И, действительно, в литературе существуют сообщения [9, 10], согласно которым инозин, являясь нестероидным анаболиком субстратного типа действия, стимулирует анаэробный гликолиз в мышечных волокнах, что, в первую очередь, должно улучшить силовые характеристики и работоспособность мышечных волокон гликолитического типа (быстрых), развивающих при сокращении большую силу по сравнению с медленными. Учитывая тот факт, что в передней большеберцовой мышце крыс преобладают быстрые волокна (составляют 88% и более от общего количества волокон) [17], можно предположить, что улучшение энергообмена в них должно существенно сказаться на силовых характеристиках мышцы. Кроме того, инозин является предшественником пуриновых нуклеотидов, в том числе АТФ, и, выступая в качестве донора рибозы, активирует синтез НАДН$^+$ в митохондриях [9, 10, 22], в связи с чем его введение должно способствовать улучшению условий синтеза и ресинтеза АТФ в мышечной ткани, а, следовательно, и некоторых параметров работоспособности мышечных волокон. В литературе существуют сообщения [23], согласно которым инозин способен повышать активность АТФазы миозина, что также должно положительно сказываться на силовых характеристиках мышечной ткани. Наконец, некоторые авторы [10] указывают в пользу повышения под влиянием инозина содержания цАМФ в мышечных волокнах в связи со способностью его метаболита – инозинмонофосфата – ингибировать фосфодиэстеразу, расщепляющую цАМФ. Повышение же содержания цАМФ в цитоплазме мышечного волокна приводит, с одной стороны, к цАМФзависимой активации ряда ферментов энергетического обмена, а также миозиновой АТФазы, вызванной их фосфорилированием, а с другой – обуславливает увеличение выхода кальция из внутриклеточных депо, что должно приводить как к улучшению электромеханического сопряжения в мышечных волокнах, так и к повышению их силовых характеристик.

Вместе с тем, как было отмечено ранее, после 30-ти инъекций инозина, несмотря на его стимулирующее влияние на энергетический обмен в мышечной ткани, силовые характеристики передней большеберцовой мышцы после первоначального улучшения возвращаются к уровню контроля, а после 40-50-ти инъекций даже несколько ухудшаются (табл. 2). К окончанию 2-х месячного периода введения инозина максимально достижимая амплитуда сокращения мышцы нормализуется, тогда как масса мышцы увеличивается. Нормализация силовых характеристик мышцы после первоначального их улучшения по окончании 30-дневного периода введения инозина, и даже некоторое их снижение, имевшее место после 40-50-ти инъекций нестероидного анаболика, а также отсутствие прироста амплитуды сокращения мышцы на фоне увеличения ее массы у животных, получивших 60 инъекций инозина, может быть вызвано определенными сдвигами метаболического профиля мышцы. В пользу этих сдвигов свидетельствуют наблюдаемые нами изменения некоторых скоростных параметров исследуемой мышцы. Так, уже после 30-ти инъекций инозина отмечались некоторые косвенные признаки увеличения удельной доли медленных или промежуточного типа волокон в ней, возникающего за счет перепрограммирования синтеза миозина в быстрых волокнах. В частности, общая продолжительность одиночного сокращения мышцы, а также длительность фаз укорочения и расслабления оказались увеличенными относительно контроля ($p<0,05$), а латентный период сокращения мышцы не отличался от такового контроля, тогда как после 10-20-ти инъекций инозина он укорачивался (табл. 3). Отмеченные сдвиги продолжительности одиночного сокращения и его фаз сохранялись и у животных, получивших 40-60 инъекций инозина. Кроме того, после 40 инъекций нестероидного анаболика к отмеченным косвенным признакам сдвига гистохимического профиля исследуемой мышцы в сторону увеличения удельной доли волокон медленного или промежуточного типа прибавляется и изменение частоты тетанизации мышцы. Так, уже после 30-ти инъекций инозина у части животных (2-х из 10) мышца переходила к гладкому тетанусу при частоте электрической стимуляции малоберцового нерва в 23 Гц, тогда как у остальных 8-ми животных – в том же диапазоне частот (26-28 Гц), что и мышца контрольных крыс. У животных, получивших 40-60 инъекций инозина, наблюдался сдвиг частоты тетанизации мышцы в сторону меньших значений по сравнению с контролем. Так, у крыс, получивших 40 инъекций инозина, передняя большеберцовая мышца переходила к полной суммации сокращений при частоте электрической стимуляции 15-24 Гц, у животных, получивших 50 инъекций инозина, – при частоте 15-20 Гц, а у большинства животных, получивших 60 инъекций нестероидного анаболика (8 из 10 особей), – при частоте 18-24 Гц и только у 2-х из 10 крыс – при частоте электрической стимуляции – 26 Гц.

Наблюдаемое после 30-60-ти инъекций инозина удлинение продолжительности одиночного сокращения передней большеберцовой мышцы и его фаз, а также уменьшение частоты тетанизации мышцы (имевшее место спустя 40-60 инъекций нестероидного анаболика), снижение ее силовых характеристик (спустя 30-50 инъекций инозина) после первоначального (после 10-20-ти инъекций инозина) их повышения косвенно свидетельствует в пользу увеличения удельной доли мышечных волокон медленного или промежуточного типа в мышце, возникающего по причине перепрограммирования синтеза миозина в быстрых.

Между тем, улучшение условий энергетического обмена в мышечных волокнах под влиянием инозина и последующий сдвиг гистохимического профиля мышцы, по мере дальнейшего его введения в организм (спустя 30-60 инъекций) в сторону увеличения удельной доли медленных или промежуточного типа волокон, должны отражаться не только на силовых и скоростных ее характеристиках, но и на параметрах работоспособности. Как показали результаты наших исследований, введение 10-20-ти инъекций инозина привело к увеличению амплитуды мышечного сокращения (табл. 2), но при этом период максимальной устойчивой работоспособности мышцы не претерпевал значимых изменений относительно контроля (табл. 1). Увеличение амплитуды мышечного сокращения на фоне сохраненной способности мышцы удерживать амплитуду сокращения на максимальном уровне на протяжении того же периода, что и мышца контрольных крыс, развивающих при сокращении меньшую силу, свидетельствует в пользу повышенной работоспособности мышцы крыс, получивших 10-20-ти инъекций инозина.

Спустя 30-60 инъекций нестероидного анаболика продолжительность максимальной устойчивой работоспособности мышцы удлинялась относительно контрольного уровня ($p<0,05$), что указывает в пользу повышения устойчивости мышцы к развитию утомления и может быть обусловлено как улучшением условий энергетического обеспечения мышечных волокон, так и возможным повышением удельной доли медленных или промежуточного типа волокон в ней, которые при сокращении развивают меньшую силу по сравнению с гликолитическими, но при этом проявляют гораздо более высокую устойчивость к развитию утомления.

Наконец, еще одним свидетельством в пользу возможного увеличения удельной доли медленных или промежуточного типа волокон в мышце под влиянием длительно вводимого инозина служит значимое укорочение продолжительности врабатывания мышцы, имевшее место спустя 30 инъекций нестероидного анаболика ($p<0,05$ относительно контрольного уровня) и сохранявшееся вплоть до окончания 2-х месячного периода его введения в животный организм (табл. 1).

Подводя итог изложенному необходимо заключить, что хроническое введение тестостерон-пропионата в организм белых крыс сопровождалось изменением силовых, скоростных характеристик и параметров работоспособности передней большеберцовой мышцы, которое наблюдалось уже после 5-ти инъекций стероидного анаболика, сохранялось на протяжении всего периода его введения (вплоть до 30-ти инъекций) и косвенно свидетельствовало в пользу увеличения удельной доли быстрых мышечных волокон в исследуемой мышце, относящейся к смешанному типу. Так, уже спустя 5 инъекций андрогена имело место увеличение максимально достижимой амплитуды мышечного сокращения (несмотря на то, что мышечная масса к данному сроку еще не изменялась относительно контроля), укорочение длительности фаз одиночного сокращения в начале периода работы мышцы, увеличение частоты тетанизации мышцы, продолжительности периода ее врабатывания, но при этом укорочение продолжительности максимальной устойчивой работоспособности мышцы, свидетельствующее в пользу возросшей утомляемости мышцы. Все эти изменения косвенно отражают возможные сдвиги исходного гистохимического профиля в передней большеберцовой мышце в сторону увеличения доли быстрых мышечных волокон в ней.

Хроническое введение нестероидного анаболика инозина обуславливало на начальных этапах его применения (спустя 10-20 инъекций) улучшение силовых характеристик мышцы без изменения ее массы, а также укорочение латентного периода сокращения мышцы, отражающее улучшение условий электромеханического сопряжения в ее волокнах, что может быть обусловлено улучшением условий энергетического обмена или функциональных параметров сократительного аппарата в мышечной ткани. Дальнейшее введение рибокина (спустя 30-60 инъекций) сопровождалось появлением признаков увеличения удельной доли медленных или промежуточного типа волокон в мышце, обусловивших некоторое снижение максимально достижимой амплитуды ее сокращения, но при этом удлинение периода максимальной устойчивой работоспособности мышцы. Кроме того, по окончании 60-дневного периода введения инозина отмечалось увеличение массы передней большеберцовой мышцы, свидетельствующее в пользу развития некоторой ее гипертрофии, обусловленной способностью инозина стимулировать анаболизм в мышечной ткани как косвенно (путем улучшения энергообмена), так и непосредственно, усиливая биоситнез тРНК.

Перспективы дальнейших исследований. Исходя из полученных нами данных относительно влияния тестостерона и инозина на переднюю большеберцовую мышцу, относящуюся к смешанному типу с преобладанием быстрых мышечных волокон, можно заключить, что хроническое введение тестостерон-пропионата в терапевтических дозах, очевидно, способствовало увеличению удельной доли быстрых мышечных волокон в мышце, а инозина – напротив, волокон промежуточного или оксидативного типа; кроме того, оба анаболика вызвали развитие некоторой гипертрофии мышцы. Учитывая катаболическое действие хронически вводимых глюкокортикоидов на скелетные мышцы, можно допустить, что стероидные и нестероидные анаболики должны ограничивать катаболическое действие глюкокортикоидов на мышцы. С целью проверки возможности высказанного предположения перспективами наших дальнейших исследований является изучение влияния тестостерон-пропионата и инозина на проявление эффектов хронически вводимого дексаметазона на переднюю большеберцовую мышцу.

РЕЗЮМЕ

В експериментах на молодих білих щурах-самках за допомогою методів електроміографії і ергографії встановлене, що хронічне введення тестостерон-пропіонату здійснювало первісний (після 5-15-ти ін'єкцій) полегшуючий ефект на синаптичну передачу і призводило (після 5-ти ін'єкцій) до збільшення максимально досяжної амплітуди скорочення та поліпшення швидкісних характеристик переднього великогомілкового м'яза, які зберігалися в міру подальшого введення тестостерону в організм (аж до 30-ти ін'єкцій) і побічно свідчили на користь можливої зміни метаболічного профілю м'яза убік збільшення питомої частки швидких м'язових волокон. Хронічне введення нестероїдного анаболіка інозину на початкових етапах його застосування (після 10-20-ти ін'єкцій) обумовило поліпшення силових характеристик м'яза без зміни його маси, тоді як надалі – супроводжувалося появою ознак збільшення питомої частки повільних або проміжного типу волокон у м'язі (після 30-60-ти ін'єкцій) і збільшенням його маси (після 60-ти ін'єкцій).

Ключові слова: анаболіки, тестостерон, інозин, скелетний м'яз, одиночне скорочення м'яза, латентний період збудження м'яза.

SUMMARY

In experiments on young white rats-females by means of methods of electromyography and ergography it has been shown, that chronic introduction of a testosterone-propionate has been accompanied by initial (later 5-15 injections) facilitating effect on synaptic transfer and also (later 5 injections) increasing of maximal achievement amplitude of muscular contraction and improvement of high-speed characteristics of the forward tibial muscle, which have been remained in process of the further introduction of testosterone in an organism (up to 30 injections) and have been indirectly testified in favor of possible change of a metabolic profile of a muscle towards increase of a part of fast muscular fibres. Chronic introduction of nonsteroid anabolic inosine has been caused at the initial stages of its application (later 10-20 injections) the improvement of power characteristics of a muscle without changing of its weight, whereas in the further – it has been accompanied by occurrence of signs of an increase of a specific fraction of slow or intermediate type of fibres in a muscle (later 30-60 injections) and an increase of its weight (later 60 injections).

Keywords: anabolics, testosterone, inosine, skeletal muscle, solitary muscle's contraction, the latent period of muscle's excitement.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вебер В.Р. Клиническая фармакология / В. Р. Вебер. – 2009. – М.: Медицина, 448 с.
2. Pharmacology / Ed. by H.P. Rang, M.M. Dale, J.M. Ritter, P.K. Moore – 5th ed. – London, Churchill, Livingstone. – 2003. – P. 411-419.
3. Гарднер Д. Базисная и клиническая эндокринология / Д. Гарднер, Д. Шобек. – М.: Бином, 2011. – Кн. 2. – 590 с.
4. Гриффин Дж. Физиология эндокринной системы / Дж. Гриффин, С. Охеда. – 2008. – М.: Бином. – 496 с.
5. Теппермен Дж. Физиология обмена веществ и эндокринной системы: пер. с англ. / Дж. Теппермен, Х. Теппермен. – М.: Мир, 1989. – 656 с.
6. Sinha-Hikim I. Testosterone-induced muscle hypertrophy is associated with an increase in satellite cell number in healthy, young men / I. Sinha-Hikim, S.M. Roth // Am. J. Physiol. Endocrinol. Metab. – 2003. – Vol. 285. – P. E197-E205.
7. Tamaki T. Anabolic-androgenic steroid does not enhance compensatory muscle hypertrophy but significantly diminish muscle damages in the rat surgical ablation model / T. Tamaki, Y. Uchiyama, Y. Okada // Histochem. Cell Biol. – 2009. – Vol. 132. – P. 71-81.
8. Дзамуков Р.А. Ответ скелетных мышц на анаболический стероид индивидуален и не зависит от режима двигательной активности / Р.А. Дзамуков, В.В. Валиуллин // Бюллетень экспериментальной биологии и медицины. – 1999. – № 8. – С. 406-408.
9. Застосування рибоксину в умовах критичних станів (літературний огляд з результатами власних спостережень) / А.А. Хижняк, В.В. Ніконов, С.В. Курсов та ін.// Медицина неотложных состояний. – 2010. – Т. 29, № 4. – С. 28-34.
10. Григорьева М.Б. Влияние инозина на обмен веществ / М.Б. Григорьева // Химико-фармацевтический журнал. – 1982. – Т. 16, № 4. – С. 14-22.
11. Губський Ю.І. Біологічна хімія / Ю.І. Губський. – Київ-Тернопіль: Укрмедкнига, 2000. – 508 с.
12. Вартанян Л.П. и др. Радиобиологические основы и перспективы применения рибоксина при лучевой терапии новообразований / Л.П. Вартанян, Л.И. Корытова, С.Ф. Вершинина // Медицинская радиология и радиационная безопасность. – 2003. – Т. 48, № 5. – С. 62-66.
13. Inosine reduces inflammation and improves survival in a murine model of colitis / J.G. Mabley, P. Packer, L. Liaudet et al. // American Journal of Physiology: Gastrointestinal & Liver Physiology. – 2003. – Vol. 284, No1. – P. 138-144.
14. Фармакодинамика рибоксина (инозина) / С.Б. Французова, В.Я. Кривелевич, В.П. Пархонюк и др. // Фармакология и токсикология, 1989. – №1. – С. 115-118.
15. Positive inotropic respose to inosine in the situ canine heart / C. Jones, J. Thomas, M. Devoux et al. // Am. J. Physiol. – 1997. – Vol. 233. – P. 1438-1443.
16. Адаптогенный эффект рибоксина / И.К. Соколов, Е.Я. Каплан, Г.М. Айрапетян и др. // Химико-фармацевтический журнал. – 1980. – № 1. – С. 40-45.
17. Яковлев Н.Н. Обзор: функциональная и метаболическая дифференциация волокон скелетных мышц / Н.Н. Яковлев, Т.Н. Макарова // Физиологический журнал СССР им И.М. Сеченова. – 1980. – № 8. – С. 1129-1144.
18. Долженко А.Т. Реактивность нервно-мышечных синапсов к курареподобным веществам в условиях измененного гормонального баланса / А.Т. Долженко / Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата медицинских наук. – Донецк, 1966. – 15 с.
19. Физиология гормональной рецепции / В.Г. Шаляпина, Н.А. Арутюнян, В.Н. Бабичев и др. / Под ред. В.Г. Шаляпиной – Л.: Наука, 1986. – 231 с.
20. Giniatullin R. Desensitization of nicotinic ach receptors: shaping cholinergic signaling / R. Giniatullin, A. Nistri, J.L. Yakel // Trends in Neurosciences. – 2005. – Vol. 28, No 7. – P. 371-378.
21. Биохимия мышечной деятельности / Н.И. Волков, Э.Н. Нессен, А.А. Осипенко, С.Н. Корсун. – К.: Олимпийская литература, 2000. – 503 с.
22. Effects of inosine on reperfusuon injury after heart transplantation / C. Szabo, N. Stumpf, T. Radovits et al. // European Journal of Cardio-Thoracic Surgery. – 2006. – Vol. 30. – P. 96-102.
23. Григорьева М.Б. Влияние рибоксина на АТФазную активность и содержание адениловых нуклеотидов в сердечной мышце при экспериментальном инфаркте миокарде / М.Б. Григорьева // Фармакология и токсикология. – 1983. – № 4. – С. 41-43.

Поступила в редакцию 30.01.2012 г.

УДК: 582.284+282

КОЛЕКЦІЯ КУЛЬТУР ШАПИНКОВИХ ГРИБІВ – ОСНОВА МІКОЛОГІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА СТРАТЕГІЇ ЗБЕРЕЖЕННЯ БІОРІЗНОМАНІТТЯ БАЗИДІОМІЦЕТІВ

О. В. Федотов, О. В. Чайка, Т. Є. Волошко, А. К. Велигодська

Робота присвячена створенню колекції культур базидіальних грибів (відділ *Basidiomycota*) для дослідження прооксидантно-антиоксидантної системи грибів. З цією метою використано методи тканинних ізолятів, а також ідентифікації та аналізу систематичної приналежності за макро- і мікроскопічними ознаками карпофорів і соматичних культур. Отримано 125 штамів, що належать до 23 видів 18 родів базидіоміцетів, з яких 27 штамів відносяться до порядку *Polyporales* (поліпорові або афілофорові) і 98 – до порядку *Agaricales* (агарикові).

Ключові слова: колекція культур, базидіоміцети, прооксидантно-антиоксидантна система.

Вступ. Значний інтерес багатьох спеціалістів до вивчення базидіоміцетів пояснюється корінними змінами поглядів на положення грибів в системі живого світу та можливостями їх широкого практичного використання [1, 2]. Це зумовило більш глибоке вивчення процесів їх метаболізму, розробку і удосконалення технічного оснащення процесів культивування, створення колекцій чистих культур [3 – 6].

Виготовлення препаратів на основі біологічно активних речовин (БАР) природного походження (*natural product-based drug discovery* – NPDD) в різних країнах світу конкурує з продуктами хімічного синтезу та трансгенними організмами-продуцентами БАР. Аналіз активності NPDD показав, що серед досліджених мікроорганізмів найбільш широко були представлені грибні організми із таких таксонів і екологічних груп, як аскоміцети, мітоспорові, ґрунтові, дереворуйнівні і гриби, що мешкають на лісовій підстилці. При цьому компанії стикнулися з труднощами отримання біологічного матеріалу для пошуку перспективних штамів із різних країн світу в силу дії Конвенції з біорізноманіття. Залучення в орбіту досліджень грибних організмів зі складною трофікою і екологією, які рідко зустрічаються, не тільки дозволить розширити пошук, але і буде сприяти отриманню нової інформації з їх біології, біохімії і генетики [7]. Зокрема, вивчення біосинтетичної активності базидіоміцетів, їх низькомолекулярних і полімерних метаболітів призвело до відкриття різноманітних структур природних сполук, в тому числі і специфічних антиокисних речовин та ферментів, які значно поповнили асортимент біологічно активних речовин. Існують два взаємопов’язані напрями роботи зі збереження біорізноманіття грибів – *in situ* та *ex situ* [8]. І.О. Дудка і співавтори відмічають, що важливим і найбільш гарантованим прийомом збереження біорізноманіття є *in situ* – система природно-заповідного фонду (ПЗФ), фундаментом якої є заповідники та національні природні парки. На території об’єктів ПЗФ зберігається близько 75% усього біорізноманіття України [9]. На жаль, заповідники і національні природні парки створені не в усіх біогеографічних областях, до того ж вони розміщені на території України нерівномірно. Найбільші площі охоронюваних територій в Україні (5-14%) приурочені в основному до Правобережжя, його західних і північно-західних областей, де природна рослинність зазнала меншого антропогенного впливу, де менший відсоток розораних земель, збереглися великі лісові масиви. Інша ситуація спостерігається на Лівобережжі, де розорано близько 70-80% площ. Через надмірну експлуатацію природних ресурсів та інтенсивний розвиток промисловості значно скоротилося біорізноманіття деяких з регіонів (Донецького, Придніпровського, Запорізько-Дніпродзержинського) [9]. Отже, збереження біорізноманіття на території Лівобережної України має особливе значення. Важливим шляхом збереження генофонду рідкісних та зникаючих видів і загалом біорізноманіття грибів є *ex situ* – введення в штучну культуру та збереження їх у колекціях живих культур, що мають бути базою як для теперішніх, так і наступних мікологічних досліджень базидіоміцетів, зокрема, як об’єктів біотехнології [1, 5, 10].

Мета дослідження – створення колекції культур базидіальних грибів для вивчення їх прооксидантно-антиоксидантної системи, розробки і удосконалення методів виділення та культивування, оптимізації складу живильних середовищ та умов росту і зберігання, ініціації плодоношення.

Матеріали і методи. Об’єкт дослідження – колекція культур базидіоміцетів, що нараховує 125 штамів. Культури підтримуються при +20±5°С на агаризованому пивному суслі (4° за Баллінгом) і пересіваються з перевіркою чистоти кожні 5-6 місяців. Виділення культур здійснювали за загальновизнаними методами [4], із тканини плодових тіл – карпофорів. Збір плодових тіл в природі проводили в період їх масового появлення, в суху погоду. Для виділення культури відбирали молоді, неушкоджені плодові тіла, найменше інфіковані мікроорганізмами. Свіжозібрані зразки карпофорів попередньо звільняли від залишків ґрунту, листя та поміщали у чисті паперові конверти із зазначенням дати, місця збору і субстрату зростання гриба. Виділення, як правило, проводили в день збору. Зберігали плодові тіла для досліджень чи повторного виділення протягом 2-3 діб в холодильнику при 6±2°С.

У разі появи контамінантів, колонії базидіоміцетів послідовно пересівали з обов'язковим наступним мікроскопічним контролем. Від сторонньої флори позбавлялися за допомогою звичайних методів мікробіологічної техніки [4]. Для пригнічення росту бактерій, які забруднюють грибні культури, при виділенні використовували підкислений агар (pH 4,5-5,0) або антибіотики.

Результати та обговорення. На кафедрі фізіології рослин біологічного факультету Донецького національного університету для дослідження прооксидантно-антиоксидантної системи грибів, створено колекцію культур базидіальних грибів (відділ *Basidiomycota*). На сьогодні колекція налічує 125 штамів, що належать до 23 видів 18 родів базидіоміцетів. Серед цих культур 27 штамів належать до порядку *Polyporales* (поліпорові або афілофорові) та 98 – до порядку *Agaricales* (агарикові). Переважна більшість інтродукованих штамів (88%) виділена в чисту культуру з дикоростучих плодових тіл (ДПТ) грибів, зібраних на природних субстратах в різних місцевостях Донецької області.

В табл. 1. наведено наступні відомості: загальний список штамів та їх видова приналежність, джерело надходження: місце збору ДПТ, з яких інтродуковані відповідні культури або колекції чи комерційні організації, з яких отримані штами для досліджень, рік інтродукції та наявність у колекції культур кафедри фізіології рослин (КФР) чи ІВК. Відомості про систематичне положення культур грибів розглядаються згідно сучасних літературних джерел [11].

Таблиця 1

Список штамів, що складають колекцію культур базидіоміцетів кафедри фізіології рослин, задіяних у вивченні прооксидантно-антиоксидантної системи грибів

Вид	Шифр штаму	Джерело надходження *	Рік інтродукції	Наявність у колекції
1	2	3	4	5
Порядок *Polyporales*				
Amyloporia lenis (Karst.) Bond. et Sing.	A-004	НПП „СГ"	1994	ІВК
Daedalea quercina Fr.	T-352	КЛ	1995	ІВК
	Dq-08	КЛ	2008	КФР, ІВК
Fomes fomentarius (L. ex Fr.) Gill.	Ff-09	Дн	2009	КФР
	T-10	Дн	2010	КФР
	Ff-1201	ІФ	2012	КФР
Fomitopsis pinicola (Schwein.: Fr.) P. Karst.	TO-09	ДБС	1991	ІВК
Ganoderma lucidum (Curt.: Fr.) P. Karst.	Gl-1	Сн	2008	КФР, ІВК
	Gl-2	Сн	2008	КФР, ІВК
	Gl-3	Сн	2008	КФР, ІВК
	Gl-B-99	Сн	1999	КФР
	Gl-11	Сн	2011	КФР
Grifola frondosa (Dicks.) Gray	Gf-01	КЛ	2008	КФР
Irpex lacteus Fr.	B-059	Дн	1991	ІВК
	A-032	Дн	1991	ІВК
	Il-4k	Дн	2004	КФР
	Il-1	Дн	2011	КФР
	Il-1201	Дн	2012	КФР
Laetiporus sulphureus (Bull.) Murrill	Ls-08	КЛ	2008	КФР
	Ls-09	КЛ	2009	КФР
	Ls-11	Дн	2011	КФР
Trametes hirsuta (Wulfen) Lloyd	Th-11	Дн	2011	КФР
Trametes ochracea (Pers.) Gilb. & Ryvarden	TO-1201	Дн	2012	КФР
Trametes trogii Berk.	Tt-11	Дн	2011	КФР
Trichaptum biforme (Fr.) Ryvarden	Tb-11	Дн	2011	КФР
Tyromyces revolutus (Bres.) Bond, et Sing.	A-025	Дн	1995	ІВК
Tyromyces undosus (Peck) Murr.	M-250	Дн	1995	ІВК
Порядок *Agaricales*				
Agrocybe aegerita Fayod.	167	ІВК	2009	КФР, ІВК
	218	ІВК	2009	КФР, ІВК
	960	ІВК	2009	КФР, ІВК
Fistulina hepatica Schff. ex Fr.	Fh-08	КЛ	2008	КФР, ІВК
	Fh-18	КЛ	2008	КФР, ІВК
Flammulina velutipes (Curt.: Fr.) Sing.	F-03	ДБС	2002	КФР, ІВК
	F-04	ДБС	2002	ІВК
	F-06	ДБС	2002	КФР, ІВК
	F-073	ДБС	2002	КФР, ІВК
	F-074	ДБС	2002	ІВК
	F-1	Дн	1998	КФР, ІВК
	F-10	Дн	2010	КФР
	F-101	Дн	2009	ІВК

Продовження табл. 1

1	2	3	4	5
Flammulina velutipes (Curt.: Fr.) Sing.	F-102	НПП „СГ”	2002	КФР, ІВК
	F-103	ДБС	2010	ІВК
	F-104	НПП „СГ”	2004	КФР, ІВК
	F-107	НПП „СГ”	2004	КФР, ІВК
	F-11	Дн	2011	КФР
	F-112	НПП „СГ”	2002	КФР
	F-1v	Дн	2009	ІВК
	F-2	Дн	2009	КФР, ІВК
	F-201	Дн	2003	ІВК
	F-202	Дн	2003	КФР, ІВК
	F-203	Дн	2003	ІВК
	F-204	Дн	2003	КФР
	F-3	Дн	1998	ІВК
	F-v_1	Дн	2001	ІВК
	F-vv	Дн	2002	КФР, ІВК
	F-610	ІВК	2003	ІВК
	F-1105	Дн	2012	КФР
Lentinus edodes (Berk.) Singer	Le-10	Китай	2009	КФР, ІВК
	Le-2	Китай	2009	КФР, ІВК
	Le-340	ІВК	2001	КФР, ІВК
	Le-4	Китай	2009	КФР, ІВК
	Le-5	Китай	2008	ІВК
	Le-6	Китай	2008	КФР, ІВК
	Le-7	Китай	2008	КФР, ІВК
	Le-9	Китай	2009	ІВК
Lepiota cristata (Bolton) P. Kumm.	1	Дн	2010	ІВК
	2	Дн	2010	ІВК
	3	Дн	2010	ІВК
	4	Дн	2010	ІВК
Pleurotus citrinopileatus Singer.	P-citr.	УкрМ	1997	КФР
Pleurotus eryngii (DC.: Fr.) Quél.	P-er	УкрМ	1997	КФР
Pleurotus ostreatus (Jacq.: Fr.) P. Kumm.	D-140	Дн	2001	КФР, ІВК
	Hk-35	Угорщина	2004	КФР
	P-004	Дн	2004	КФР, ІВК
	P-008	Дн	2008	ІВК
	P-01	Дн	2001	КФР, ІВК
	P-011	Дн	2003	ІВК
	P-035	Дн	1995	КФР, ІВК
	P-038	Дн	1999	ІВК
	P-039	Дн	1999	КФР, ІВК
	P-081	ДБС	1998	КФР, ІВК
	P-082	ДБС	1998	КФР, ІВК
	P-083	ДБС	1998	КФР, ІВК
	P-087	ДБС	1998	КФР, ІВК
	P-088	ДБС	1998	КФР, ІВК
	P-089	ДБС	1998	КФР, ІВК
	P-105	Сл	2004	КФР, ІВК
	P-106	Сл	2004	ІВК
	P-107	Сл	2007	КФР, ІВК
	P-108	Сл	2008	ІВК
	P-12	НПП „СГ”	2002	ІВК
	P-12к	НПП „СГ”	2002	КФР, ІВК
	P-175	Сл	2005	ІВК
	P-191	КЛ	2007	КФР, ІВК
	P-192	КЛ	2007	КФР, ІВК
	P-200	Дн	2000	ІВК
	P-202	Дн	2003	ІВК
	P-203	Дн	2003	КФР, ІВК
	P-204	Дн	2004	ІВК
	P-206	Дн	1997	КФР, ІВК
	P-208	Дн	2006	КФР, ІВК
	P-209	Дн	2006	КФР

Продовження табл. 1

1	2	3	4	5
Pleurotus ostreatus (Jacq.: Fr.) P. Kumm.	P-210	НПП „СГ”	2007	КФР, ІВК
	P-217	НПП „СГ”	2007	ІВК
	P-47	НПП „СГ”	2007	ІВК
	P-6	Дн	2006	ІВК
	P-6v	Дн	2006	КФР, ІВК
	P-кл	Дн	2007	КФР, ІВК
	P-14	НПП „СГ”	2002	ІВК
	P-2к	Дн	2010	ІВК
	P-4к	Дн	2010	КФР
	P-4	Дн	2010	ІВК
	P-7	Дн	2010	ІВК
	P-90	Дн	2009	ІВК
	P-91	Дн	2009	КФР, ІВК
	P-93	Дн	2009	ІВК
	P-94	Дн	2009	КФР, ІВК
	P-998	Дн	2008	КФР
	P-447	Дн	2011	КФР
	P-2175	Дн	2011	КФР
Schizophyllum commune Fr.: Fr.	Sc-10	Дн	2010	ІВК
	Sc-1101	Дн	2011	КФР
	Sc-1102	Дн	2011	КФР
	Sc-1104	Дн	2011	КФР
	Sc-201	НПП „СГ”	2001	ІВК

Примітка: “ * ” – вказані скорочені назви місць збору ДПТ, з яких інтродуковані відповідні культури або колекції чи комерційні організації, з яких отримані штами: ДБС – Донецький ботанічний сад НАН України; Дн – м. Донецьк; ІВК– шифр Колекції культур шапинкових грибів Інституту ботаніки ім. М.Г. Холодного НАН України; ІФ – м. Івано-Франківськ; КЛ – Краснолиманське лісництво; НПП «СГ» – національний природний парк “Святі гори”; СЛ – Слов’янське лісництво; Сн – м. Сніжне; УкрМ – ТОВ „Укрміцелій”.

Аналіз колекції штамів говорить про те, що всі вони є ксилотрофами, 74,4% із яких є їстівними, 25,6% – неїстівними, 85,6% – лікарськими [12]. Значна частина – 96 штамів або 87,3% від інтродукованих нами в культуру базидіоміцетів депоновано у Колекції культур шапинкових грибів Інституту ботаніки ім. М.Г. Холодного НАН України (ІВК), що має статус Національного надбання України [6].

Створена колекція, перш за все, використується з науково-дослідницькою метою для вивчення прооксидантно-антиоксидантної системи грибів: антиоксидантної, каталазної, пероксидазної, супероксиддисмутазної активності, процесів перекисного окиснення ліпідів, вмісту поліфенольних речовин і пігментів – каротиноїдів, меланінів. Також вона задіяна для розробки і удосконалення методів виділення та культивування штамів, оптимізації складу живильних середовищ та умов росту і зберігання культур, ініціації плодоношення. Отже, створено засади можливого біотехнологічного використання антиоксидантних властивостей базидіоміцетів в різних галузях промисловості, сільського господарства, фармакогнозії та біоіндикації. Отримані нові експериментальні дані з біології базидіоміцетів: їх антиоксидантної, супероксиддисмутазної, каталазної і пероксидазної активності, рівня перекисного окиснення ліпідів та вмісту поліфенолів і пігментів. Розроблені нові способи індукції біосинтетичної активності та живильні середовища для виділення та культивування базидіоміцетів [13-18].

Отримані штами та експериментальні дані використовуються в навчальному процесі на біологічному факультеті ДонНУ при викладанні навчальних курсів „Лікарські речовини рослин і грибів” [7], „Новітні технології біоіндикації та екологічні проблеми Донбасу”, “Сучасні проблеми біології”, “Основи грибівництва” та виконанні курсових, дипломних і магістерських робіт. Зокрема, для апробації можливостей використання різноманітних макроміцетів в якості об'єктів культивування, продуцентів біологічно активних речовин, для отримання плодових тіл, мікоіндикації тощо.

Висновок. Таким чином, створена колекція культур базидіальних грибів, що налічує 125 штамів відповідає поставленій меті – дослідження їх прооксидантно-антиоксидантної системи. Вона також є фактором збереження біорізноманіття макроміцетів унікального урбанізованого довкілля Донецького регіону. Винятковість цієї мікобіоти пояснюється загальнобіологічною закономірністю про те, що будь-який організм під час впливу на нього факторів зовнішнього середовища чи при освоєнні нової еконіші або є резистентним, або, як правило, адаптується. Це реалізується шляхом набуття нових властивостей і зміни норм реакції, що досягається за рахунок варіабельності онтогенетичних і фізіологічних властивостей. Ці адаптаційні перебудови, скоріше за все ведуть і до формування мікобіоти урбанізованих систем цих територій, що стала основою створеної колекції культур базидіоміцетів.

РЕЗЮМЕ

Работа посвящена созданию коллекции культур базидиальных грибов (отдел *Basidiomycota*) для исследования прооксидантно-антиоксидантной системы грибов. С этой целью использованы методы тканевых изолятов, а также идентификации и анализа систематической принадлежности по макро- и микроскопическим признакам карпофоров и соматических культур. Получено 125 штаммов, принадлежащих к 23 видам 18 родов базидиомицетов, из которых 27 штаммов относятся к порядку *Polyporales* (полипоровые или афиллофоровые) и 98 – к порядку *Agaricales* (агариковые).

Ключевые слова: коллекция культур, базидиомицеты, прооксидантно-антиоксидантная система.

SUMMARY

The goal of the investigation is forming the basidiomycetes fungi culture collection (phylum *Basidiomycota*) as the base of researching the prooxidant-antioxidant system of fungi. Methods of tissue isolates as well as identification and analysis of the systematic affiliation by the macro- and microscopic characteristics of carpophores and culture mycelium were used for this purpose. The obtained collection includes 125 strains belonging to 23 species of 18 genera of basidiomycetes. 27 strains belong to the order *Polyporales* and 98 belong to the order *Agaricales* among these cultures.

Keywords: collection of cultures, basidiomycetes, prooxidant-antioxidant system.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Гарибова Л.В. Основы микологии: Морфология и систематика грибов и грибоподобных организмов. Учебное пособие. / Л.В. Гарибова, С.Н. Лекомцева. – М.: ТНИ КМК. 2005. – 220 с.
2. Бухало А.С. Лекарственные препараты и пищевые добавки из макромицетов / А.С. Бухало, Э.Ф. Соломко, С.П. Вассер, О.Б. Михайлова // Успехи медицинской микологии. – М.: Нац. акад. Микологии. – 2005. – Т. 5. – С. 254 – 256.
3. Культивирование съедобных и лекарственных грибов. Практические рекомендации / [А.С. Бухало, Н.А. Бисько, Э.Ф. Соломко, В.Т. Билай, Н.Ю. Митропольская, Н.Л. Поединок, А.А. Гродзинская, О.Б. Михайлова]; под ред. А. С. Бухало. – К.: Чернобыльинтеринфом, 2004. – 128 с.
4. Дудка И.А. Методы экспериментальной микологии. Справочник. / И.А. Дудка, С.П. Вассер, И.А. Элланская. – К.: Наук. думка, 1982. – 550 с.
5. Пирог Т.П. Загальна мікробіологія: Підручник / Т.П. Пирог. – К.: НУХТ, 2010. – 623 с.
6. Buchalo A.S. Catalogue of the culture collection of mushrooms / A.S. Buchalo, N.Yu. Mitropolskaya. – K., 2006. – 36 p.
7. Федотов О.В. Лікарські речовини рослин і грибів: Монографія у вигляді навчального посібника. / О.В. Федотов. – Донецьк: Норд Комп'ютер, 2007. – 204 с.
8. Хоуксворт Д.Л. Общее количество грибов, их значение в функционировании экосистем, сохранение и значение для человека / Д.Л. Хоуксворт // Микология и фитопатология. – 1992. – Т. 26. – Вып. 2. – С. 152-166.
9. Дудка І.О. Гриби заповідників та національних природних парків Лівобережної України. / І.О. Дудка, В.П. Гелюта, Т.В. Андріанова, В.П. Гайова, Ю.Я. Тихоненко, М.П. Придюк, Ю.І. Голубцова, Т.І. Кривомаз, В.В. Джаган, Д.В. Леонтьев, О.Ю. Акулов, О.В. Сивоконь. – К.: Арістей, 2009. – Т. 1. – 306 с.
10. Буценко Л.М. Технології мікробного синтезу лікарських засобів: Навч. посіб. / Л.М. Буценко, Ю.М. Пенчук, Т.П. Пирог. – К.: НУХТ, 2010. – 323 с.
11. Kirk P.M. Ainsworth & Bisby's Dictionary of the fungi. 9th ed. / P.M. Kirk, P.F. Cannon, J.C. David, J.A. Stalpers. – Wallingford, CAB International, 2001. – 655.
12. Бухало А.С. Базидіальні макроміцети з лікарськими властивостями / А.С. Бухало, Е.Ф. Соломко, Н.Ю. Митропольська // Український ботанічний журнал. – 1996. – Т. 53, № 3. – С. 192–201.
13. Патент 12384 України. Спосіб визначення стресового стану базидіоміцетів та екологічного стану місця їх зростання за вмістом продуктів перекисного окиснення ліпідів / Федотов О.В. Заяв. № u200504732, від 20.05.2005, кл. C04B35/00, A01G7/00, C30B28/00, A01H3/00, Бюл. № 2, від 15.02.2006.
14. Патент 34089А України. Штам соматичних структур базидіального гриба *Amyloporia lenis* (Karst.) Bond. et Sing. КВ–92 (А–004) – продуцент протеолітичних ферментів / Бойко М.І., Федотов О.В., Негруцький С.Ф. Заяв. № 99063017, від 02.06.1999, кл. 6С12N9/52, А23С19/032, Бюл. № 1, від 15.02.2001.
15. Патент 34553А України. Штам соматичних структур макроміцету *Tyromyces revolutus* (Bres.) Bond. et Sing. БN–92 (А–025) – продуцент молокозсідального фермента / Федотов О.В., Бойко М.І., Негруцький С.Ф. Заяв. № 98020847, від 18.02.1998, кл 6С12N9/50, А23С19/032, Бюл. № 2, від 15.03.2001.
16. Патент 3863 України. Штам F–203 соматичних структур їстівного базидіоміцету Flammulina velutipes (Curt.: Fr.) Sing.– продуцент плодових тіл і міцелію з антиокисними властивостями та екзо– і ендопероксидаз / Федотов О.В. Заяв. № 2004032388, від 31.03.2004, кл. 7С12N1/14, А01G1/04, Бюл. № 12, від 15.12.2004.
17. Патент 39760 України. Живильне середовище для вирощування штаму Р–6v Pleurotus ostreatus (Jacq.: Fr.) Kumm. – продуцента каталази / Федотов О.В., Брусніцина О.М. Заяв. № u200812035, від 10.10.2008, МПК (2009), кл. C12N9/52, A23C19/00 Бюл. № 5, від 10.03.2009.
18. Патент 46461А Україна. Штам соматичних структур їстівного базидіоміцету *Pleurotus ostreatus* (Jacg.: Fr.) Kumm. Р–01 – продуцента плодових тіл і міцелію з антиокисними властивостями / Федотов О.В., Вовк Н.В. Заяв. № 2001075193, від 20.07.2001, кл. 7С12N1/14, А01G1/04, Бюл. № 5, від 15.05.2002.

Надійшло до редакції 31.01.2012 р.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРІВ

1. Для публікації у «Віснику Донецького університету. Сер. А: Природничі науки» приймаються не опубліковані раніше наукові роботи.

2. Рукопис подається в 2-х примірниках (українською, російською або англійською мовами), надрукованих з одного боку аркуша паперу формату А4 (другий примірник підписується авторами). Обсяг рукопису, як правило, не повинен перевищувати 8 сторінок, включаючи малюнки, таблиці, список літератури. Разом із рукописом подається CD-диск з повним текстом статті й окремими додатковими електронними файлами зазначеними нижче (в форматі WORD for WINDOWS 6.0-7.0 Rus / Office 97-2003). Основний текст статті – шрифт Times New Roman Cyr, розмір 10 пт., з вирівнюванням по ширині; резюме, список літератури, таблиці, підрисуночні підписи – шрифт Times New Roman Cyr, розмір 9. Формули, їх компоненти і усі змінні в тексті та окремо в рядках набираються лише за допомогою редактора формул Microsoft Equation 3.0 або MathType 5.0; текст та змінна – курсивом, матриця і вектор – полужирним курсивом; розмір: 11 пт., 9 пт., 8 пт., 18 пт., 12 пт. (звичайний, крупний індекс, дрібний індекс, крупний символ, дрібний символ – відповідно); поля дзеркальні: верхнє – 20 мм, нижнє – 25 мм, зсередини – 30 мм, зовні – 20 мм. Міжрядковий інтервал – одинарний. Абзацний відступ – 1 см.

3. Рукопис починається з індексу УДК у верхньому лівому кутку сторінки. Текст рукопису повинен відповідати структурній схемі: **назва** – жирний, посередині (прописними літерами без перенесення слів); *ініціали та прізвище авторів*, курсив, по лівому краю (для тих, хто не є співробітником університету, наводиться повна назва організації, яку представляє автор); **резюме** обсягом до 100 слів, має коротко відображати предмет статті, застосовані методи досліджень та основні результати, отримані авторами, та закінчуватися *ключовими словами*; **вступ** (постановка проблеми у загальному вигляді та зв'язок із важливими науковими чи практичними завданнями, аналіз останніх досліджень і публікацій, в яких започатковано розв'язання даної проблеми і на які спирається автор, виділення невирішених раніше частин загальної проблеми, котрим присвячується означена стаття, формулювання цілей статті); **основний розділ** (можливі підрозділи, де викладаються основні матеріали дослідження з повним обґрунтуванням отриманих наукових результатів); **висновки** з даного дослідження (стисло і чітко підсумовуються основні результати, отримані авторами і перспективи подальших розвідувань у даному напрямку). Прізвища та ініціали авторів, назва статті, текст резюме і ключові слова українською, російською і англійською мовами додається до рукопису на окремому аркуші та у вигляді окремого файлу. Для авторів – не громадян України надання україномовного перекладу резюме необов'язкове. Сторінки рукопису повинні бути послідовно пронумеровані. Всі значення фізичних величин виражаються в системі СІ. Для текстового матеріалу використовується теперішній час (за виключенням звернення до попередніх статей).

4. Рисунки і таблиці оформляються відповідно ДСТУ 3008-95 та розташовуються по тексту строго в межах друкованого поля книжкової орієнтації сторінок. Уся текстова інформація на рисунках повинна бути чіткою та розбірливою і не мати зайвих деталей (наприклад на графіках не допускаються „вторинні" відмітки на координатних осях та ін.). Необхідно слідкувати за тим, щоб після можливого зменшення до розміру 80 мм висота літер та цифр на рисунку залишалась не меншою 2 мм. Кожний рисунок має підпис (не поєднаний з малюнком), а таблиця – заголовок (вирівнювання по центру). Всі рисунки і таблиці повинні бути послідовно пронумеровані арабськими цифрами. Бажано додавати ілюстративний матеріал в графічному форматі JPG, TIFF, BMP та ін. (графіки – чорно-білі, 300 dpi; фотографії – у відтінках сірого, 300 dpi) у вигляді окремих файлів з назвами ris1, ris2, ... Формули мають наскрізну нумерацію з правого поля.

5. Перелік літературних джерел (список літератури) подається загальним списком в кінці рукопису в порядку посилань у тексті (а не в алфавітному порядку) на мові оригіналу відповідно вимог викладених у Бюлетені ВАК України (2008, №3, с. 9-13). Посилання на джерело дається в квадратних дужках. Необхідне включення у список якомога більш свіжих першоджерел з досліджуваного питання (не більш, як трьох - чотирьохрічної давності). Не слід обмежуватись цитуванням робіт, які належать тільки одному колективу авторів чи дослідницькій групі. Дуже бажаним є посилання на сучасні закордонні публікації. Статті, що не містять посилань на роботи, які вийшли протягом останнього десятиріччя, як правило, автоматично вважаються такими, що не відповідають редакційним вимогам.

6. Стаття супроводжується листом-заявою від організації, відомостями про авторів (ПІБ, місце роботи, посада, поштова адреса, телефон, E-mail).

7. Рукописи що не відповідають редакційним вимогам, та статті, що не відповідають тематиці журналу, до розгляду не приймаються.

8. Редакція залишає за собою право проводити редакційну правку рукописів. У разі відмови в публікації статей редколегія не повертає автору рукопис статті. Коректура статей авторам не надсилається.

Матеріали надсилаються за адресою: 83001, м. Донецьк-1, вул. Університетська, 24.
Контактні: тел/факс (062) 305-16-51
E-mail: res.pro-rector@donnu.edu.ua

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Вісник Донецького національного університету
Серія А. Природничі науки

Науковий журнал

2012 – № 1

Українською, російською та англійською мовами

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ №14285-3256Р від 20.06.2008 р.

Друкується за рішенням Вченої Ради Донецького національного університету

Редактор: *Є. В. Алтухов*
Технічний редактор: *М. В. Фоменко*

Підписано до друку 09.04.2012 р.
Формат 60 х 84/8, Папір офсетний.
Друк – цифровий. Умовн. друк. арк. 20.
Тираж 300 прим. Замовл. №___

Видавництво Донецького національного університету
83001, м. Донецьк, вул. Університетська, 24
Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру
серія ДК №1854 від 24.06.2004 р.