ISSN 2415-7058

Вестник Донецкого национального университета

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
Основан в 1997 году

Серия А
Естественные науки

1/2018

Редакционная коллегия журнала «Вестник Донецкого национального университета. Серия А: Естественные науки»

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

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

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

Члены редколлегии: д-р хим. наук, проф. **А.С. Алемасова**; д-р экон. наук., проф. **В.Н. Андриенко**; д-р техн. наук, проф. **В.В. Белоусов**; д-р биол. наук, проф. **М.И. Бойко**; д-р физ.-мат. наук, проф. **Б.В. Бондарев**; д-р физ.-мат. наук, проф. **Вал.В. Волчков**; д-р физ.-мат. наук, проф. **Вит.В. Волчков**; д-р биол. наук, проф. **А.З. Глухов**; д-р физ.-мат. наук, проф. **А.С. Гольцев**; д-р физ.-мат. наук, проф. **Г.В. Горр**; д-р техн. наук, проф. **В.В. Данилов**; д-р физ.-мат. наук, проф., акад. НАН Беларуси **С.А. Жданок** (Беларусь); д-р физ.-мат. наук, проф. **С.А. Калоеров;** д-р физ.-мат. наук, доц. **С.А. Мельник** (Крымский федеральный университет, РФ); д-р физ.-мат. наук, проф. **А.Г. Милославский**; д-р хим. наук, проф. **В.М. Михальчук**; д-р техн. наук, проф. **Ф.В. Недопекин**; д-р биол. наук, проф. **В.И. Соболев** (Крымский федеральный университет, РФ); д-р техн. наук, проф. **В.И. Сторожев**; д-р физ.-мат. наук, д-р техн. наук, проф. **В.К. Толстых**; д-р хим. наук, проф. **Т.Г. Тюрина**; д-р биол. наук, проф. **Н.Н. Ярошенко**.

The Editorial Board of the journal "Bulletin of Donetsk National University. Series A: Natural Sciences"

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

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

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

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

Адрес редакции: ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»
ул. Университетская, 24, г. Донецк, 283001

Тел: (062) 302-92-56, 302-92-93
E-mail: vestnikdonnu_a@mail.ru **URL**: http://donnu.ru/vestnikA

Научный журнал «Вестник Донецкого национального университета. Серия А: Естественные науки» включен в **Перечень** рецензируемых научных изданий, в которых могут быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней кандидата и доктора наук (приказы МОН ДНР № 1134 от 01.11.2016 г. и № 1468 от 26 12.2017 г.) по следующим группам научных специальностей: 01.01.00 – Математика; 01.02.00 – Механика; 01.04.00 – Физика; 02.00.00 – Химические науки; 03.02.00 – Общая биология.

Журнал включен в перечень **РИНЦ** (Лицензионный договор № 378-06/2016 от 24.06.2016 г.). Информация о статьях отражается в Реферативном журнале и Базах данных **ВИНИТИ РАН** (договор о сотрудничестве от 11.04.2011 г.).

Печатается по решению Ученого совета ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет» Протокол № 4 от 30.03.2018 г.

© ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», 2018

Вестник Донецкого национального университета

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

ОСНОВАН В 1997 ГОДУ

***Серия А.* Естественные науки** **№ 1** Донецк **2018**

СОДЕРЖАНИЕ

Механика

Абрамова О.П. Упорядочение операторов полей смещений отдельных квантовых точек, эллиптических цилиндров в связанных фрактальных структурах 3

Калоеров С.А., Глушанков Е.С. Действие линейного потока тепла в пьезопластинках с отверстиями и трещинами 15

Калоеров С.А., Занько А.И. Изгиб многосвязной плиты под действием сосредоточенных сил во внутренних точках 27

Моисеенко И.А. Распространение нормальных волн вдоль трансверсально изотропных функционально градиентных цилиндров 37

Физика

Абрамов В.С. Анизотропная модель и переходные сигналы от бинарных космологических объектов: черных дыр, нейтронных звезд 55

Беспалова С.В., Романчук С.М., Готин Б.А., Перебейнос В.В., Саакян О.Н. Моделирование оптических параметров источников возбуждения импульсно-модулированного флуориметра 69

Химические науки

Гребенюк С.А., Хилько С.Л., Прокопьева Т.М., Михайлов В.А. Особенности строения оксимов имидазолиевого ряда в растворах. I. Дихлорид 1,3-бис[(3`-метилимидазол-1`-ил)-2-оксиминопропана в уксусной кислоте 76

Игнатов А.В., Жегайло А.О., Яблочкова Н.В., Сурмач Т.С. Изоморфное замещение свинца барием в двойном фосфате калия свинца со структурой апатита 89

Мороз Я.А., Чередниченко Л.А. О некоторых закономерностях термолиза гетерополиоксометаллатов с 3d-элементами 95

Полищук Т.Б., Моренко В.В. Реологические свойства растворов пектинов после предварительной обработки растительного сырья высоким давлением 104

Биологические науки

Глухов А.З., Хархота, Л.В. Лихацкая Е.Н. Новая коллекция-экспозиция можжевельников в Донецком ботаническом саду 112

Губарев А.А., Мицкан В.В., Краюшкин О.В. Модель хищник-жертва, учитывающая нижнюю критическую плотность жертвы и конкуренцию хищников за отличный от жертв ресурс 117

Иосиф Ильич Гихман (к столетию со дня рождения) 127

Александр Сергеевич Космодамианский (к девяностопятилетию со дня рождения) 130

Bulletin of Donetsk National University

SCIENTIFIC JOURNAL

FOUNDED IN 1997

***Series A.* Natural Sciences** **No 1** Donetsk **2018**

CONTENTS

Mechanics

Abramova O.P. Ordering of the displacement field operators of separate quantum dots, elliptical cylinders in coupled fractal structures 3

Kaloerov S.A., Glushankov E.S. The linear heat flow action in piezoplates with holes and cracks 15

Kaloerov S.A., Zanko A.I. Bending of multiconnected anisotropic plate under action focused forces in internal points 27

Moiseyenko I.A. Propagation of normal waves along transversely isotropic functionally graded cylinders 37

Physics

Abramov V.S. Anisotropic model and transient signals from binary cosmological objects: black holes, neutron stars 55

Bespalova S., Romanchuk S., Gotin B., Perebeinos V., Saakyan O. Simulation of field source`s optical characteristics of pulse-modulated fluorometer 69

Chemical sciences

Grebeniuk S.A., Khil'ko S.L., Prokop'eva T.M., Mikhailov V.A. Structure peculiarities of imidazolium oximes in solutions. I. 1,3-bis(3`-methyli midazolium-1`-yl)-2-hydroximinopropane dichloride 76

Ignatov A.V., Zhegailo A.O., Yablochkova N.V., Surmach T.S. Isomorphous substitution of lead for barium in potassium and lead double phosphate with structure of apatite 89

Moroz Y.A., Cherednichenko L.A. Some regularities of the thermal decomposition of heteropoly-oxometallates with 3d–elements 95

Polishchuk T.B., Morenko V.V. Rheological properties of solutions of pectins after preliminary processing of plant raw material with high pressure 104

Biological sciences

Glukhov A.Z., Kharkhota L.V., Likhatskaya E.N. New collection and exhibition area of juniper species in the Donetsk botanical garden 112

Gubarev A.A., Mickan V.V., Kraushkin O.V. The predator–prey model with lower critical prey density and competition predator for resources other then prey 117

Iosif Il'ich Gikhman (to the 100-th birth anniversary) 127

Aleksandr Sergeevich Kosmodamianskii (to the 95-th birth anniversary) 130

М Е Х А Н И К А

УДК 539:519.517.3

УПОРЯДОЧЕНИЕ ОПЕРАТОРОВ ПОЛЕЙ СМЕЩЕНИЙ ОТДЕЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК, ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ ЦИЛИНДРОВ В СВЯЗАННЫХ ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ

© 2018. ***О.П. Абрамова***

Предложено для квантовых вычислений использовать упорядоченные операторы полей смещений связанных фрактальных структур с квантовыми точками и эллиптическими цилиндрами. Методом численного моделирования исследовано поведение поля деформации таких систем. Показано, что результирующее поле деформации структуры с числом квантовых точек больше двух зависит от упорядочения операторов полей смещений для отдельных квантовых точек. Для связанной фрактальной структуры с эллиптическими цилиндрами характерно наличие комплексного поля деформации. Использование нулевых операторов для пар квантовых точек позволяет получить информацию об отдельных квантовых точках. Перестановка пар операторов позволяет переносить часть информации из одной квантовой точки в другую.

Ключевые слова: связанные фрактальные структуры, квантовые точки, эллиптические цилиндры, упорядочение операторов, поле деформации, квантовые вычисления, численное моделирование.

Введение. Квантовая обработка информации, квантовые вычисления требуют использования законов квантовой механики [1]. При этом возникает необходимость теоретического и экспериментального моделирования явлений квантового перепутывания, квантовой телепортации, декогеренции квантовых состояний активных объектов [2]. Классические компьютеры кодируют информацию в битах, которые могут находиться в одном из двух состояний, 0 или 1. Квантовые компьютеры кодируют информацию в кубитах, которые могут быть в суперпозиционных состояниях [3–5]. При этом возникает явление перепутывания состояний [3–6]. Физическими системами, реализующими кубиты, могут быть любые объекты, имеющие два квантовых состояния: поляризационные состояния фотонов; электронные состояния атомов или ионов, отдельные атомы, спиновые состояния ядер атомов в ловушках; квантовые точки. Отдельные объекты, помещенные в ловушки, могут проявлять стохастические свойства, что усложняет практическую реализацию кубитов для квантовых компьютеров.

Также в качестве активных объектов могут быть выбраны наноструктуры, метаматериалы [7], различные фрактальные структуры [8–11]. При создании квантовых компьютеров (которые учитывают явления квантовой суперпозиции и перепутанности для передачи, обработки, хранения информационных данных) возникает необходимость теоретического и экспериментального исследования различных физических свойств таких наноструктур и метаматериалов [7]. В [8, 9] изучены особенности стохастического состояния поля деформации связанных фрактальных многослойных наносистем, наноловушек, квантовых точек с учетом вариации переменных параметров. Исследованию взаимовлияния отдельных структур, аттракторов, стохастических процессов друг на друга в связанной фрактальной структуре посвящены работы [10, 11]. С точки зрения экспериментальной реализации квантового компьютера актуальным является изучение различных фрактальных структур с квантовыми точками.

Целью данной работы является исследование влияния упорядочения операторов полей смещений отдельных фрактальных квантовых точек и фрактальных эллиптических цилиндров на поле деформации связанной фрактальной структуры.

Упорядочение операторов полей смещений отдельных квантовых точек. В работе [9] для описания стохастического состояния поля деформации многослойной наносистемы было получено восемь модельных нелинейных уравнений относительно безразмерной функции смещения u. Появление восьми уравнений связано с наличием различных ветвей для переменных модулей $\pm k_u$, $\pm k_u'$ функций эллиптического синуса из неявно заданного уравнения $k_u^2 + (k_u')^2 = 1$. Переменные модули k_u являются функциями от n, m, j узлов объемной дискретной решетки с размерами $N_1 \times N_2 \times N_3$.

В качестве исходного уравнения для безразмерной функции смещения u рассмотрим вторую ветвь из [9], уравнение которой имеет вид

$$u = u_2 = k_u^2 (1 - 2\mathrm{sn}^2(u_2 - u_0, k_u')); \quad k_u^2 = (1-\alpha)/Q, \tag{1}$$

где u_0 – постоянное (критическое) смещение; α – фрактальная размерность поля деформации u вдоль оси Oz ($\alpha \in [0,1]$); Q определяет вид фрактальной структуры, тип аттракторов и учитывает взаимодействие узлов, как в плоскости основной прямоугольной дискретной решетки $N_1 \times N_2$, так и межплоскостные взаимодействия.

Рассмотрим связанную фрактальную структуру, состоящую из четырех (i=1,2,3,4) отдельных фрактальных квантовых точек (ФКТ). С учетом выражения (1) нелинейные уравнения для безразмерной функции смещения $u = u_2$ такой связанной структуры имеют вид

$$u = u_2 = \sum_{i=1}^{4} u_{Ri}; \quad u_{Ri} = R_i k_{ui}^2 (1 - 2\mathrm{sn}^2(u_2 - u_{0i}, k_{ui}')); \tag{2}$$

$$k_{ui}^2 = (1-\alpha_i)/Q_i; \quad k_{ui}' = (1 - k_{ui}^2)^{1/2}; \tag{3}$$

$$Q_i = p_{0i} - b_{1i}(n - n_{0i})^2 / n_{ci}^2 - b_{2i}(m - m_{0i})^2 / m_{ci}^2 - b_{3i}(j - j_{0i})^2 / j_{ci}^2. \tag{4}$$

Здесь параметры p_{0i}, b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}, n_{0i}, n_{ci}, m_{0i}, m_{ci}, j_{0i}, j_{ci} характеризуют различные фрактальные структуры; R_i определяют ориентацию полей деформации отдельных структур в связанной системе. В общем случае все параметры могут зависеть от индекса слоя j и безразмерного времени t. Нелинейные уравнения (2)–(4) можно решать методом итераций по любому из индексов n, m, j. Если один из этих индексов считать фиксированным, то результатом итерации будет функция смещения, представляющая собой стохастическую поверхность, зависящую от двух других индексов.

Явный вид результирующей стохастической поверхности существенно зависит от порядка следования отдельных слагаемых в сумме (2) для поля деформации u_2, которые могут быть интерпретированы как отдельные операторы, описывающие суммарный стохастический процесс. Появление стохастичности связано с наличием переменных модулей k_{ui}, k_{ui}' в (2), (3).

При моделировании поведения суммарного поля деформации связанной фрактальной структуры с квантовыми точками сначала рассмотрим четыре варианта с парами из двух различных квантовых точек со сдвинутыми центрами тяжести: (ФКТ1,

ФКТ3), (ФКТ1, ФКТ2), (ФКТ4, ФКТ2) и (ФКТ4, ФКТ3).

Для указанных пар на рис. 1 даны зависимости суммарного поля деформации связанной структуры от индексов (n, m) узлов решетки. Итерационная процедура по индексу n моделирует стохастический процесс на прямоугольной решетке с размерами $N_1 \times N_2$, $N_1 = 240$, $N_2 = 180$. Уравнения поверхностей рассматриваемых структур не зависят от индекса j, поэтому параметры $b_{3i} = 0$.

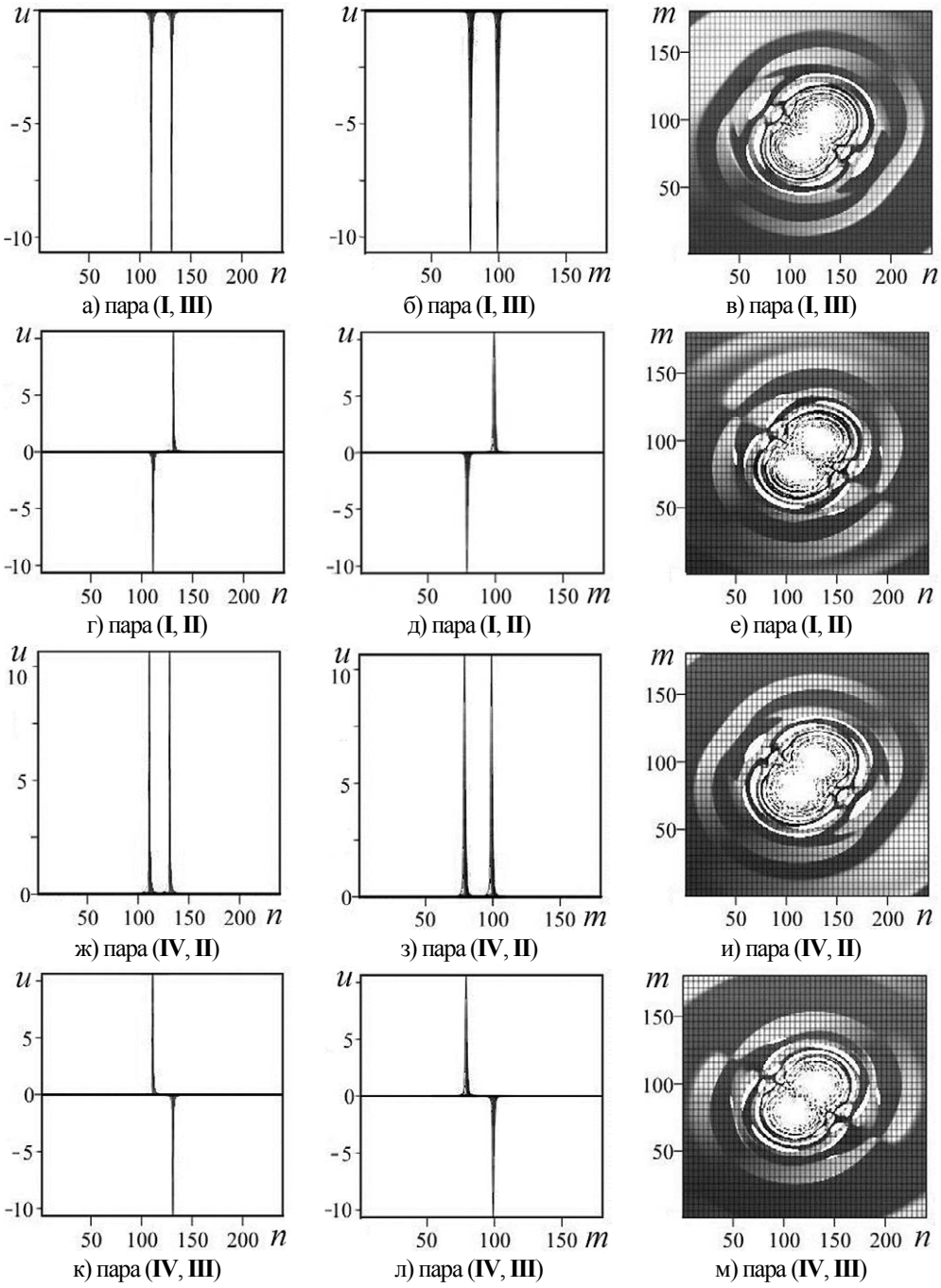


Рис. 1. Поведение функции смещения $u = u_2 \cdot 10^{-2}$ для различных пар квантовых точек со сдвинутыми центрами тяжести: (а, г, ж, к) – проекции на плоскость nOu; (б, д, з, л) – проекции на плоскость mOu; (в, е, и, м) – сечения $u_2 \in [-0.1; 0.1]$ (вид сверху).

Основные параметры выбраны одинаковыми для всех четырех ФКТ: $\alpha_i = 0.5$, $u_{0i} = 29.537$, $p_{0i} = -3.457 \cdot 10^{-11}$, $b_{1i} = b_{2i} = 1$, $n_{ci} = 24.4793$, $m_{ci} = 15.7295$.

Параметры R_i характеризуют взаимную ориентацию ФКТ. Параметры n_{0i}, m_{0i} определяют положения центров тяжести ФКТ.

Квантовые точки с противоположной ориентацией полей деформации ФКТ1 ($i = 1$, $R_1 = 1$) и ФКТ4 ($i = 4, R_4 = -1$) расположены в одной точке с координатами $n_{0i} = 111.1471$, $m_{0i} = 79.3267$.

Квантовые точки с противоположной ориентацией полей деформации ФКТ2 ($i = 2$, $R_2 = -1$) и ФКТ3 ($i = 3, R_3 = 1$) также расположены в одной точке, но с другими координатами $n_{0i} = 131.1471$, $m_{0i} = 99.3267$.

При этом в выражениях (2) паре (ФКТ1, ФКТ3) соответствует упорядоченный оператор $u_2 = u_{R1} + u_{R3}$, который является суперпозицией из отдельных операторов u_{R1}, u_{R3}; паре (ФКТ1, ФКТ2) – оператор $u_2 = u_{R1} + u_{R2}$; паре (ФКТ4, ФКТ2) – оператор $u_2 = u_{R4} + u_{R2}$; паре (ФКТ4, ФКТ3) – оператор $u_2 = u_{R4} + u_{R3}$.

Так для пар (ФКТ1, ФКТ3) и (ФКТ4, ФКТ2) наблюдаются пики вниз (рис. 1 а, б) и вверх (рис. 1 ж, з), локализованные вблизи ФКТ1, ФКТ3 и ФКТ4, ФКТ2 с одинаковой ориентацией. В сечениях (рис. 1 в, рис. 1 и) наблюдаются две фрактальные дыры, локализованные вблизи ядер этих квантовых точек. Эти дыры характеризуются стохастическим поведением поля деформации. Вдали от области локализации ядер наблюдается волновое поведение с регулярной структурой эллиптического типа. По мере приближения к ядру эта регулярная структура изменяется – появляются особенности типа перегибов, разрывов, сужений, дополнительная тонкая структура.

Для пар квантовых точек с противоположной ориентацией (ФКТ1, ФКТ2) и (ФКТ4, ФКТ3) наблюдаются пики (рис. 1 г, д и рис. 1 к, л), локализованные вблизи ФКТ1, ФКТ2 и ФКТ4, ФКТ3. В сечениях (рис. 1 е и рис. 1 м) также наблюдаются две фрактальные дыры, локализованные вблизи ядер этих квантовых точек. Однако, вблизи ядер наблюдается характерный эффект сдвига волнового поведения (по сравнению с рис. 1 в, рис. 1 и), появляются особенности типа ям, ступенек, седла.

Перестановки операторов полей смещений отдельных квантовых точек со сдвинутыми центрами тяжести в парах, например, (ФКТ1, ФКТ3), (ФКТ3, ФКТ1) приводят к отклонению $\delta u_2 = (u_{R1} + u_{R3}) - (u_{R3} + u_{R1})$ поля деформации связанной фрактальной структуры в пределах 10^{-10}.

Для пар из квантовых точек с одинаковыми центрами тяжести (ФКТ1, ФКТ4), (ФКТ2, ФКТ3) поля смещений u_2 тождественно равны нулю, что следует из результатов моделирования итерационных процессов. Таким образом, паре (ФКТ1, ФКТ4) соответствует упорядоченный нулевой оператор $u_2 = 0 = u_{R1} + u_{R4}$; паре (ФКТ2, ФКТ3) – нулевой оператор $u_2 = 0 = u_{R2} + u_{R3}$.

Возможность использования таких нулевых операторов на основе пар (ФКТ2, ФКТ3) и (ФКТ1, ФКТ4) позволяет восстановить информацию об отдельных ФКТ1, ФКТ4, ФКТ2, ФКТ3 на основе информации из троек квантовых точек (ФКТ2, ФКТ3, ФКТ1), (ФКТ2, ФКТ3, ФКТ4), (ФКТ1, ФКТ4, ФКТ2), (ФКТ1, ФКТ4, ФКТ3), соответственно (рис. 2).

При этом в выражениях (2) тройке (ФКТ2, ФКТ3, ФКТ1) соответствует упорядоченный оператор $u_2 = u_{R2} + u_{R3} + u_{R1} = u_{R1}$; тройке (ФКТ2, ФКТ3, ФКТ4) –

оператор $u_2 = u_{R2} + u_{R3} + u_{R4} = u_{R4}$; тройке (ФКТ1, ФКТ4, ФКТ2) – оператор $u_2 = u_{R1} + u_{R4} + u_{R2} = u_{R2}$; тройке (ФКТ1, ФКТ4, ФКТ3) – $u_2 = u_{R1} + u_{R4} + u_{R3} = u_{R3}$.

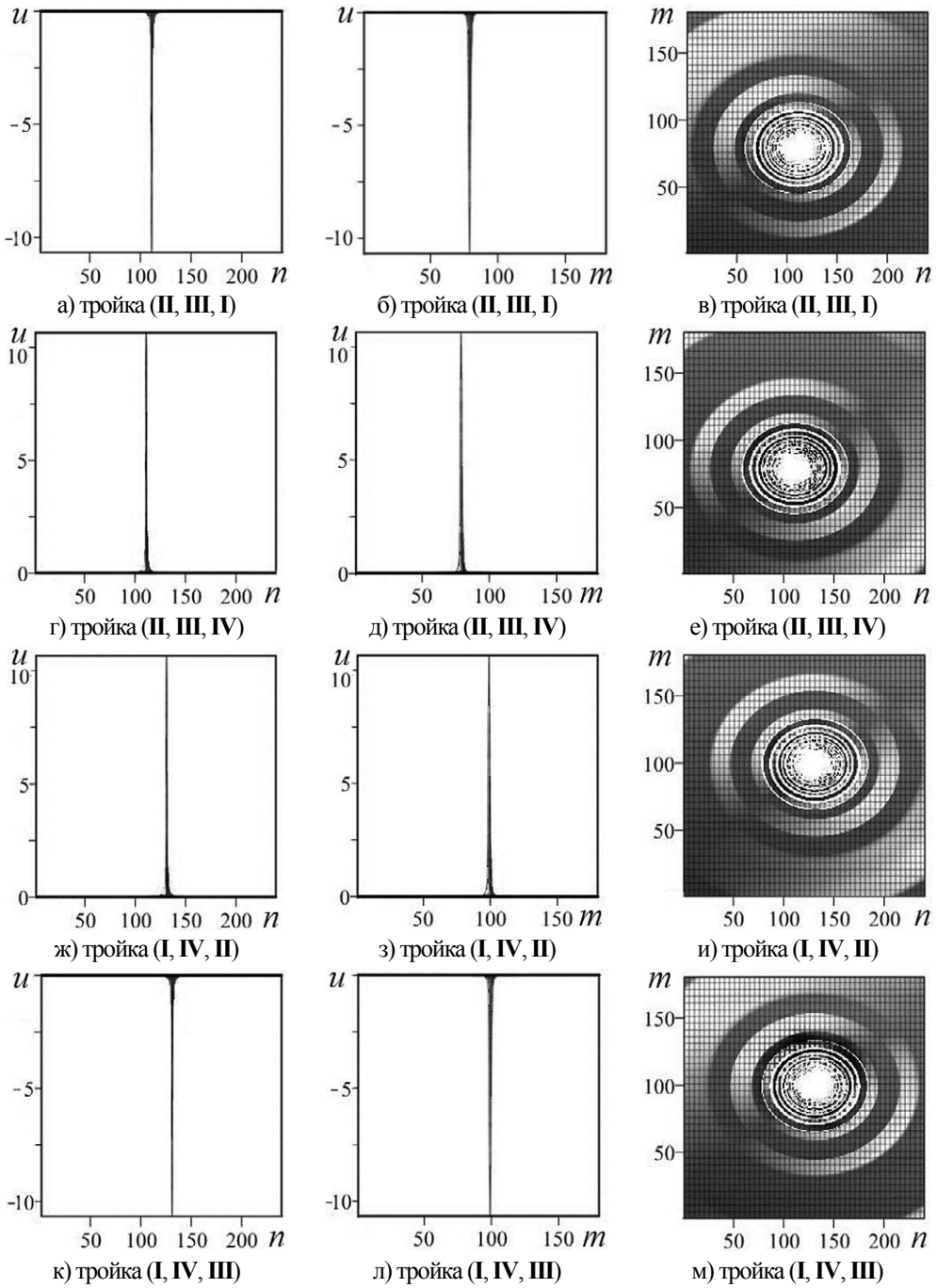


Рис. 2. Поведение функции смещения $u = u_2 \cdot 10^{-2}$ для различных троек квантовых точек: (а, г, ж, к) – проекции на плоскость nOu; (б, д, з, л) – проекции на плоскость mOu; (в, е, и, м) – сечения $u_2 \in [-0.1; 0.1]$ (вид сверху).

Положение пиков и амплитуд (рис. 2 а, б), (рис. 2 г, д), (рис. 2 ж, з), (рис. 2 к, л) соответствуют положению пиков и амплитуд отдельных ФКТ1, ФКТ4, ФКТ2, ФКТ3.

Структура ядер (рис. 2 в), (рис. 2 е), (рис. 2 и), (рис. 2 м) полностью совпадает со структурой ядер отдельных ФКТ1, ФКТ4, ФКТ2, ФКТ3.

Далее рассмотрим связанную фрактальную структуру, состоящую из четырех отдельных ФКТ1, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ4 (рис. 3).

Так, например, последовательности (ФКТ1, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ4) (рис. 3 а-г) соответствует упорядоченный оператор $u_2 = u_{R1} + u_{R2} + u_{R3} + u_{R4}$; последовательности (ФКТ1, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ4) (рис. 3 д) – оператор $u_2 = u_{R1} + u_{R3} + u_{R2} + u_{R4}$; последовательности (ФКТ3, ФКТ4, ФКТ1, ФКТ2) (рис. 3 е) – оператор $u_2 = u_{R3} + u_{R4} + u_{R1} + u_{R2}$.

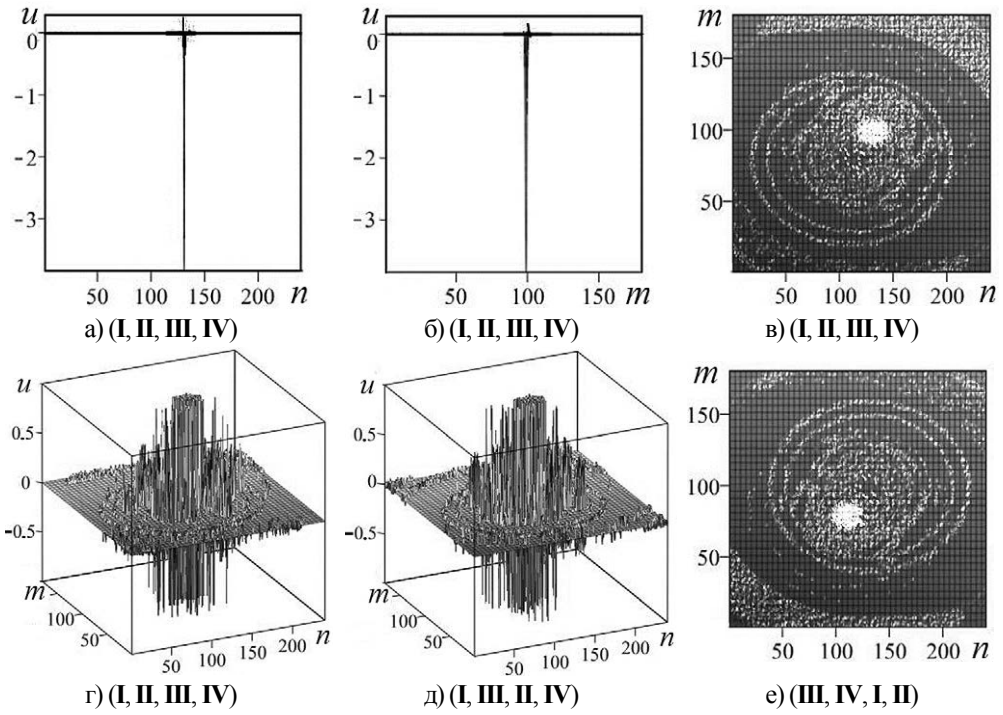


Рис. 3. Поведение функции смещения для последовательностей (ФКТ1, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ4) – (а-г); (ФКТ1, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ4) – (д); (ФКТ3, ФКТ4, ФКТ1, ФКТ2) – (е): (а, б) – проекции $u = u_2 \cdot 10^7$ на плоскости nOu, mOu; сечения (г, д) $u = u_2 \cdot 10^{10} \in [-1;1]$; (в, е) $u = u_2 \in [-10^{-10};10^{-10}]$ (вид сверху).

Для последовательности (ФКТ1, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ4) вблизи ФКТ3 наблюдается пик вниз существенно малой амплитуды (рис. 3 а, б) по сравнению с амплитудой самой ФКТ3. Поведение поля деформации вблизи ядра (рис.3 в) связанной структуры существенно отличается от поведения ядра самой ФКТ3 (рис. 2 м). Возникает стохастическое волновое поведение. Вместо регулярных колец появляются стохастические кольца – эллиптические фрактальные дислокации, наблюдается эффект анизотропии.

Перестановка порядка следования отдельных внутренних операторов итерационного процесса (2) u_{R2} и u_{R3} в последовательности (ФКТ1, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ4) приводит к последовательности (ФКТ1, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ4) (рис. 3 д). При этом все основные особенности регулярного поведения поля деформации связанной структуры сохраняются, однако стохастическое поведение вблизи ядра изменяется (рис. 3 д) по сравнению с рис. 3 г.

Перестановка порядка следования пар операторов итерационного процесса (2) $(u_{R1}+u_{R2})$ и $(u_{R3}+u_{R4})$ в последовательности (ФКТ1, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ4) приводит к последовательности (ФКТ3, ФКТ4, ФКТ1, ФКТ2) (рис. 3 е). При этом пик вниз наблюдается вблизи ФКТ1, направление анизотропии меняется на противоположное (рис. 3 е) по сравнению с рис. 3 в. Такая операция перестановки пар операторов позволяет переносить информацию (например, о направлении пика вниз) из ФКТ3 в ФКТ1.

Для другой связанной фрактальной структуры, состоящей из четырех отдельных ФКТ4, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ1 поведение поля деформации дано на рис. 4.

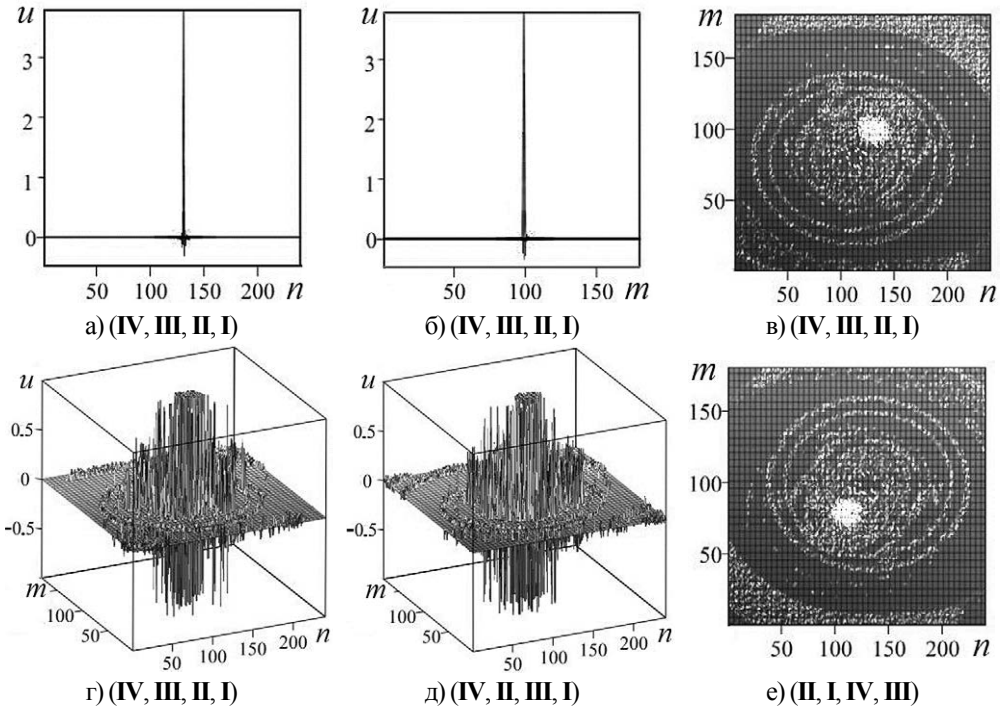


Рис. 4. Поведение функции смещения для последовательностей (ФКТ4, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ1) – (а-г); (ФКТ4, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ1) – (д); (ФКТ2, ФКТ1, ФКТ4, ФКТ3) – (е): (а, б) – проекции $u = u_2 \cdot 10^7$ на плоскости nOu , mOu ; сечения (г, д) $u = u_2 \cdot 10^{10} \in [-1;1]$; (в, е) $u = u_2 \in [-10^{-10};10^{-10}]$ (вид сверху).

При этом, последовательности (ФКТ4, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ1) (рис. 4 а-г) соответствует упорядоченный оператор $u_2 = u_{R4} + u_{R3} + u_{R2} + u_{R1}$; последовательности (ФКТ4, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ1) (рис. 4 д) – оператор $u_2 = u_{R4} + u_{R2} + u_{R3} + u_{R1}$; последовательности (ФКТ2, ФКТ1, ФКТ4, ФКТ3) (рис. 4 е) – оператор $u_2 = u_{R2} + u_{R1} + u_{R4} + u_{R3}$.

Для последовательности (ФКТ4, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ1) вблизи ФКТ2 наблюдается пик вверх существенно малой амплитуды (рис. 4 а, б) по сравнению с амплитудой самой ФКТ2. Поведение поля деформации вблизи ядра (рис.4 в) связанной структуры существенно отличается от поведения ядра самой ФКТ2 (рис. 2 и): возникает стохастическое волновое поведение (вместо регулярных колец появляются стохастические кольца – эллиптические фрактальные дислокации, наблюдается эффект анизотропии).

Перестановка порядка следования отдельных внутренних операторов итерационного процесса (2) u_{R3} и u_{R2} в последовательности (ФКТ4, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ1) приводит к последовательности (ФКТ4, ФКТ2, ФКТ3, ФКТ1 (рис. 4 д). При этом все основные особенности регулярного поведения поля деформации связанной структуры сохраняются, однако стохастическое поведение вблизи ядра изменяется (рис. 4 д) по сравнению с рис. 4 г.

Перестановка порядка следования пар операторов итерационного процесса (2) $(u_{R4}+u_{R3})$ и $(u_{R2}+u_{R1})$ в последовательности (ФКТ4, ФКТ3, ФКТ2, ФКТ1) приводит к последовательности (ФКТ2, ФКТ1, ФКТ4, ФКТ3) (рис. 4 е). При этом пик вверх наблюдается вблизи ФКТ4, направление анизотропии меняется на противоположное (рис. 4 е) по сравнению с рис. 4 в. Операция перестановки пар операторов позволяет переносить информацию (например, о направлении пика вверх) из ФКТ2 в ФКТ4.

Взаимная перестановка пар с нулевыми операторами $(u_{R1}+u_{R4})$, $(u_{R2}+u_{R3})$, например, в последовательностях (ФКТ1, ФКТ4, ФКТ2, ФКТ3), (ФКТ2, ФКТ3, ФКТ1, ФКТ4) из четырех квантовых точек также приводит к нулевым операторам

$$u_2 = 0 = (u_{R1}+u_{R4})+(u_{R2}+u_{R3}) = (u_{R2}+u_{R3})+(u_{R1}+u_{R4}). \qquad (5)$$

При этом поле деформации для такой связанной фрактальной структуры тождественно равно нулю.

Связанная фрактальная структура: квантовые точки и эллиптические цилиндры. С целью дальнейшего изучения влияния упорядочения операторов полей смещений рассмотрим связанную фрактальную структуру, состоящую из двух фрактальных квантовых точек ФКТ1, ФКТ2 (i=1,2) и двух фрактальных эллиптических цилиндров ФЭЦ3, ФЭЦ4 (i=3,4). Квантовые точки имеют мнимые аттракторы, а эллиптические цилиндры – реальные аттракторы [4, 5].

Нелинейные уравнения для безразмерной функции смещения такой связанной структуры $u = u_2$ имеют вид аналогичный уравнениям (2)–(4), однако параметры структур другие.

Квантовые точки ФКТ1 ($R_1 = -1$) и ФКТ2 ($R_2 = 1$) с противоположной ориентацией полей деформации имеют одинаковые основные параметры: α_i=0.5, u_{0i}=29.537, p_{0i}=$-3.457\cdot 10^{-11}$, b_{1i}=b_{2i}=1, n_{ci}=24.4793, m_{ci}=15.7295, $n_{0i} = 111.1471$, $m_{0i} = 79.3267$. Квантовые точки ФЭЦ3 ($R_3 = 1$) и ФЭЦ4 ($R_4 = -1$) также с противоположной ориентацией полей деформации тоже имеют одинаковые основные параметры: α_i=0.5, u_{0i}=29.537, p_{0i}=1.0423, b_{1i}=b_{2i}=1, b_{3i}=0, n_{ci}=57.4327, m_{ci}=35.2153, $n_{0i} = 121.1471$, $m_{0i} = 89.3267$.

Поля смещений для отдельных пар квантовых точек (ФКТ1, ФКТ2) и (ФКТ2, ФКТ1) тождественно равны нулю, что следует из результатов моделирования итерационных процессов. Таким образом, паре (ФКТ1, ФКТ2) соответствует упорядоченный нулевой оператор $u_2 = 0 = u_{R1}+u_{R2}$, а паре (ФКТ2, ФКТ1) соответствует нулевой оператор $u_2 = 0 = u_{R2}+u_{R1}$.

Поведение поля деформации отдельного эллиптического цилиндра ФЭЦ3 ($R_3 = 1$), которое описывается оператором u_{R3}, дано на рис. 5. В этом случае ФКТ1, ФКТ2, ФЭЦ4 отсутствуют, $R_1 = R_2 = R_4 = 0$.

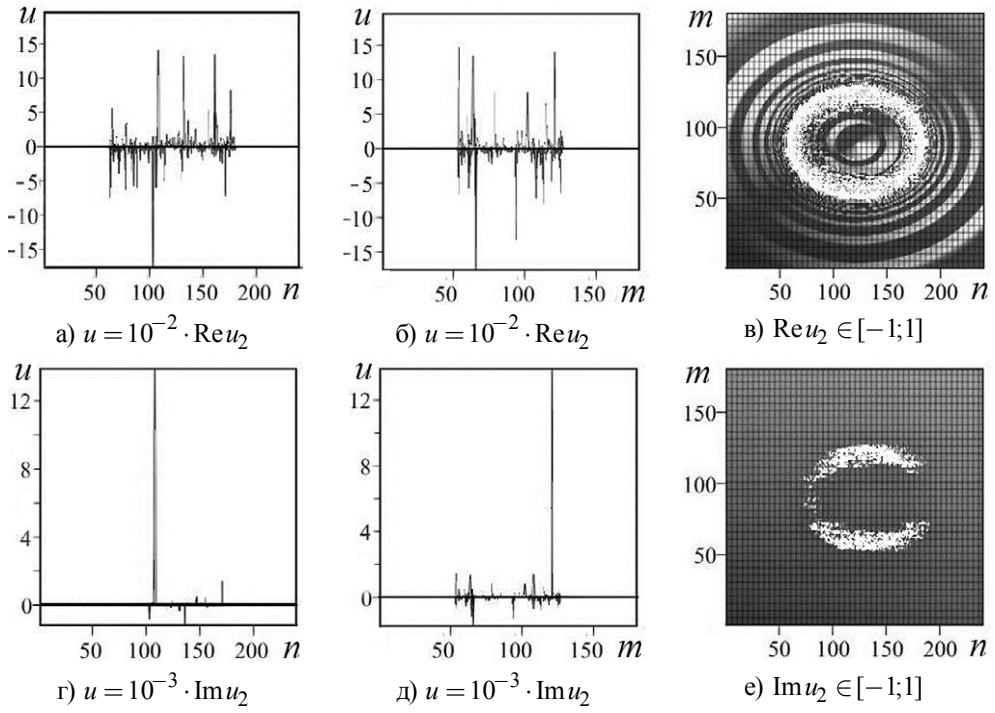


Рис. 5. Поведение функции смещения ФЭЦ3: (а, б, г, д) проекции на плоскости nOu, mOu; (в, е) сечения (вид сверху).

В отличие от полей смещений ФКТ (рис. 1–4) поле деформации ФЭЦ3 является комплексным. Для $\mathrm{Re}\, u_2 = \mathrm{Re}\, u_{R3}$ характерно стохастическое поведение границы ядра (рис. 5 а, б, в), внутри и вне ядра наблюдается волновое поведение (рис. 5 в), что связано с наличием переменного модуля k_{u3} в нелинейных уравнениях (2)–(4). Амплитуды отдельных пиков на зависимостях $\mathrm{Im}\, u_2 = \mathrm{Im}\, u_{R3}$ от n, m (рис. 5 г, д) на порядок больше амплитуд пиков $\mathrm{Re}\, u_2 = \mathrm{Re}\, u_{R3}$ (рис. 5 а, б). Эффективное затухание ($\mathrm{Im}\, u_2 = \mathrm{Im}\, u_{R3}$) локализовано в области стохастической границы ядра (рис. 5 е).

Поля смещений для отдельных пар из эллиптических цилиндров (ФЭЦ3, ФЭЦ4) и (ФЭЦ4, ФЭЦ3) тождественно равны нулю, что также следует из результатов моделирования итерационных процессов. Таким образом, паре (ФЭЦ3, ФЭЦ4) соответствует комплексный упорядоченный нулевой оператор $u_2 = 0 = u_{R3} + u_{R4}$, а паре (ФЭЦ4, ФЭЦ3) соответствует комплексный нулевой оператор $u_2 = 0 = u_{R4} + u_{R3}$. При этом для этих нулевых операторов выполняются условия $\mathrm{Re}\, u_2 = 0$ и $\mathrm{Im}\, u_2 = 0$. Структура этих комплексных нулевых операторов отличается от структуры нулевых операторов для квантовых точек.

Возможность использования нулевых операторов на основе пар (ФЭЦ3, ФЭЦ4) и (ФЭЦ4, ФЭЦ3) позволяет восстановить информацию об отдельных ФЭЦ на основе информации о структурах из трех ФЭЦ, например (ФЭЦ3, ФЭЦ4, ФЭЦ3). При этом извлекается информация как о $\mathrm{Re}\, u_2$, так и о $\mathrm{Im}\, u_2$ ФЭЦ3, строго совпадающая с рис. 5. В этом случае для структуры (ФЭЦ3, ФЭЦ4, ФЭЦ3) упорядоченный оператор имеет вид $u_2 = u_{R3} + u_{R4} + u_{R3} = u_{R3}$.

Однако использование нулевых операторов на основе пар квантовых точек,

например (ФКТ1, ФКТ2), не позволяет полностью восстановить информацию об отдельном ФЭЦ3 на основе информации о структуре из трех элементов (ФКТ1, ФКТ2, ФЭЦ3). Для структуры (ФКТ1, ФКТ2, ФЭЦ3) упорядоченный оператор имеет вид $u_2 = u_{R1} + u_{R2} + u_{R3}$.

На рис. 6 показано поведение разности функций смещения $\delta u_2 = (u_{R1} + u_{R2} + u_{R3}) - u_{R3}$ от индексов (n, m) узлов решетки. При этом $\mathrm{Re}\,\delta u_2 \neq 0$ и $\mathrm{Im}\,\delta u_2 \neq 0$, что объясняется явлением перепутывания собственных значений у оператора $u_2 \neq u_{R3}$. Аналогичные выводы получены для других структур из трех элементов: (ФКТ2, ФКТ1, ФЭЦ3), (ФЭЦ3, ФКТ1, ФКТ2), (ФЭЦ3, ФКТ2, ФКТ1).

Для структур (ФКТ1, ФЭЦ3, ФКТ2) и (ФКТ2, ФЭЦ3, ФКТ1) поля деформации также не совпадают. Тип упорядочения фрактальных точек влияет на поведение функций смещения связанных фрактальных структур.

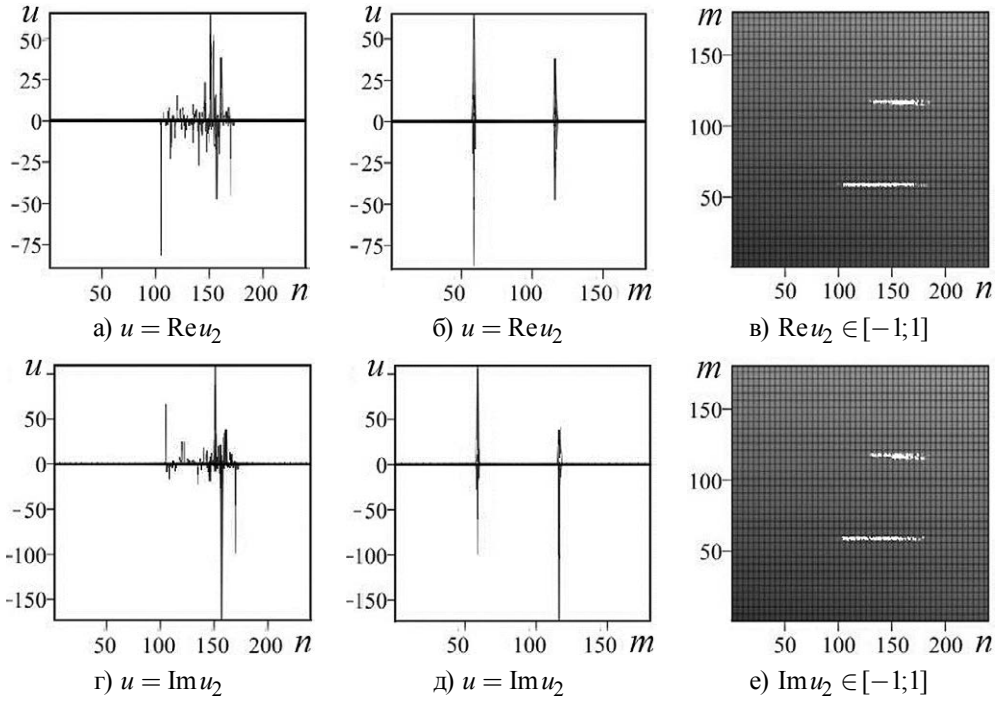


Рис. 6. Поведение разности функций смещения δu_2 : (а, б, г, д) проекции на плоскости nOu , mOu ; (в, е) сечения (вид сверху).

Выводы. Для отдельных пар ФКТ (суперпозиции двух ФКТ со сдвинутыми центрами тяжести) и отдельного ФЭЦ исследовано поведение поля деформации. Поле деформации пар ФКТ является действительным. Вблизи ядер ФКТ наблюдаются две фрактальные дыры, вдали – волновое поведение с регулярной структурой эллиптического типа. При приближении к ядру регулярная структура изменяется: появляются особенности типа перегибов, разрывов, сужений, ямы, ступени, седла.

Поле деформации ФЭЦ является комплексным: для $\mathrm{Re}\,u_2$ характерно стохастическое поведение границы ядра, внутри и вне ядра наблюдается волновое поведение, эффективное затухание ($\mathrm{Im}\,u_2$) локализовано в области стохастической границы ядра.

Стохастическая поверхность поля деформации u_2 связанной фрактальной структуры с числом квантовых точек больше двух существенно зависит от порядка следования отдельных слагаемых u_{Ri}. Это связано с наличием переменных модулей эллиптических функций в нелинейных уравнениях для поля деформации.

На основе пар ФКТ и пар ФЭЦ с одинаковыми центрами тяжести и противоположной ориентацией полей деформации вводятся нулевые операторы. Возможность использования нулевых операторов на основе пар ФКТ (пар ФЭЦ) позволяет восстановить информацию об отдельных ФКТ (ФЭЦ) на основе информации о последовательности из троек ФКТ (ФЭЦ).

Однако использование нулевых операторов на основе пар ФКТ не позволяет полностью восстановить информацию об отдельном ФЭЦ на основе информации о структуре из трех элементов (ФКТ1, ФКТ2, ФЭЦ3). Это объясняется явлением перепутывания собственных значений у оператора $u_{R1} + u_{R2} + u_{R3} \neq u_{R3}$.

Операция перестановки пар операторов в последовательности из четырех квантовых точек позволяет переносить часть информации из одной квантовой точки в другую.

Результаты работы могут быть использованы в квантовых алгоритмах при моделировании явлений квантовой суперпозиции и перепутанности для передачи, обработки, хранения информационных данных, в квантовой механике.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nielsen M. Quantum Computation and Quantum Information / M. Nielsen, I. Chuang. – New York: Cambridge University Press, 2010. – 698 p.
2. Boumeister D. Physics of Quantum Information / D. Boumeister, A. Eckert, A. Zeilinger.– New York: Springer, 2001. – 325 p.
3. Ozhigov Y. Quantum Computers Speed Up Classical with Probability Zero / Y. Ozhigov // Chaos Solitons and Fractals. – 1999. – No 10. – P. 1707–1714.
4. Castelvecchi D. Quantum computers ready to leap out of the lab / D. Castelvecchi // Nature. – 2017. – No 541. – P. 9–10.
5. Омельянчук А.Н. Квантовые когерентные явления в джозефсоновских кубитах. / А.Н. Омельянчук, Е.В. Ильичев, С.Н. Шевченко. – К.: Наукова думка, 2013. – 168 с.
6. Федоров М.Н. Кутриты и кукварты в спонтанном параметрическом рассеянии света, корреляции и перепутывание состояний / М.Н. Федоров, И.А. Волков, Ю.М. Михайлова // ЖЭТФ. – 2012. – Т. 142, вып. 1(7). – С. 20–43.
7. Нелинейности в периодических структурах и метаматериалах / Под ред. Ю.С. Кившаря и Н.Н. Розанова. – М.: Физматлит, 2014. – 384 с.
8. Abramov V.S. Quantum Dots in a Fractal Multilayer System / V.S. Abramov // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2017. – No 81(5). – P. 625–632.
9. Абрамов В. С. Перестройка стохастического состояния поля деформации в модельной многослойной наносистеме / В.С. Абрамов // Вестник Донецк. нац. ун-та. Сер. А: Естеств. науки. – 2014. – №. 2. – С. 81–89.
10. Abramova O.P. Attractors and Deformation Field in the Coupled Fractal Multilayer Nanosystem / O.P. Abramova, A.V. Abramov // CMSIM Journal. – 2017. – No 2. – P. 169–179.
11. Абрамова О.П. Взаимовлияние аттракторов и отдельных стохастических процессов в связанных фрактальных структурах / О.П. Абрамова // Вестник Донецк. нац. ун-та. Сер. А: Естеств. науки. – 2017. – № 1. – С. 50-60.

Поступила в редакцию 27.02.2018 г.

ORDERING OF THE DISPLACEMENT FIELD OPERATORS OF SEPARATE QUANTUM DOTS, ELLIPTICAL CYLINDERS IN COUPLED FRACTAL STRUCTURES

O.P. Abramova

It has been proposed for quantum computations to use the ordered displacement field operators of coupled fractal structures with quantum dots and elliptical cylinders. By the numerical modelling method the behavior of the deformation field of such systems was investigated. It is shown that the resulting deformation field of the structure with a number of quantum dots larger than two essentially depends on the ordering of the displacement fields operators for separate quantum dots. The coupled fractal structure with elliptical cylinders is characterized by the presence of a complex deformation field. Using zero operators for pairs of quantum dots makes it possible to obtain information about separate quantum dots. Transposition of pairs of operators allows us to transfer part of the information from one quantum dot to another.

Keywords: coupled fractal structures, quantum dots, elliptical cylinders, ordering of operators, deformation field, quantum computation, numerical modelling.

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

Abramova Olga Petrovna
Candidate of Physics and Mathematical Sciences,
Docent;
Donetsk National University,
24 University st., Donetsk, 83001

УДК 539.3

ДЕЙСТВИЕ ЛИНЕЙНОГО ПОТОКА ТЕПЛА В ПЬЕЗОПЛАСТИНКАХ С ОТВЕРСТИЯМИ И ТРЕЩИНАМИ

© 2018. ***С.А. Калоеров, Е.С. Глушанков***

Предложен подход определения термоэлектромагнитоупругого состояния многосвязной пьезопластинки с отверстиями при действии линейного потока тепла. Решение задачи строится с помощью комплексных потенциалов задач теплопроводности и термоэлектромагнитоупругости. Обобщенным методом наименьших квадратов задача сведена к решению системы линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов разложений функций в ряды Лорана. Численными исследованиями установлено влияние на значения основных характеристик термоэлектромагнитоупругого состояния учета электрических и магнитных свойств материала, а также геометрических характеристик отверстий.

Ключевые слова: линейный поток тепла, пьезопластинка, температурные напряжения, напряженности и индукции электромагнитного поля, коэффициенты интенсивности напряжений, напряженностей и индукций, обобщенный метод наименьших квадратов.

Введение. В современной промышленности в качестве элементов конструкций широко используются пластинки с отверстиями из пьезоматериалов [1]. Под действием механических сил, электромагнитных и тепловых полей в таких элементах возникают высокие концентрации напряжений, которые необходимо учитывать при проектировании и эксплуатации конструкций. В связи с этим актуальны вопросы разработки методов определения напряженно-деформированного и предельно-равновесного состояния упругих тел из пьезоматериалов. В этом направлении к настоящему времени разработаны многие вопросы теории [2–5], решены задачи для различных воздействий на многосвязные пластинки механических сил и электромагнитных полей. Рассмотрены также случаи температурных полей, возникающих от разности температур на контурах пластинки [6]. В работе [7] для решения задач в случае действия на многосвязную пластинку линейного потока тепла предложен метод суперпозиции, заключающийся в нахождении общего решения как суммы решений для сплошной пластинки под действием линейного потока и возбужденного поля за счет наличия в пластинке отверстий, а в статье [8] этим подходом и удовлетворением граничным условиям методом рядов решена задача для пластинки с одним эллиптическим отверстием или трещиной.

В данной статье метод суперпозиции распространен на случай многосвязной пьезопластинки. При этом определение неизвестных коэффициентов разложений функций в ряды Лорана обобщенным методом наименьших квадратов (ОМНК) сведено к решению переопределенных систем линейных алгебраических уравнений.

1. Постановка задачи. Рассматривается находящаяся в условиях плоской задачи бесконечная пьезопластинка, занимающая многосвязную область S, ограниченную контурами эллиптических отверстий L_l ($l=\overline{1,\mathcal{L}}$) (рис. 1). Контуры L_l располагаются произвольно относительно друг друга, они могут касаться, пересекаться, переходить в прямолинейные разрезы. В случае наличия произвольных

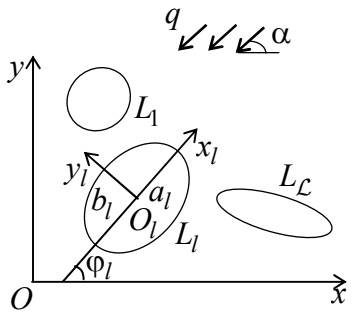


Рис. 1

криволинейных отверстий их контуры можно аппроксимировать совокупностями дуг эллипсов и берегов прямолинейных разрезов. На контурах пластинки заданы значения температуры или потока тепла через их контуры в область, они свободны от усилий или жестко подкреплены, на них равны нулю нормальные составляющие векторов индукций электрического и магнитного полей. На бесконечности напряжения, компоненты векторов индукции электрического и магнитного полей равны нулю ($\sigma_x^\infty = \sigma_y^\infty = \tau_{xy}^\infty = D_x^\infty = D_y^\infty = B_x^\infty = B_y^\infty = 0$), действует линейный поток тепла плотности q, направленный под углом α к оси Ox так, что в сплошной пластинке потоки тепла на основных площадках равны

$$q_x^* = -q\cos\alpha, \quad q_y^* = -q\sin\alpha, \tag{1.1}$$

а на произвольной площадке с нормалью $\vec{n}$

$$q_n^* = q_x^*\cos nx + q_y^*\cos ny. \tag{1.2}$$

Если несвязанную задачу о термоэлектромагнитоупругом состоянии пластинки решать методом суперпозиции с использованием комплексных потенциалов, то она сводится к определению комплексного потенциала теплопроводности $F_5(z_5)$ и комплексных потенциалов термоэлектромагнитоупругости $\Phi_k(z_k)$ $\left(k=\overline{1,4}\right)$ из соответствующих граничных условий. Если эти функции определены, то основные характеристики термоэлектромагнитоупругого состояния (ТЭМУС) (температура, плотности потоков тепла, напряжения, индукции и напряженности поля, перемещения и потенциалы поля) вычисляются по формулам [6, 7]

$$T(x,y) = T^*(x,y) + 2\operatorname{Re}F_5(z_5); \tag{1.3}$$

$$\left(\sigma_x, \sigma_y, \tau_{xy}\right) = 2\operatorname{Re}\sum_{k=1}^{5}\left(\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \lambda_{6k}\right)\Phi_k'\left(z_k\right),$$

$$\left(D_x, D_y, B_x, B_y\right) = 2\operatorname{Re}\sum_{k=1}^{5}\left(\lambda_{7k}, \lambda_{8k}, \lambda_{9k}, \lambda_{10k}\right)\Phi_k'\left(z_k\right),$$

$$\left(E_x, E_y, H_x, H_y\right) = \left(E_x^*, E_y^*, H_x^*, H_y^*\right) - 2\operatorname{Re}\sum_{k=1}^{5}\left(r_k^0, \mu_k r_k^0, h_k^0, \mu_k h_k^0\right)\Phi_k'\left(z_k\right), \tag{1.4}$$

$$\left(u, v, \varphi, \psi\right) = \left(u^*, v^*, \varphi^*, \psi^*\right) + 2\operatorname{Re}\sum_{k=1}^{5}\left(p_k, q_k, r_k^0, h_k^0\right)\Phi_k\left(z_k\right), \tag{1.5}$$

в которых μ_5 и μ_k $\left(k=\overline{1,4}\right)$ – корни соответственно характеристических уравнений теплопроводности и электромагнитоупругости

$$k_{22}\mu^2 + 2k_{12}\mu + k_{11} = 0; \tag{1.6}$$

$$\Delta(\mu) = 0; \tag{1.7}$$

$$\Delta(\mu) = l_{4s}(\mu)\left[l_{2\beta}(\mu)l_{2\chi}(\mu) - l_{2\nu}^2(\mu)\right] - l_{3g}(\mu)\left[l_{3g}(\mu)l_{2\chi}(\mu) - l_{3p}(\mu)l_{2\nu}(\mu)\right] -$$
$$-l_{3p}(\mu)\left[l_{3p}(\mu)l_{2\beta}(\mu) - l_{3g}(\mu)l_{2\nu}(\mu)\right],$$

$$l_{4s}(\mu) = s_{11}\mu^4 - 2s_{16}\mu^3 + \left(2s_{12} + s_{66}\right)\mu^2 - 2s_{26}\mu + s_{22},$$

$$l_{3g}(\mu) = g_{11}\mu^3 - \left(g_{21} + g_{16}\right)\mu^2 + \left(g_{12} + g_{26}\right)\mu - g_{22},$$

$$l_{3p}(\mu)=p_{11}\mu^3-(p_{21}+p_{16})\mu^2+(p_{12}+p_{26})\mu-p_{22},$$

$$l_{2\beta}(\mu)=-\beta_{11}\mu^2+2\beta_{12}\mu-\beta_{22},\quad l_{2\nu}(\mu)=-\nu_{11}\mu^2+2\nu_{12}\mu-\nu_{22},$$

$$l_{2\chi}(\mu)=-\chi_{11}\mu^2+2\chi_{12}\mu-\chi_{22}; \tag{1.8}$$

$$T^*(x,\ y)=(t_x x+t_y\ y)q; \tag{1.9}$$

$$t_x=\frac{k_{22}\cos\alpha-k_{12}\sin\alpha}{æ_T^2},\quad t_y=\frac{k_{11}\sin\alpha-k_{12}\cos\alpha}{æ_T^2},\quad æ_T=\sqrt{k_{11}k_{22}-k_{12}^2}; \tag{1.10}$$

$$\lambda_{1k}=\mu_k^2,\quad \lambda_{2k}=1,\quad \lambda_{6k}=-\mu_k,\quad \lambda_{7k}=\nu_k\mu_k,$$

$$\lambda_{8k}=-\nu_k,\ \lambda_{9k}=\rho_k\mu_k,\ \lambda_{10k}=-\rho_k; \tag{1.11}$$

$$\nu_k=\frac{l_{3p}(\mu_k)l_{2\nu}(\mu_k)-l_{3g}(\mu_k)l_{2\chi}(\mu_k)}{l_{2\beta}(\mu_k)l_{2\chi}(\mu_k)-l_{2\nu}^2(\mu_k)}\ \left(k=\overline{1,\ 4}\right),\quad \nu_5=\frac{r_\chi}{r_5},$$

$$\rho_k=\frac{l_{3g}(\mu_k)l_{2\nu}(\mu_k)-l_{2\beta}(\mu_k)l_{3p}(\mu_k)}{l_{2\beta}(\mu_k)l_{2\chi}(\mu_k)-l_{2\nu}^2(\mu_k)}\ \left(k=\overline{1,\ 4}\right),\quad \rho_5=\frac{r_\omega}{r_5}; \tag{1.12}$$

$$r_5=\frac{l_5(\mu_5)}{\Delta(\mu_5)},\quad r_\chi=\frac{l_\chi(\mu_5)}{\Delta(\mu_5)},\quad r_\omega=\frac{l_\omega(\mu_5)}{\Delta(\mu_5)},$$

$$l_5(\mu_5)=\begin{vmatrix} l_{2\alpha}(\mu_5) & l_{3g}(\mu_5) & l_{3p}(\mu_5)\\ l_{1t}(\mu_5) & l_{2\beta}(\mu_5) & l_{2\nu}(\mu_5)\\ l_{1m}(\mu_5) & l_{2\nu}(\mu_5) & l_{2\chi}(\mu_5)\end{vmatrix},\quad l_\chi(\mu_5)=\begin{vmatrix} l_{4s}(\mu_5) & l_{2\alpha}(\mu_5) & l_{3p}(\mu_5)\\ l_{3g}(\mu_5) & l_{1t}(\mu_5) & l_{2\nu}(\mu_5)\\ l_{3p}(\mu_5) & l_{1m}(\mu_5) & l_{2\chi}(\mu_5)\end{vmatrix},$$

$$l_\omega(\mu_5)=\begin{vmatrix} l_{4s}(\mu_5) & l_{3g}(\mu_5) & l_{2\alpha}(\mu_5)\\ l_{3g}(\mu_5) & l_{2\beta}(\mu_5) & l_{1t}(\mu_5)\\ l_{3p}(\mu_5) & l_{2\nu}(\mu_5) & l_{1m}(\mu_5)\end{vmatrix},$$

$$l_{2\alpha}(\mu_5)=-\alpha_1\mu_5^2+\alpha_6\mu_5-\alpha_2,\quad l_{1t}(\mu_5)=t_1^\sigma\mu_5-t_2^\sigma,\quad l_{1m}(\mu_5)=m_1^\sigma\mu_5-m_2^\sigma,$$

$$r_k^0=g_{11}\mu_k^2-g_{16}\mu_k+g_{12}-(\beta_{11}\mu_k-\beta_{12})\nu_k-(\nu_{11}\mu_k-\nu_{12})\rho_k+\delta_k^5 t_1^\sigma/r_5,$$

$$h_k^0=p_{11}\mu_k^2-p_{16}\mu_k+p_{12}-(\nu_{11}\mu_k-\nu_{12})\nu_k-(\chi_{11}\mu_k-\chi_{12})\rho_k+\delta_k^5 m_1^\sigma/r_5,$$

$$p_k=s_{11}\mu_k^2-s_{16}\mu_k+s_{12}+(g_{11}\mu_k-g_{21})\nu_k+(p_{11}\mu_k-p_{21})\rho_k+\delta_k^5\alpha_1/r_5,$$

$$q_k=s_{12}\mu_k-s_{26}+\frac{s_{22}}{\mu_k}+\left(g_{12}-\frac{g_{22}}{\mu_k}\right)\nu_k+\left(p_{12}-\frac{p_{22}}{\mu_k}\right)\rho_k+\frac{\delta_k^5\alpha_2}{r_5\mu_5}; \tag{1.13}$$

$$\left(E_x^*,E_y^*,H_x^*,H_y^*\right)=\left(t_1^\sigma,t_2^\sigma,m_1^\sigma,m_2^\sigma\right)T^*(x,y),$$

$$u^*(x,y)=\frac{\alpha_1 q t_x}{2}x^2-\frac{(\alpha_2 t_x-\alpha_6 t_y)q}{2}y^2+\alpha_1 q t_y\,xy-\omega y+u_0,$$

$$v^*(x,y)=\frac{\alpha_2 q t_y}{2}y^2-\frac{(\alpha_1 t_y-\alpha_6 t_x)q}{2}x^2+\alpha_2 q t_x\,xy+\omega x+v_0,$$

$$\varphi^*(x,\ y)=-\frac{1}{2}t_1^\sigma q t_x x^2-\frac{1}{2}t_2^\sigma q t_y y^2-t_1^\sigma q t_x xy+\varphi_0,$$

$$\psi^*(x,\ y) = -\frac{1}{2}m_1^\sigma q t_x x^2 - \frac{1}{2}m_2^\sigma q t_y y^2 - m_1^\sigma q t_x xy + \psi_0\,; \tag{1.14}$$

$$\Phi_5(z_5) = r_5 \int F_5(z_5) dz_5\ ; \tag{1.15}$$

k_{ij} – коэффициенты теплопроводности материала пластинки; s_{ij} – коэффициенты деформации материала, измеренные при постоянных индукциях электрического и магнитного полей и температуре; g_{ij} и p_{ij} – пьезоэлектрические и пьезомагнитные коэффициенты деформаций и напряженностей, измеренные при постоянных напряжениях, индукциях и температуре; β_{ij}, χ_{ij} и ν_{ij} – коэффициенты диэлектрической, магнитной и электромагнитной восприимчивости, измеренные при постоянных напряжениях и температуре; α_i – коэффициенты теплового расширения, измеренные при постоянной индукции электромагнитного поля; t_i^σ и m_i^σ – пироэлектрические и пиромагнитные модули, измеренные при постоянных напряжениях; δ_j^i – символ Кронекера; $-\omega y + u_0$, $\omega x + v_0$ – жесткие перемещения пластинки, возникающие в сплошной пластинке под действием потока тепла, ω – угол поворота плоскости Oxy против часовой стрелки, u_0, v_0 – компоненты поступательного перемещения; причем эти величины можно принять равными нулю; φ_0 и ψ_0 – нулевой уровень потенциалов электрического и магнитного полей.

Функции $F_5(z_5)$ и $\Phi_k(z_k)$ определены в многосвязных областях S_5 и S_k, получаемых из заданной области S аффинными преобразованиями

$$z_k = x + \mu_k y\,. \tag{1.16}$$

В общем случае многосвязной области функция $F_5(z_5)$ имеет вид [9]

$$F_5(z_5) = c_5 + \sum_{l=1}^{\mathcal{L}} D_l \ln(z_5 - z_{5l}) + F_{50}(z_5)\,, \tag{1.17}$$

где c_5 – вещественная константа, определяемая из условий на контурах отверстий;

$$D_l = -\frac{q_l}{4\pi æ_T}\,; \tag{1.18}$$

q_l – суммарный поток тепла через контур L_l в область S; z_{5l} – точки, соответствующие при аффинном преобразовании (1.16) произвольным точкам внутри контуров L_l; $F_{50}(z_5)$ – функция, голоморфная в многосвязной области S_5. При этом из условий ограниченности $F_5(z_5)$ на бесконечности следует, что

$$\sum_{l=1}^{\mathcal{L}} D_l = 0\,. \tag{1.19}$$

Комплексные потенциалы $\Phi_k(z_k)$ $\left(k = \overline{1,5}\right)$ в общем случае имеют вид [6]

$$\Phi_k(z_k) = \Gamma_k z_k + \sum_{l=1}^{\mathcal{L}} \left(A_{kl} z_k + B_{kl}\right) \ln(z_k - z_{kl}) + \Phi_{k0}(z_k)\,, \tag{1.20}$$

где Γ_k, A_{kl}, B_{kl} $\left(k = \overline{1,4}\right)$ – постоянные, определяемые из систем уравнений

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{5}\left(1,\ \mu_k,\ \mu_k^2,\ q_k-\mu_k p_k,\ \nu_k,\ \mu_k\nu_k,\ \rho_k,\ \mu_k\rho_k\right)\Gamma_k=\left(0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0\right); \tag{1.21}$$

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{5}\left(1,\ \mu_k,\ p_k,\ q_k,\ \nu_k,\ \rho_k,\ r_k^0,\ h_k^0\right)i\,A_{kl}=\left(0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0\right); \tag{1.22}$$

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{5}\left(1,\ \mu_k,\ p_k,\ q_k,\ \nu_k,\ \rho_k,\ r_k^0,\ h_k^0\right)i\,B_{kl}=\left(0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0\right); \tag{1.23}$$

$$\Gamma_5=r_5c_5,\quad A_{5l}=r_5D_l,\quad B_{5l}=r_5\left(b_{5l}-z_{5l}D_l\right); \tag{1.24}$$

b_{5l} – вычет функции $F_{50}(z_5)$ в точке z_{5l}; $\Phi_{k0}\left(z_k\right)$ – функции, голоморфные в многосвязных областях S_k.

На контурах L_l области S функция $F_5\left(z_5\right)$ должна удовлетворять граничному условию [9]

$$2\,\mathrm{Re}\,d_{5l}F_5\left(t_5\right)=f_l\left(t\right), \tag{1.25}$$

в котором

$$d_{5l}=1,\quad f_{5l}\left(t\right)=T_l-T^*\left(x,y\right)$$

в случае заданных значений температуры T_l, и

$$d_{5l}=i\,æ_T,\quad f_{5l}\left(t\right)=\int_0^s\left(q_n^*-q_{ln}\left(t\right)\right)ds+c_l$$

в случае задания на L_l плотности потока тепла $q_{ln}\left(t\right)$. На тех же контурах L_l области S, с учетом равенства нулю индукций электромагнитного поля, функции $\Phi_k(z_k)$ $\left(k=\overline{1,4}\right)$ должны удовлетворять граничным условиям [9]

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{5}\left(d_{kl1},\ d_{kl2},\ d_{kl3},\ d_{kl4}\right)\Phi_k\left(t_k\right)=\left(f_{l1},\ f_{l2},f_{l3},\ f_{l4}\right), \tag{1.26}$$

в которых для свободных от усилий контуров

$$\left(d_{kl1},\ d_{kl2},\ d_{kl3},\ d_{kl4}\right)=\left(1,\ \mu_k,\ \nu_k,\ \rho_k\right),$$
$$\left(f_{l1},\ f_{l2},\ f_{l3},\ f_{l4}\right)=\left(c_{l1},\ c_{l2},\ c_{l3},\ c_{l4}\right),$$

для жестко подкрепленных контуров

$$\left(d_{kl1},\ d_{kl2},\ d_{kl3},\ d_{kl4}\right)=\left(p_k,\ q_k,\ \nu_k,\ \rho_k\right),$$
$$\left(f_{l1},\ f_{l2},\ f_{l3},\ f_{l4}\right)=\left(-u^*,\ -v^*,\ c_{l3},\ c_{l4}\right),$$

причем для жестко подкрепленных контуров должны выполняться также условия

$$\sum_{k=1}^{5}\left(\beta_{kl1}-\overline{\beta}_{kl1}\right)=0, \tag{1.27}$$

β_{kl1} – вычеты функций $\Phi_{k0}\left(z_k\right)$ в точках z_{kl}, соответствующих при аффинных преобразованиях (1.16) произвольным точкам внутри контуров L_l.

2. Построение функций и удовлетворение граничным условиям. В локальных системах координат $O_lx_ly_l$ с началами в центрах эллипсов L_l и направлениями осей

вдоль осей эллипсов их параметрические уравнения будут такими:

$$x_l = a_l \cos\theta, \quad y_l = b_l \sin\theta, \tag{2.1}$$

а в основной системе Oxy они имеют вид

$$x = x_{0l} + x_l \cos\varphi_l - y_l \sin\varphi_l, \quad y = y_{0l} + x_l \sin\varphi_l + y_l \cos\varphi_l, \tag{2.2}$$

где φ_l – угол между направлениями осей Ox и $O_l x_l$, отсчитываемый от Ox против часовой стрелки; x_{0l}, y_{0l} – координаты начала координат $O_l x_l y_l$ в основной системе координат Oxy; θ – параметр параметрического задания эллипса, изменяющийся от 0 до 2π.

Отобразим конформно внешность единичного круга $|\zeta_{kl}| \geq 1$ на внешности эллипсов L_{kl}, соответствующих эллипсам L_l при аффинных преобразованиях (1.16):

$$z_k = z_{kl} + R_{kl}\left(\zeta_{kl} + m_{kl}/\zeta_{kl}\right), \tag{2.3}$$

где

$$z_{kl} = x_{0l} + \mu_k y_{0l},$$

$$R_{kl} = \left(a_l\left(\cos\varphi_l + \mu_k \sin\varphi_l\right) + ib_l\left(\sin\varphi_l - \mu_k \cos\varphi_l\right)\right)/2,$$

$$m_{kl} = \left(a_l\left(\cos\varphi_l + \mu_k \sin\varphi_l\right) - ib_l\left(\sin\varphi_l - \mu_k \cos\varphi_l\right)\right)/2R_{kl}.$$

Тогда функции $F_{50}(z_5)$ и $\Phi_{k0}(z_k)$, голоморфные вне контуров отверстий L_{5l} и L_{kl} областей S_5 и S_k в областях переменных ζ_{5l} и ζ_{kl} будут голоморфными вне единичных кругов соответственно $|\zeta_{5l}| \geq 1$ $|\zeta_{kl}| \geq 1$, включая бесконечно удаленную точку, потому их можно разложить в ряды Лорана по отрицательным степеням соответственно ζ_{5l} и ζ_{kl}. Окончательно для функций (1.17) и (1.20) получаем [6]

$$F_5(z_5) = c_5 + \sum_{l=1}^{\mathcal{L}} D_l w_{5l}(z_5) + \sum_{l=1}^{\mathcal{L}} \sum_{n=1}^{\infty} c_{5ln} \varphi_{5ln}(z_5), \tag{2.4}$$

$$\Phi_k(z_k) = N_k(z_k) + \sum_{l=1}^{\mathcal{L}} \sum_{n=1}^{\infty} a_{kln} \varphi_{kln}(z_k), \tag{2.5}$$

где

$$w_{5l}(z_5) = \ln\left(z_5 - z_{5l}\right), \quad \varphi_{kln}(z_k) = \zeta_{kl}^{-n},$$

$$N_k(z_k) = \Gamma_k z_k + \sum_{l=1}^{\mathcal{L}} \left(A_{kl} z_k + B_{kl}\right) \ln\left(z_k - z_{kl}\right).$$

Неизвестные постоянные c_5, D_l, c_{5ln}, a_{kln} будем определять соответственно из граничных условий (1.25) и (1.26). Этим условиям будем удовлетворять обобщенным методом наименьших квадратов (ОМНК). Для этого на контурах L_i выберем систему точек $M_{im}(x_{im}, y_{im})$ $\left(m = \overline{1, M_i}\right)$, в которых удовлетворим граничным условиям соответствующих задач.

В задаче теплопроводности, подставляя функцию (2.4) в граничное условие (1.25), для определения неизвестных постоянных c_5, D_l, c_{5ln} получим систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\left(d_{5i}\varphi_{5ln}\left(t_{5im}\right)c_{5ln}+\overline{d}_{5i}\overline{\varphi_{5ln}\left(t_{5im}\right)}\overline{c}_{5ln}\right)+\sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\left(d_{5i}w_{5l}\left(t_{5im}\right)+\overline{d}_{5i}\overline{w_{5l}\left(t_{5im}\right)}\right)D_l+$$
$$+\left(d_{5i}+\overline{d}_{5i}\right)c_5=f_i\left(t_{im}\right)\quad\left(i=\overline{1,\mathcal{L}};\ m=\overline{1,M_i}\right). \tag{2.6}$$

где $t_{5im}=x_{im}+\mu_5 y_{im}$, $t_{im}=t_{im}\left(x_{im},y_{im}\right)$. Систему (2.6), дополненную уравнением (1.19), будем решать методом сингулярного разложения [10, 11]. После решения этой системы постоянные c_5, D_l, c_{5ln}, а следовательно, комплексный потенциал теплопроводности (2.4) будут известны. По известной функции можно в любой точке найти температуру (1.3), а также плотность потока тепла

$$q_n=q_n^*-2\,\mathrm{Re}\left[i\,æ_T\,\delta_5 F_5'\left(t_5\right)\right]$$

на площадке с нормалью n, где $\delta_5=dz_5/dn$.

В задаче термоэлектромагнитоупругости граничным условиям удобнее удовлетворить в дифференциальной форме, чтобы не заниматься определением функции $\Phi_5(z_5)$ (коэффициентов a_{5ln}) и неизвестных постоянных $c_{l\alpha}$, входящих в граничные условия. Дифференцируя равенства (1.26) по дуге контура s, получим

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{4}d_{kl\alpha}\delta_{k,s}\Phi_k'\left(t_k\right)=\frac{df_{l\alpha}}{ds}-2\,\mathrm{Re}\,d_{5l\alpha}\delta_{5,s}r_5F_5\left(t_5\right), \tag{2.7}$$

где

$$\Phi_k'\left(z_k\right)=N_k'\left(z_k\right)+\sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}a_{kln}\varphi_{kln}'(z_k)\ , \tag{2.8}$$

$$N_k'\left(z_k\right)=\Gamma_k+\sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\left[A_{kl}\ln\left(z_k-z_{kl}\right)+\frac{A_{kl}z_k+B_{kl}}{z_k-z_{kl}}\right],$$

$$\varphi_{kln}'\left(z_k\right)=-\frac{n}{R_{kl}\zeta_{kl}^{n-1}\left(\zeta_{kl}^2-m_{kl}\right)}\quad\left(l=\overline{1,\mathcal{L}}\right),$$

$$\delta_{k,s}=dz_k/ds\,.$$

Подставляя в условия (2.7) функции (2.4) и (2.8) для определения неизвестных постоянных a_{kln} найдем следующую систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{k=1}^{4}\sum_{l=1}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\left(d_{ki\alpha}\delta_{k,s}\varphi_{kln}'\left(t_{kim}\right)a_{kln}+\overline{d}_{ki\alpha}\overline{\delta}_{k,s}\overline{\varphi_{kln}'\left(t_{kim}\right)}\overline{a}_{kln}\right)=$$
$$=\frac{df_{i\alpha}\left(t_{im}\right)}{ds}-\sum_{k=1}^{4}\left[d_{ki\alpha}\delta_{k,s}N_k'\left(t_{kim}\right)+\overline{d}_{ki\alpha}\overline{\delta}_{k,s}\overline{N_k'\left(t_{kim}\right)}\right]-$$
$$-\left(d_{5i\alpha}\delta_{5,s}r_5F_5(t_{5im})+\overline{d}_{5i\alpha}\overline{\delta}_{5,s}\overline{r}_5\overline{F_5(t_{5im})}\right)\quad\left(i=\overline{1,\mathcal{L}};\ m=\overline{1,M_i};\ \alpha=\overline{1,4}\right), \tag{2.9}$$

где $t_{kim}=x_{im}+\mu_k y_{im}$. Переход в граничных условиях к дифференциальной форме позволяет убрать в них постоянные слагаемые $c_{i\alpha}$.

После решения с использованием сингулярных разложений системы (2.9), дополненной (в случае жесткого подкрепления контура L_i) уравнением (1.27), станут известными постоянные a_{kln}, а следовательно, комплексные потенциалы (2.5) и по ним можно находить основные характеристики ТЭМУС по формулам (1.4)-(1.5). [6, 7]. Если

эллипс L_l является прямолинейным разрезом ($b_l = 0$), то можно вычислить и КИНИН по формулам [12]

$$k_1^{\pm} = 2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{4}\left(\lambda_{1k}\sin^2\varphi_l + \lambda_{2k}\cos^2\varphi_l - 2\lambda_{6k}\sin\varphi_l\cos\varphi_l\right)M_k^{\pm},$$

$$k_2^{\pm} = 2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{4}\left(\left(\lambda_{2k} - \lambda_{1k}\right)\sin\varphi_l\cos\varphi_l + \lambda_{6k}\left(\cos^2\varphi_l - \sin^2\varphi_l\right)\right)M_k^{\pm},$$

$$k_D^{\pm} = 2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{4}\left(\lambda_{8k}\cos\varphi_l - \lambda_{7k}\sin\varphi_l\right)M_k^{\pm}, \quad k_E^{\pm} = 2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{4}\left(r_k^0\mu_k\cos\varphi_l - r_k^0\sin\varphi_l\right)M_k^{\pm},$$

$$k_B^{\pm} = 2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{4}\left(\lambda_{10k}\cos\varphi_l - \lambda_{9k}\sin\varphi_l\right)M_k^{\pm}, \quad k_H^{\pm} = 2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{4}\left(r_k^0\mu_k\cos\varphi_l - r_k^0\sin\varphi_l\right)M_k^{\pm}, \quad (2.10)$$

где

$$M_k^{\pm} = \pm\frac{1}{\sqrt{a_l}}\left(A_{kl}\left(z_{kl} \pm a_l\right) + B_{kl} - \sum_{n=1}^{\infty}\left(\pm 1\right)^n n\, a_{kln}\right). \quad (2.11)$$

3. Описание результатов численных исследований. Численные исследования были проведены для пластинки с различными отверстиями или трещинами. При проведении расчетов количество членов в рядах Лорана (2.4) и (2.5) и «коллокационных точек» M_i на контурах L_i, для которых составлялись линейные алгебраические уравнения (2.6) и (2.9), увеличивались до тех пор, пока граничные условия на контурах не удовлетворялись с достаточно высокой степенью точности. Для такого удовлетворения граничным условиям, как показали численные исследования, в решаемых задачах, в зависимости от геометрических и упругих характеристик пластинок необходимо было в указанных рядах оставлять от 30 до 40 членов, на каждом из контуров брать от 200 до 400 «коллокационных точек». Численные исследования были проведены для пластинки из материалов:

1) композит на основе титаната бария-феррита (II) кобальта $BaTiO_3 - CoFe_2O_4$ (материал М1) [13];

2) композит, упругие, пьезоэлектрические и электрические постоянные которого соответствуют селениду кадмия $CdSe$, а пьезомагнитные и магнитные – $BaTiO_3$ (М2) [14];

3) композит, упругие, пьезоэлектрические и электрические постоянные которого соответствуют $PZT-4$, а пьезомагнитные и магнитные – $CoFe_2O_4$ (М3) [14]. Физико-механические постоянные этих материалов приведены в табл. 1. При этом приняты обозначения

$$s_0 = 10^{-6}\,\text{МПа}^{-1}, \quad g_0 = 10^{-2}\,\text{МКл}^{-1}\text{м}^2, \quad p_0 = 10^{-5}\,\text{МТл}^{-1}, \quad \beta_0 = 10^3\,\text{МН}\cdot\text{м}^2\cdot\text{МКл}^{-2},$$

$$\nu_0 = 10^{-1}\,\text{МКл}\cdot\text{м}\cdot\text{МА}^{-1}, \quad \chi_0 = 10^{-1}\,\text{МПа}\cdot\text{МТл}^{-2}, \quad \alpha_0 = 10^{-6}\,\text{К}^{-1},$$

$$t_0 = 10^{-3}\,\text{МН}\left(\text{МКл}\cdot\text{К}\right)^{-1}, \quad m_0 = 10^{-3}\,\text{МА}\left(\text{м}\cdot\text{МКл}\right)^{-1}, \quad k_0 = 1\,\text{Вт}\left(\text{м}\cdot\text{К}\right)^{-1}.$$

Все указанные материалы относятся к ромбической системе, когда главные направления материальной симметрии совпадают с направлениями осей координат. Корни характеристического уравнения (1.7) для этого случая либо все чисто мнимые, либо $\mu_2 = -\bar{\mu}_1$, а остальные корни опять же чисто мнимые. При этом для соблюдения условий потенциальности создаваемого потоком тепла электромагнитного поля

$$\frac{t_2^\sigma}{t_1^\sigma} = \frac{m_2^\sigma}{m_1^\sigma} = \frac{k_{11}\,\mathrm{tg}\,\alpha - k_{12}}{k_{22} - k_{12}\,\mathrm{tg}\,\alpha} \tag{2.12}$$

необходимо, чтобы поток был направлен под углом $\alpha = \pi/2$ к оси Ox, что учитывалось при проведении расчетов.

Таблица 1

Постоянные материалов

Величина	Материалы			Величина	Материалы		
	М1	М2	М3		М1	М2	М3
s_{11}/s_0	7,165	22,260	10,745	β_{22}/β_0	0,137	10,612	0,090
s_{22}/s_0	6,797	14,984	7,398	ν_{11}/ν_0	–0,190	213,404	–14,931
s_{66}/s_0	19,912	47,481	7,637	ν_{22}/ν_0	–0,185	–5,534	–3,740
s_{12}/s_0	–2,337	–6,437	–2,542	χ_{11}/χ_0	0,336	0,590	0,805
g_{16}/g_0	2,028	109,22	2,054	χ_{22}/χ_0	0,119	0,575	0,704
g_{21}/g_0	–0,496	–4,333	–1,159	α_1/α_0	8,53	–3,031	–1,578
g_{22}/g_0	1,157	8,016	2,458	α_2/α_0	1,99	–0,608	–0,326
p_{16}/p_0	1,850	268,318	98,843	t_2^σ/t_0	133,0	–40,853	2,405
p_{21}/p_0	0,576	17,778	12,102	m_2^σ/m_0	133,0	0,394	0,207
p_{22}/p_0	1,186	31,206	22,268	k_{11}/k_0	2,5	9,0	1,2
β_{11}/β_0	0,156	19,612	0,106	k_{22}/k_0	2,5	9,0	1,5

В табл. 2 для пластинки с двумя круговыми отверстиями радиуса a_1 $(a_1 = b_1 = a_2 = b_2)$ (рис. 2), на контурах которых поддерживается нулевая температура ($T_1 = T_2 = 0$) либо они теплоизолированы, с точностью до плотности потока q, в зависимости от отношения c/a_1 расстояния c между контурами отверстий к радиусу отверстий, приведены значения нормальных напряжений σ_s в двух наиболее характерных точках контура левого отверстия на площадках, перпендикулярных к контуру для задач теории термоупругости (ТУ), когда не учитываются электрические и магнитные свойства материала, термоэлектроупругости (ТЭУ), когда учитываются упругие и электрические свойства, термомагнитоупругости (ТМУ), когда учитываются упругие и магнитные свойства и термоэлектромагнитоупругости (ТЭМУ), когда учитываются все свойства. Значения, соответствующие $c/a_1 = \infty$, относятся к случаю пластинки с одним отверстием [8].

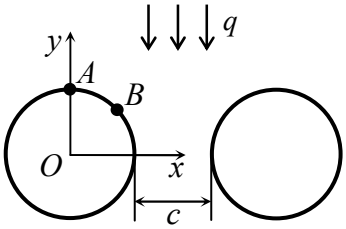


Рис. 2

Для случая заданных значений температуры на контурах на рис. 3 изображены графики распределения указанных напряжений при некоторых значениях c/a_1 в зависимости от центрального угла θ, отсчитываемого от положительного направления оси Ox против часовой стрелки.

Из данных табл. 2, рис. 3 и других полученных результатов следует, что отношение c/a_1 значительно влияет на концентрацию напряжений в зоне между отверстиями и незначительно вне этой зоны. При $c/a_1 > 10$ влияние одного отверстия на напряженное состояние около другого незначительно и им можно пренебречь. Учет электрических

Таблица 2

Значения нормальных напряжений σ_s в точках контура левого отверстия на площадках, перпендикулярных к контуру

Материал	Точка	c/a_1	Тип задачи							
			ТУ	ТЭУ	ТМУ	ТЭМУ	ТУ	ТЭУ	ТМУ	ТЭМУ
			На контурах температура равна нулю				Контуры теплоизолированы			
М1	*A*	0,01	0,511	0,513	0,549	0,554	–0,962	–0,966	–1,040	–1,052
		0,10	0,514	0,516	0,551	0,557	–0,859	–0,862	–0,927	–0,937
		1,00	0,528	0,531	0,564	0,569	–0,661	–0,664	–0,706	–0,713
		10,00	0,487	0,488	0,497	0,499	–0,494	–0,494	–0,504	–0,506
		∞	0,476	0,476	0,476	0,476	–0,476	–0,476	–0,476	–0,476
	B	0,01	–0,002	–0,009	–0,067	–0,076	–0,062	–0,051	–0,166	–0,147
		0,10	0,004	–0,005	–0,070	–0,080	–0,047	–0,035	–0,065	–0,046
		1,00	0,039	0,023	–0,131	–0,149	–0,054	–0,034	0,147	0,171
		10,00	0,139	0,106	–0,385	–0,422	–0,141	–0,108	0,390	0,428
		100,00	0,196	0,159	–0,404	–0,447	–0,196	–0,159	0,404	0,447
		∞	0,204	0,166	–0,405	–0,448	–0,204	–0,166	0,405	0,448
М2	*A*	0,01	–0,016	–0,016	–0,015	–0,016	0,030	0,031	0,029	0,029
		0,10	–0,016	–0,016	–0,015	–0,016	0,027	0,027	0,026	0,026
		1,00	–0,016	–0,017	–0,016	–0,016	0,021	0,021	0,020	0,020
		10,00	–0,015	–0,015	–0,015	–0,015	0,015	0,016	0,015	0,015
		∞	–0,015	–0,015	–0,015	–0,015	0,015	0,015	0,015	0,015
	B	0,01	0,000	0,000	–0,001	–0,001	0,004	0,003	0,000	0,000
		0,10	–0,001	0,000	–0,002	–0,001	0,003	0,002	0,001	0,001
		1,00	–0,002	–0,001	–0,004	–0,003	0,003	0,001	0,005	0,004
		10,00	–0,006	–0,002	–0,012	–0,009	0,006	0,002	0,012	0,009
		∞	–0,008	–0,003	–0,014	–0,011	0,008	0,003	0,014	0,011
М3	*A*	0,01	–0,100	–0,100	–0,098	–0,096	0,209	0,208	0,204	0,200
		0,10	–0,101	–0,100	–0,098	–0,096	0,185	0,185	0,181	0,178
		1,00	–0,102	–0,102	–0,100	–0,099	0,141	0,141	0,138	0,137
		10,00	–0,095	–0,095	–0,093	–0,092	0,108	0,107	0,106	0,104
		∞	–0,094	–0,093	–0,092	–0,091	0,105	0,104	0,103	0,101
	B	0,01	–0,011	–0,004	–0,011	–0,007	0,052	0,017	0,015	–0,004
		0,10	–0,014	–0,006	–0,014	–0,009	0,043	0,016	0,020	0,006
		1,00	–0,027	–0,019	–0,034	–0,028	0,039	0,026	0,046	0,039
		10,00	–0,069	–0,065	–0,091	–0,088	0,078	0,073	0,103	0,099
		100,00	–0,088	–0,084	–0,111	–0,107	0,098	0,094	0,125	0,120
		∞	–0,090	–0,087	–0,114	–0,110	0,101	0,097	0,127	0,123

свойств материала (задача ТЭУ) незначительно влияет на значения напряжений, учет магнитных свойств (задача ТМУ) резко меняет значения напряжений, а еще больше их меняет учет и электрических, и магнитных свойств (задача ТЭМУ). Поэтому при расчетах пренебрегать этими свойствами нельзя. Концентрация напряжений в пластинке из материала М1 значительно больше, чем в пластинках из материалов М2 и М3. Материал М3 обладает наиболее яркими свойствами анизотропного пьезоматериала, материал М1 близок к «изотропным» материалам.

Как показывают расчеты, при уменьшении отношения полуосей b_i/a_i значения напряжений в окрестности концов большой оси эллипса возрастают, стремясь к бесконечности; при $b_i/a_i < 10^{-3}$ эллиптическое отверстие можно считать трещиной и для него считать КИНИН. В табл. 3, для случая, когда на контурах $T_1 = T_2 = 0$ и имеются две вертикально ориентированные трещины одинаковой длины $2l$ (рис. 4)

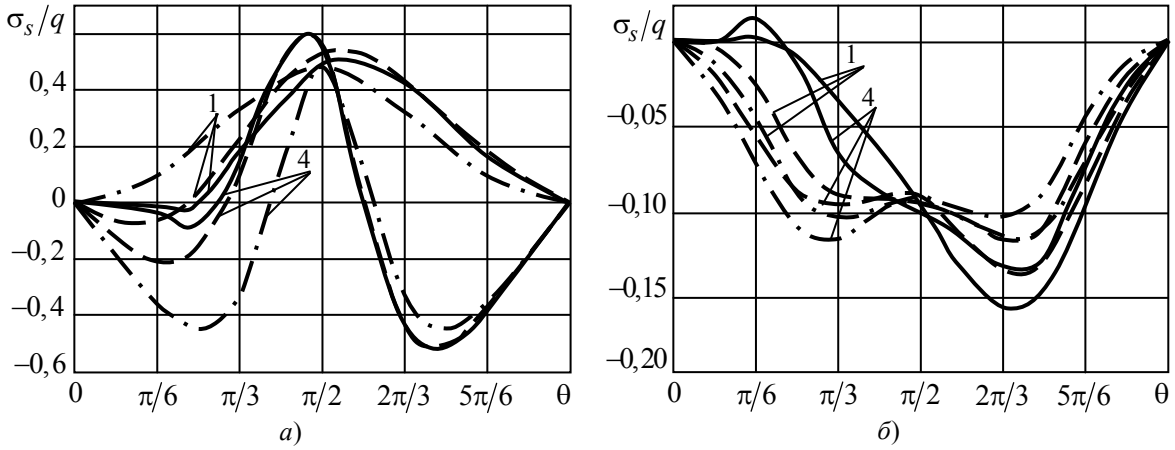


Рис. 3. График распределения напряжений σ_s вблизи контура левого отверстия в пластинке из материалов М1 (рис. *а*) и М3 (рис. *б)* для задач ТУ (цифрой 1) и ТЭМУ (цифрой 4) для c/a_1, равных 0,1 (сплошные линии), 1 (штриховые), ∞ (штрих-пунктирные).

при различных значений отношения c/l расстояния c между трещинами к их полудлине приведены значения КИН k_1^-/q, k_2^-/q для нижнего конца левой трещины (для верхнего конца левой трещины $k_1^+ = -k_1^-$, $k_2^+ = k_2^-$; для правой трещины значения $k_1^\pm/q$ такие же, как и для левой трещины, а значения $k_2^\pm/q$ отличаются знаком). Видно, что, как и в случае отверстий, на значения КИН влияние электрических свойств незначительно, а влияние магнитных свойств велико, а еще

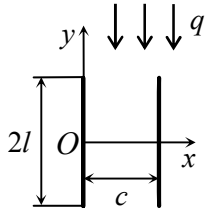


Рис. 4

Таблица 3

Значения КИН для нижнего конца левой трещины

Материал	КИН	Тип задачи	c/l					
			0,1	0,5	1,0	2,0	10,0	∞
М1	$k_1^- \cdot 10^{-2}$	ТУ	–7,4363	–9,2408	–10,3271	–10,8065	–9,6910	–9,5325
		ТЭМУ	0,9566	–0,6247	–1,2414	–0,7761	3,3894	3,9728
	$k_2^- \cdot 10^{-2}$	ТУ	–1,6589	–1,6698	–1,8324	–2,0844	–0,9061	0,0000
		ТЭМУ	3,4571	5,1961	5,2559	3,7174	0,4576	0,0000
М3	$k_1^- \cdot 10^{-2}$	ТУ	1,9644	2,4528	2,7162	2,7436	2,5340	2,5205
		ТЭМУ	2,0651	2,4307	2,6724	2,8435	2,8720	2,8662
	$k_2^- \cdot 10^{-2}$	ТУ	0,5592	0,5769	0,6304	0,7132	0,2458	0,0000
		ТЭМУ	0,7872	0,9830	1,0205	0,9017	0,2785	0,0000

больше влияние и электрических и магнитных свойств и ими при расчетах пренебрегать нельзя. Значения КИН для трещины в пластинке из материала М1 значительно больше, чем в пластинке из материалов М3. Закономерности изменения КИН в зависимости от расстояния между ними такие же, как и описанные выше закономерности для напряжений в случае отверстий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берлинкур Д. Пьезоэлектрические и пьезомагнитные материалы и их применение в преобразователях / Д. Берлинкур, Д. Керран, Г Жаффе // Физическая акустика.– М.: Мир, 1966.– Т. 1, ч. А.– С. 204–326.
2. Желудев И. С. Физика кристаллических диэлектриков / И. С. Желудев.– М.: Наука, 1968.– 463 с.

3. Ландау Л. Д. Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.– М.: Наука, 1982.– 621 с.
4. Можен Ж. Механика электромагнитных сплошных сред / Ж. Можен.– М.: Мир, 1991.– 560 с.
5. Партон В. З. Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел / В. З. Партон, Б. А. Кудрявцев.– М.: Наука, 1988.– 472 с.
6. Калоеров С. А. Плоская задача термоэлектромагнитоупругости для многосвязных сред / С. А. Калоеров, О. А. Сорочан // Прикладная механика.– 2009.– Т. 45, № 4.– С. 81–91.
7. Калоеров С. А. Потенциальные электромагнитные поля в пьезопластинах при механических, электромагнитных и тепловых воздействиях / С. А. Калоеров // Вестник Донец. нац. ун-та. Сер. А: Естеств. науки. – 2016.– № 4.– С. 19–34.
8. Калоеров С. А. Действие линейного потока тепла в пьезопластинах / С. А. Калоеров, Е. С. Глушанков // Вестник Донец. нац. ун-та. Сер. А: Естеств. науки.– 2017.– № 1.– С. 12–25.
9. Калоеров С. А. Термоупругое состояние анизотропной пластинки с отверстиями и трещинами при действии линейного потока тепла и температуры на контурах / С. А. Калоеров, Ю. С. Антонов // Теорет. и прикладная механика.– 2005.– Вып. 40.– С. 102–116.
10. Воеводин В. В. Вычислительные основы линейной алгебры / В. В. Воеводин.– М.: Наука, 1977.– 304 с.
11. Форсайт Дж. Машинные методы математических вычислений / Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Моулер.– М.: Мир, 1980.– 280 с.
12. Калоеров С. А. Определение коэффициентов интенсивности напряжений, индукции и напряженности для многосвязных электроупругих многосвязных сред / С. А. Калоеров // Прикладная механика. – 2007. – Т. 43, № 6. – С. 56–62.
13. Tian W.-Y. Multiple crack interaction problem in magnetoelectroelastic solids / W.-Y. Tian, U. Gabbert // Europ. J. Mech. Part A. – 2004. – Vol. 23. – P. 599–614.
14. Hou P.-F. Three-dimensional Green's function for a point heat source in two-phase transversely isotropic magneto-electro-thermo-elastic material / P.-F. Hou, G.-H. Teng, H.-R. Chen // Mech. Mat. – 2009. – Vol. 41. – P. 329–338.

Поступила в редакцию 21.02.2018 г.

THE LINEAR HEAT FLOW ACTION IN PIEZOPLATES WITH HOLES AND CRACKS

S.A. Kaloerov, E S. Glushankov

The approach to determine the thermoelectromagnetoelastic state of a multiple-connected piezoplate with holes under linear heat flow action is proposed. The solution of the problem is constructed with using the thermoconductivity and thermoelectromagnetoelasticity problems' complex potentials. With the generalized least squares the problem is reduced to solving the system of linear algebraic equations for the Laurent series expansion unknown coefficients. The influence of electric and magnetic properties of a material, as well as geometric characteristics of the holes on the main characteristics of thermoelectromagnetoelastic state are investigated with the numerical studies.

Keywords: linear heat flow, piezoplate, thermal stresses, electromagnetic field tensions and inductions, stress, inductions and tensions intensity factors, generalized least squares.

Калоеров Стефан Алексеевич
доктор физико-математических наук, профессор;
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
г. Донецк, профессор кафедры теории упругости и вычислительной математики
E-mail: kaloerov@mail.ru

Kaloerov Stefan Alekseevich
Dr. Sci., Phys.-Math., Full Professor;
Donetsk National University, Donetsk,
Professor at the Department of Elasticity Theory and Computational Mathematics

Глушанков Евгений Сергеевич
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
г. Донецк, аспирант кафедры теории упругости и вычислительной математики
E-mail: evgenij.glushankov@gmail.com

Glushankov Eugene Sergeevich
Donetsk National University, Donetsk,
Postgraduate at the Department of Elasticity Theory and Computational Mathematics

УДК 539.3

ИЗГИБ МНОГОСВЯЗНОЙ ПЛИТЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СОСРЕДОТОЧЕННЫХ СИЛ ВО ВНУТРЕННИХ ТОЧКАХ

© 2018. ***С.А. Калоеров, А.И. Занько***

Решена задача для многосвязной плиты под действием сосредоточенных сил во внутренних точках. С использованием методов комплексных потенциалов, разложений функций в ряды Лорана и по полиномам Фабера и обобщенного метода наименьших квадратов рассматриваемая задача сведена к решению системы линейных алгебраических уравнений. Для круговой плиты с эллиптическим отверстием проведены численные исследования с анализом влияния геометрических характеристик отверстия, материала плиты, способа подкрепления контуров и точки приложения сосредоточенной силы на значения изгибающих моментов.

Ключевые слова: анизотропная плита; комплексные потенциалы теории изгиба плит; полиномы Фабера; ряды Лорана; обобщенный метод наименьших квадратов; сосредоточенная сила.

Введение. Тонкие пластинки из композиционных материалов находят широкое применение в качестве элементов различных конструкций в строительстве, в машино-, авиа- и приборостроении. По различным техническим и эксплуатационным причинам такие пластинки могут содержать отверстия или трещины, около которых в процессе эксплуатации конструкций могут возникать высокие концентрации, что необходимо учитывать при проектировании и эксплуатации конструкций. В связи с этим актуальна разработка методов исследования напряженного состояния анизотропных пластинок (какими в большинстве случаев представляются пластинки из композиционных материалов) с концентраторами напряжений типа отверстий и трещин и решения на их основе задач инженерной практики.

Еще в 30-е годы XX в. Лехницким С. Г. для решения указанной проблемы в случае плоской задачи теории упругости были введены комплексные потенциалы теории упругости анизотропного тела [1], решен ряд задач для односвязных областей. В то же время им были введены комплексные потенциалы теории изгиба пластинок (плит) [2], решены простейшие задачи. Для многосвязных анизотропных плит аналогичные исследования были выполнены Космодамианским А. С. [3] и Меглинским В. В. [4]. Причем при решении конкретных задач ими и их учениками использовался метод рядов, который оказался неэффективным для удовлетворения граничным условиям в случаях близких расстояний между контурами. Все это особенно проявилось при решении задач для случаев действия на плиту сосредоточенных сил. Поэтому в полученных таким подходом решениях Меглинскому В. В. [5] и Иванову Г. М. [6] численные исследования удалось провести для больших расстояний между контурами и контуром и точкой приложения силы, когда влияние одного отверстия на напряженное состояние около других незначительно. В дальнейшем при использовании метода рядов в случае частной задачи для изотропной плиты с круговым отверстием Ивановым Г. М. была выделена главная часть разложений функций, что позволило значительно улучшить удовлетворение граничных условий на контурах. Но для такого выделения главных частей комплексных потенциалов требуются дополнительные численные исследования, которые можно проводить при довольно большом количестве найденных коэффициентов разложений функций, что трудно реализовать для некруговых контуров, а тем более в случае анизотропных плит. Кроме того, такой прием, и вообще метод рядов, не может

использоваться случаев плит, когда контуры могут касаться и пересекаться друг с другом. В работах [7, 8] для решения задач об изгибе плит распределенными усилиями предложен обобщенный метод наименьших квадратов (ОМНК), который позволяет рассматривать плиты с отверстиями любой конфигурации, сочетания и взаиморасположения.

В данной статье ОМНК приложен к решению задачи об изгибе многосвязной анизотропной плиты под действием сосредоточенных сил. Проведены численные исследования напряженно-деформированного состояния (НДС), с помощью которых установлены закономерности влияния на значения основных характеристик НДС геометрических характеристик плиты и физико-механических параметров материала.

Постановка задачи. Рассмотрим тонкую анизотропную плиту, срединная плоскость которой занимает многосвязную область S, ограниченную внешним контуром L_0 и контурами эллиптических отверстий L_l ($l=\overline{1,\mathcal{L}}$) с полуосями a_l, b_l и центрами в точках z_l (x_{0l}, y_{0l}). Плита в каждой точке имеет плоскость упругой симметрии, параллельную срединной плоскости. Во внутренних точках плиты z_r^0 (x_r^0, y_r^0) ($r=\overline{1,\mathcal{R}}$) действуют сосредоточенные силы P_r^0 с моментами $M_{xr}^0 = y_r^0 P_r^0$, $M_{yr}^0 = -x_r^0 P_r^0$ относительно осей координат. Эллипсы L_l могут располагаться произвольно относительно друг друга и внешнего контура, в том числе касаться, пересекаться, образовывать контуры сложной конфигурации. Один из контуров плиты L_p жестко защемлен, остальные свободны от усилий или жестко подкреплены. При этом на жестко защемленном контуре L_p (внешнем или внутреннем) сила реакции опоры защемления в силу равновесия плиты равна $P_p^* = -\sum_{r=1}^{\mathcal{R}} P_r^0$, а ее главный момент имеет компоненты $M_{px}^* = -\sum_{r=1}^{\mathcal{R}} y_r^0 P_r^0$, $M_{py}^* = \sum_{r=1}^{\mathcal{R}} x_r^0 P_r^0$.

Задачу об изгибе плиты будем решать, используя функции $W_k(z_k)$ $(k=1,2)$ обобщенных комплексных переменных

$$z_k = x + \mu_k y, \tag{1}$$

удовлетворяющие на контурах L_i $\left(i=\overline{0,\mathcal{L}}\right)$ граничным условиям [9, 10]

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2} g_{ki\alpha} W_k'(z_k) = f_{i\alpha}(t) \quad (\alpha = 1, 2), \tag{2}$$

в которых

$$g_{ki1} = p_k / \mu_k, \quad g_{ki2} = q_k, \quad f_{i1} = -c_i x, \quad f_{i2} = c_i y$$

для неподкрепленных контуров и

$$g_{ki1} = 1, \quad g_{ki2} = \mu_k, \quad f_{i1} = c_{1i}, \quad f_{i2} = c_{2i}$$

для жестко подкрепленных или жестко защемленных контуров. При этом μ_k – корни известного характеристического уравнения [9]

$$D_{22}\mu^4 + 4D_{26}\mu^3 + 2\left(D_{12} + 2D_{66}\right)\mu^2 + 4D_{16}\mu + D_{11} = 0\,; \tag{3}$$

$$p_k = D_{11} + 2D_{16}\mu_k + D_{12}\mu_k^2, \quad q_k = D_{12} + 2D_{26}\mu_k + D_{22}\mu_k^2, \quad D_{ij} = B_{ij}D_0\,;$$

$$B_{11} = (a_{22}a_{66} - a_{26}^2)/\Delta, \quad B_{12} = (a_{16}a_{26} - a_{12}a_{66})/\Delta, \quad B_{16} = (a_{12}a_{26} - a_{16}a_{22})/\Delta,$$

$$B_{22} = (a_{11}a_{66} - a_{16}^2)/\Delta, \quad B_{26} = (a_{12}a_{16} - a_{26}a_{11})/\Delta, \quad B_{66} = (a_{11}a_{22} - a_{12}^2)/\Delta,$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{16} \\ a_{12} & a_{22} & a_{26} \\ a_{16} & a_{26} & a_{66} \end{vmatrix};$$

a_{ij} – коэффициенты деформации материала плиты; $D_0 = 2h^3/3$; h – полутолщина плиты; c_i – вещественные, $c_{\alpha i}$ – комплексные постоянные, причем в случае жесткого защемления контура L_i постоянные $c_{\alpha i} = 0$.

Решение задачи. Функции $W_k'(z_k)$ определены в многосвязных областях S_k, получаемых из заданной области S аффинными преобразованиями (1) и ограниченных контурами L_{kl}, соответствующими контурам L_l при аффинных преобразованиях. Если использовать методы конформных отображений и разложений функций в ряды Лорана (для внешностей контуров отверстий) и по полиномам Фабера (для внутренностей внешних контуров), для комплексных потенциалов получаем выражения вида

$$W_k'(z_k) = N_k\left(z_k\right) + \sum_{l=0}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_{kl\,n}a_{k\,l\,n}\,, \tag{4}$$

где

$$N_k\left(z_k\right) = \left(A_{kp}^* z_k + B_{kp}^*\right)\ln\left(z_k - z_{kp}\right) + \sum_{r=1}^{\mathcal{R}}\left(A_{kr}^0 z_k + B_{kr}^0\right)\ln\left(z_k - z_{kr}^0\right); \tag{5}$$

A_{kp}^*, B_{kp}^*, A_{kr}^0, B_{kr}^0 – постоянные, определяемые из решения систем уравнений [10]

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2}\left(1, \mu_k, \mu_k^2, \frac{1}{\mu_k}\right)iA_{kp}^* = \left(0, 0, 0, \frac{P_p^*}{2\pi D_{11}}\right); \tag{6}$$

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2}\left(1, \mu_k, \mu_k^2, \frac{1}{\mu_k}\right)iB_{kp}^* = \left(0, 0, -\frac{M_{px}^*}{4\pi D_{22}}, -\frac{M_{py}^*}{4\pi D_{11}}\right); \tag{7}$$

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2}\left(1, \mu_k, \mu_k^2, \frac{1}{\mu_k}\right)iA_{kr}^0 = \left(0, 0, 0, \frac{P_r^0}{2\pi D_{11}}\right); \tag{8}$$

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2}\left(1, \mu_k, \mu_k^2, \frac{1}{\mu_k}\right)iB_{kr}^0 = \left(0, 0, -\frac{M_{xr}^0}{2\pi D_{22}}, -\frac{M_{yr}^0}{2\pi D_{11}}\right); \tag{9}$$

$$\varphi_{k0n} = \left(z_k/R_{k0}\right)^n, \quad \varphi_{kl\,n} = \zeta_{kl}^{-n} \quad (l \ge 1)\,; \tag{10}$$

ζ_{kl} – переменные, определяемые из конформных отображений [11]

$$z_k = z_{kl} + R_{kl}\left(\zeta_{kl} + \frac{m_{kl}}{\zeta_{kl}}\right) \tag{11}$$

внешности единичных кругов $|\zeta_{kl}| \geq 1$ на внешности эллипсов L_{kl} ($l = \overline{0, \mathcal{L}}$);

$$z_{kl} = x_{0l} + \mu_k\, y_{0l}\,,$$
$$R_{kl} = \left[a_l\left(\cos\varphi_l + \mu_k \sin\varphi_l\right) + ib_l\left(\sin\varphi_l - \mu_k\cos\varphi_l\right)\right]/2\,,$$
$$m_{kl} = \left[a_l\left(\cos\varphi_l + \mu_k \sin\varphi_l\right) - ib_l\left(\sin\varphi_l - \mu_k\cos\varphi_l\right)\right]/2R_{kl}\,, \tag{12}$$

где φ_l – угол между направлениями оси Ox основной системы и оси $O_l x_l$ локальной системы координат с началом в центре эллипса L_l и направлением вдоль полуоси a_l, отсчитываемый от Ox против часовой стрелки; (x_{0l}, y_{0l}) – координаты начала системы координат $O_l x_l y_l$ в основной системе Oxy; a_{kln} – неизвестные коэффициенты разложений. При этом логарифмические слагаемые $\left(A^*_{kp} z_k + B^*_{kp}\right)\ln\left(z_k - z_{kp}\right)$ в комплексных потенциалах присутствуют, если жестко защемлен контур отверстия L_p и отсутствуют, если жестко защемлен внешний контур L_0, т. е. при $p = 0$ в (5) нужно принять $A^*_{k0} = B^*_{k0} = 0$.

Для определения неизвестных коэффициентов a_{kln} удовлетворим граничным условиям. Для многосвязных областей этим условиям удобнее удовлетворять в дифференциальной форме. Продифференцировав условия (2) и функции (4) по дуге контура, из (2) получим

$$\sum_{k=1}^{2}\sum_{l=g}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\left(g_{ki\alpha}\delta_{k,s}\varphi'_{kln}\left(t_{kl}\right)a_{kln} + \overline{g}_{ki\alpha}\overline{\delta}_{k,s}\overline{\varphi'_{kln}\left(t_{kl}\right)}\,\overline{a}_{kln}\right) =$$
$$= -\sum_{k=1}^{2}\left[g_{ki\alpha}\delta_{k,s}N'_k\left(t_{kl}\right) + \overline{g}_{ki\alpha}\overline{\delta}_{k,s}\overline{N'_k\left(t_{kl}\right)}\right] + \frac{df_{i\alpha}(t)}{ds}\quad \left(i = \overline{0, \mathcal{L}};\ \alpha = 1, 2\right), \tag{13}$$

где

$$N'_k\left(z_k\right) = A^*_{kp}\ln\left(z_k - z_{kp}\right) + \frac{A^*_{kp}z_k + B^*_{kp}}{z_k - z_{kp}} + \sum_{r=1}^{\mathcal{R}}\left[A^0_{kr}\ln\left(z_k - z^0_{kr}\right) + \frac{A^0_{kr}z_k + B^0_{kr}}{z_k - z^0_{kr}}\right];$$
$$\varphi'_{k0n} = \frac{n\, z_k^{\,n-1}}{R_{k0}^{\,n}}\,;\quad \varphi'_{kln} = -\frac{n}{\zeta_{kl}^{n-1}R_{kl}\left(\zeta^2_{kl} - m_{kl}\right)}\quad (l \geq 1)\,;\quad \delta_{k,s} = dt_k / ds\,.$$

При этом в случае неподкрепленного контура $\dfrac{df_{i1}}{ds} = -c_i\dfrac{dx}{ds}$, $\dfrac{df_{i2}}{ds} = c_i\dfrac{dy}{ds}$. если же контур L_i жестко подкреплен или жестко защемлен, то $\dfrac{df_{i1}}{ds} = \dfrac{df_{i2}}{ds} = 0$.

Условиям (13) будем удовлетворять обобщенным методом наименьших квадратов [12, 13]. Для этого на контурах плиты L_i выберем набор точек $M_{im}\left(x_{im}, y_{im}\right)$

$\left(m=\overline{1,\,M_i}\right)$ и удовлетворив в них условиям (13), получим

$$\sum_{k=1}^{2}\sum_{l=g}^{\mathcal{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\left(g_{ki\alpha}\delta_{k,s}\varphi'_{kln}\left(t_{klm}\right)a_{kln}+\overline{g}_{ki\alpha}\overline{\delta}_{k,s}\overline{\varphi'_{kln}\left(t_{klm}\right)}\overline{a}_{kln}\right)=$$

$$=-\sum_{k=1}^{2}\Big[g_{ki\alpha}\delta_{k,s}\left(g\Gamma_k+N'_k\left(t_{klm}\right)\right)+\overline{g}_{ki\alpha}\overline{\delta}_{k,s}\left(g\overline{\Gamma}_k+\right.$$

$$\left.+\overline{N'_k\left(t_{klm}\right)}\right)\Big]+\frac{df_{i\alpha}\left(t_{im}\right)}{ds}\ \left(i=\overline{g,\,\mathcal{L}};\ m=\overline{1,\,M_l};\ \alpha=1,2\right),\qquad(14)$$

где $t_{klm}=x_{lm}+\mu_k y_{lm}$, $t_{im}\left(x_{im},y_{im}\right)$.

Систему (14) дополним уравнениями однозначности прогиба [10] для каждого отверстия

$$2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2}ia_{kln}R_{kl}=0\ \ (l=\overline{1,\mathcal{L}}).$$

После нахождения, с использованием сингулярных разложений, псевдорешения указанной дополненной системы постоянные a_{kln}, а следовательно, и функции $W'_k(z_k)$ будут известными и по ним можно вычислять моменты в любой точке плиты

$$\left(M_x,\,M_y,\,H_{xy}\right)=-2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2}\left(p_k,\,q_k,\,r_k\right)W_k''(z_k),$$

где $r_k=D_{16}+2D_{66}\mu_k+D_{26}\mu_k^2$. В случае, если некоторый эллипс L_l переходит в прямолинейный разрез (трещину), то для его концов можно вычислить и коэффициенты интенсивности моментов (КИМ) $k_{1M}^{\pm}$ (КИМ соответствующий моменту M_y) и $k_{2M}^{\pm}$ (КИМ соответствующий моменту H_{xy}) по формулам [14]

$$k_{1M}^{\pm}=2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2}q_kM_k\ ,\quad k_{2M}^{\pm}=2\,\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{2}r_kM_k\ ,\qquad(15)$$

в которых

$$M_k=\mp\frac{\sqrt{a_l}}{2R_{kl}}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\pm1\right)^n n\,a_{kln}\,,$$

знаки $+$ и $-$ у КИМ относятся к правому и левому концам разреза соответственно.

В частном случае, для анизотропного диска с одним центральным эллиптическим отверстием с центром в начале координат при наличии только одной сосредоточенной силы P_1^0 в точке z_1^0 (x_1^0, y_1^0) в приведенных формулах нужно полагать $l=R=1$. Тогда функции (4) примут вид

$$N_k\left(z_k\right)=\left(A_{kp}^*z_k+B_{kp}^*\right)\ln z_k+\left(A_{k1}^0z_k+B_{k1}^0\right)\ln\left(z_k-z_{k1}^0\right);$$

$$N'_k\left(z_k\right)=A_{kp}^*\ln z_k+A_{kp}^*+\frac{B_{kp}^*}{z_k}+A_{k1}^0\ln\left(z_k-z_{k1}^0\right)+\left(A_{k1}^0z_k+B_{k1}^0\right)\left(z_k-z_{k1}^0\right)^{-1};$$

$$\varphi'_{k0n} = nz_k^{n-1}R_{k0}^{-n}\,;\;\; \varphi'_{k1n} = -\frac{n}{\zeta_{k1}^{n-1}R_{k1}\left(\zeta_{k1}^2 - m_{k1}\right)}\,;$$

$$\varphi_0 = \varphi_1 = 0\,,\quad x_{00} = y_{00} = x_{10} = y_{10} = 0\,,\quad M_{1x}^0 = y_1^0 P_1^0\,,\quad M_{1y}^0 = -x_1^0 P_1^0\,,$$

$$P_1^* = -P_1^0\,,\quad M_{1x}^* = -y_1^0 P_1^0\,,\quad M_{1y}^* = x_1^0 P_1^0\,,$$

причем, если жестко защемлен внешний контур, то $A_{k0}^* = B_{k0}^* = 0$, если же жестко защемлен внутренний, то A_{k1}^*, B_{k1}^* вычисляются из решения систем (6), (7).

Исследование результатов численных исследований. Для последнего случая плиты с одним отверстием были проведены численные исследования значений изгибающих моментов. Плита считалась изготовленной из материалов [15]: алюминий (материал М1) или стеклопластик косоугольной намотки (М2). Коэффициенты деформаций a_{ij} для этих материалов приведены в табл. 1. Ниже описаны некоторые из

Таблица 1

Материал	Постоянные материала				$\frac{a_{11}}{a_{22}}$
	$a_{11}\cdot 10^4$, $МПа^{-1}$	$a_{22}\cdot 10^4$, $МПа^{-1}$	$a_{12}\cdot 10^4$, $МПа^{-1}$	$a_{66}\cdot 10^4$, $МПа^{-1}$	
М1	0,1408	0,1458	-0,035	0,352	1,000
М2	10,000	2,800	-0,770	27,000	3,571

полученных результатов. При этом все значения приведены с точностью до P_1^0 / D_0 как множителя. Для изотропной плиты в качестве «анизотропного» материала принимался изотропный алюминий, для которого $a_{22} = 0{,}1458\cdot 10^{-4}$, т. е. незначительно отличается от известной постоянной $a_{22} = a_{11} = 0{,}1408\cdot 10^{-4}$. В противном случае при решении задачи будет деление на ноль, так как корни характеристического уравнения (3) для изотропного материала будут двухкратными и равными и $-i$.

Для кругового кольца с внешним жестко защемленным контуром L_0 $(A_{k0}^* = B_{k0}^* = 0)$ радиуса a_0 $(b_0 = a_0)$ и внутренним незагруженным контуром L_1 радиуса $a_1 = 0{,}2a_0$ $(b_1 = a_1)$ (рис. 1) в зависимости от центрального угла θ, отсчитываемого от положительного направления оси Ox, и от отношения c/a_0, где c – расстояние от начала координат до точки приложения сосредоточенной силы, в табл. 2 приведены значения моментов M_s и M_n (соответствующих нормальным напряжениям σ_s и σ_n на площадках, перпендикулярных и касательных к контурам).

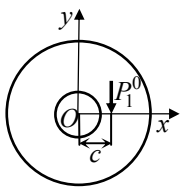


Рис. 1

Значения моментов M_n на контуре L_1 равны нулю, поэтому они в табл. 2 не приведены. На рис. 2 изображены графики распределения моментов M_s в точках контура отверстия L_1. Сплошные линии рисунка относятся к плите из анизотропного материала М2, штриховые – из изотропного материала М1. В табл. 3 и на рис. 3 представлены значения тех же величин, когда жестко защемлен внутренний контур L_1, а внешний контур свободен от загружения. В этом случае A_{k1}^*, B_{k1}^* вычисляются из решения систем (6), (7).

Таблица 2

Материал	θ, рад.	c/a_0							
		0,3	0,9	0,3	0,9	0,21	0,3	0,6	0,9
		M_s на L_0		M_n на L_0		M_s на L_1			
M1	0	-0,037	-0,071	-0,147	-0,286	0,970	0,420	0,106	0,007
	$\pi/6$	-0,032	-0,003	-0,126	-0,012	0,307	0,233	0,067	0,004
	$\pi/3$	-0,023	-0,001	-0,091	-0,003	0,176	0,122	0,024	0,001
	$\pi/2$	-0,017	0,000	-0,066	-0,002	0,126	0,087	0,016	0,000
	$2\pi/3$	-0,013	0,000	-0,053	-0,001	0,106	0,077	0,019	0,001
	π	-0,011	0,000	-0,045	-0,001	0,097	0,075	0,024	0,002
M2	0	-0,016	-0,056	-0,058	-0,205	1,632	0,681	0,143	0,007
	$\pi/6$	-0,051	-0,010	-0,078	-0,015	0,184	0,195	0,054	0,003
	$\pi/3$	-0,050	-0,002	-0,161	-0,007	0,114	0,070	0,004	-0,001
	$\pi/2$	-0,011	0,000	-0,144	-0,002	0,071	0,040	-0,002	-0,001
	$2\pi/3$	-0,017	0,000	-0,054	0,000	0,046	0,028	0,002	0,000
	π	-0,002	0,000	-0,007	0,000	0,185	0,134	0,032	0,001

Таблица 3

Материал	θ, рад.	c/a_0						
		0,3	0,9	0,3	0,9	0,3	0,6	0,9
		M_s на L_0		M_s на L_1		M_n на L_1		
M1	0	0,005	0,313	-0,118	-0,355	-0,473	-0,928	-1,418
	$\pi/6$	0,000	-0,109	-0,040	-0,260	-0,161	-0,655	-1,041
	$\pi/3$	-0,005	-0,142	-0,008	-0,087	-0,031	-0,219	-0,349
	$\pi/2$	-0,004	-0,083	0,001	0,023	0,005	0,031	0,092
	$2\pi/3$	-0,001	-0,020	0,003	0,049	0,012	0,093	0,196
	π	0,002	0,029	0,002	0,026	0,006	0,055	0,102
M2	0	0,005	0,471	-0,116	-0,386	-0,422	-0,905	-1,404
	$\pi/6$	0,004	-0,043	-0,120	-0,677	-0,184	-0,659	-1,037
	$\pi/3$	-0,006	-0,147	-0,012	-0,107	-0,040	-0,229	-0,345
	$\pi/2$	-0,005	-0,094	0,000	0,008	0,005	0,035	0,108
	$2\pi/3$	-0,001	-0,014	0,004	0,065	0,014	0,102	0,211
	π	0,001	0,021	0,002	0,030	0,007	0,058	0,108

Из данных табл. 2 и 3, рис. 2 и 3 видно, что наибольшая концентрация изгибающих моментов (а следовательно, и соответствующих напряжений) наблюдается вблизи контура отверстия в зоне между контуром отверстия и точкой приложения силы. Если кольцо защемлено по внешнему контуру, то значения моментов в этой зоне резко растут с приближением точки приложения силы к контуру отверстия (с уменьшением c/a_0) (за счет близости действия сосредоточенной силы), если же защемлен внутренний контур кольца, то значения моментов около контура отверстия растут с удалением точки приложения силы от контура отверстия (с увеличением c/a_0) (из-за роста момента силы относительно точек контура отверстия). Вблизи внешнего контура и около отверстия в зоне, противоположной точке приложения силы, значения моментов при изменении отношения c/a_0 значения моментов изменяются незначительно. Существенно на значения моментов влияет «степень анизотропии»

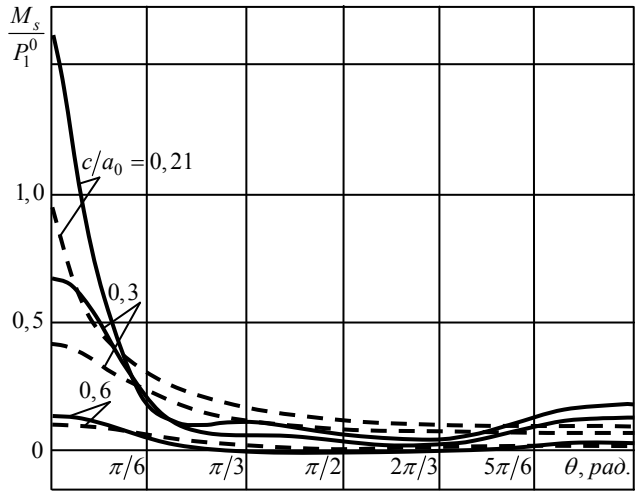


Рис. 2

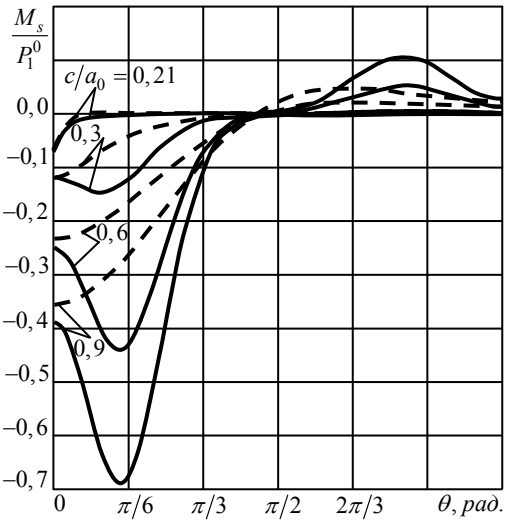


Рис. 3

(отличие a_{11}/a_{22} от 1). Чем сильнее анизотропия материала плиты, тем выше уровень концентрации изгибающих моментов на контуре L_1.

Численные исследования были проведены и для случая, когда круговая плита ослаблена центральным эллиптическим отверстием с контуром L_1. Исследованиями для этого случая установлено, что при уменьшении отношения полуосей b_1/a_1 эллипса L_1 значения моментов M_s вблизи конца большой полуоси возрастают и стремятся к бесконечности. При $b_1/a_1 < 10^{-3}$ отверстие можно считать трещиной и считать для ее концов КИМ $k_{1M}^{\pm}$ (для рассматриваемого случая $k_{2M}^{\pm} = 0$). Для круговой плиты с внешним жестко защемленным контуром L_0 радиуса a_0 ($b_0 = a_0$) и трещиной полудлины $a_1 = 0,2a_0$ при действии сосредоточенной силы P_1^0 в точке $z_1^0(c;\ 0)$ в зависимости от отношения c/a_0, в табл. 4 приведены значения КИМ $k_{1M}^{\pm}$. Как следует из этих данных, с приближением точки приложения силы к вершине трещины значения КИМ растут, особенно для ближайшей к точке приложения силы вершины. Для анизотропной плиты значения КИМ получаются больше, чем для изотропной.

Таблица 4

Материал	КИМ	c/a_0					
		0,21	0,25	0,3	0,5	0,7	0,9
M1	k_{1M}^{+}	0,109	0,082	0,064	0,029	0,011	0,001
	k_{1M}^{-}	0,047	0,041	0,034	0,017	0,006	0,001
M2	k_{1M}^{+}	0,148	0,110	0,085	0,035	0,011	0,001
	k_{1M}^{-}	0,058	0,050	0,041	0,018	0,005	0,000

Как показывают исследования, замена свободного контура на жестко подкрепленный приводит к значительному изменению значений моментов и характера их распределения, включая точки, где достигается максимум моментов. Для случая кругового кольца, когда жестко подкреплен внутренний контур, а внешний жестко защемлен это видно из данных табл. 5 и рис. 4 на которых приведены значения моментов M_s на контуре L_1, соответствующих табл. 2 и рис. 2 для кольца со свободным внутренним контуром.

Таблица 5

Материал	θ, рад.	c/a_0			
		0,21	0,3	0,6	0,9
M1	0	0,016	-0,011	-0,016	-0,002
	$\pi/6$	0,078	0,057	0,008	0,000
	$\pi/3$	0,066	0,064	0,027	0,002
	$\pi/2$	0,047	0,044	0,021	0,002
M2	0	0,007	-0,015	-0,019	-0,002
	$\pi/6$	0,187	0,116	0,009	0,000
	$\pi/3$	0,093	0,087	0,032	0,002
	$\pi/2$	0,019	0,017	0,007	0,000

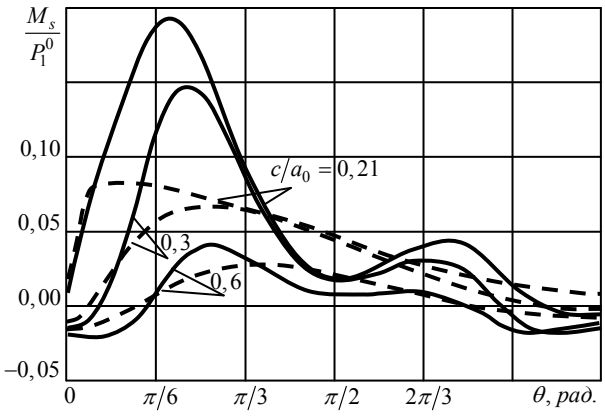


Рис. 4

Заметим, что приведенные выше числовые данные для изотропной плиты существенно отличаются от известных результатов, полученных при использовании обычного метода рядов и согласуются с теми, которые получены при использовании этого метода с выделением главных частей комплексных потенциалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лехницкий С. Г. Напряжения в неограниченной анизотропной пластинке, ослабленной эллиптическим отверстием / С. Г. Лехницкий // ДАН СССР.– 1936.– Т. 4 (13), №. 3.
2. Лехницкий С. Г. О некоторых вопросах, связанных с теорией изгиба тонких плит / С. Г. Лехницкий // Прикладная математика и механика. Нов. сер. – 1938. – Т. 2, вып. 2. – С. 181–210.
3. Космодамианский А. С. Напряженное состояние анизотропных сред с отверстиями или полостями / А. С. Космодамианский.– К., Донецк: Вища шк., 1976.– 200 с.
4. Меглинский В. В. Некоторые задачи изгиба тонких многосвязных анизотропных плит / В. В. Меглинский // Некоторые задачи теории упругости о концентрации напряжений и деформации упругих тел. – 1967. – № 3. – С. 97–127.
5. Меглинский В. В. Действие сосредоточенной силы, приложенной в центре анизотропной эллиптической плиты с двумя отверстиями / В. В. Меглинский // Прикладная механика. – 1970. – Т. 6, вып. 1. – С. 82–87.
6. Иванов Г. М. Действие сосредоточенных сил при изгибе анизотропной двусвязной плиты / Г. М. Иванов // Теорет. и прикладная механика (Харьков). – 1970. – Вып.1. – С.17-21.
7. Калоеров С. А. Изгиб многосвязной анизотропной плиты сложной конфигурации / С. А. Калоеров, А. И. Занько // Актуальные проблемы механики деформируемого твердого тела: Матер. VI Междунар. науч. конф., Донецк-Мелекино, 11–14 июня 2013 г. – Донецк: Юго-Восток. – 2013. – Т. 1. – С. 158–162.
8. Калоеров С. А. Эффективный метод определения напряженного состояния пластинки с криволинейными отверстиями / С. А. Калоеров, А. И. Занько // Прикладная механика. – 2017.– Т. 53, № 1.– С. 108–120.
9. Лехницкий С. Г. Анизотропные пластинки / С. Г. Лехницкий.– М.: Гостехиздат, 1957.– 463 с.
10. Калоеров С. А. Комплексные потенциалы теории изгиба многосвязных анизотропных плит / С. А. Калоеров // Теорет. и прикладная механика. – 2012. – № 4 (50). – С. 115 – 136.
11. Калоеров С. А. Двумерное напряженно-деформированное состояние многосвязного анизотропного тела / С. А. Калоеров, Е. С. Горянская // Концентрация напряжений.– К.: А. С. К., 1998.– С. 10–26. (Механика композитов: В 12 т., т. 7).
12. Воеводин В. В. Вычислительные основы линейной алгебры / В. В. Воеводин.– М.:Наука, 1977.– 304 с.
13. Форсайт Дж. Машинные методы математических вычислений / Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Моулер.– М.: Мир, 1969. – 280 с.
14. Калоеров С. А. Определение коэффициентов интенсивности напряжений, индукции и напряженности для многосвязных электроупругих анизотропных сред / С. А. Калоеров // Прикладная механика.– 2007. – Т. 43, № 6. – С. 56–62.

15. Космодамианский А. С. Температурные напряжения в многосвязных пластинках / А. С. Космодамианский, С. А. Калоеров.– К., Донецк: Вища шк., 1983.– 160 с.

Поступила в редакцию 08.02.2018 г.

BENDING OF MULTICONNECTED ANISOTROPIC PLATE UNDER ACTION FOCUSED FORCES IN INTERNAL POINTS

S.A. Kaloerov, A.I. Zanko

Using the methods of complex potentials, expansions of functions in Laurent series and with respect to Faber polynomials and the generalized method of least squares, the problem under consideration is reduced to solving a system of linear algebraic equations. For a circular plate with an elliptical hole, were carried out numerical studies with an analysis of the influence of the geometrical characteristics of the hole, the material of the plate, the method of reinforcement of the contours, and the point of application of the concentrated force on the values of the bending moments.

Keywords: anisotropic plate; complex potentials of the theory of bending plates; Faber polynomials; Laurent series; generalized least squares method; concentrated force.

Калоеров Стефан Алексеевич
д-р физ.-мат. наук, профессор,
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк, профессор кафедры теории упругости и вычислительной математики
E-mail: kaloerov@mail.ru

Kaloerov Stefan Alekseevich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences,
Full Professor,
Donetsk National University, Donetsk

Занько Алена Игоревна
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк, старший преподаватель кафедры теории упругости и вычислительной математики
E-mail: all53700@mail.ru

Zanko Alyona Igorevna
Donetsk National University, Donetsk

УДК 539.3:534.1

РАСПРОСТРАНЕНИЕ НОРМАЛЬНЫХ ВОЛН ВДОЛЬ ТРАНСВЕРСАЛЬНО ИЗОТРОПНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНО ГРАДИЕНТНЫХ ЦИЛИНДРОВ

© 2018. ***И.А. Моисеенко***

Процесс распространения волн описывается полной системой уравнений линейной динамической теории упругости. Модули упругости и плотность материала цилиндра задаются экспоненциально-степенной функцией от радиальной координаты. Общее решение системы дифференциальных уравнений строится в матричной форме в виде разложений радиальных составляющих решеня в равномерно и абсолютно сходящиеся степенные ряды по радиальной координате. Получены дисперсионные соотношения, описывающее спектры гармоник нормальных волн для случаев жестко закрепленной и свободной граничной поверхности. Изучены эффекты влияния параметров радиальной неоднородности на топологию дисперсионных спектров, распределение фазовых и групповых скоростей распространяющихся нормальных волн.

Ключевые слова*:* функционально-градиентные материалы; трансверсально изотропный волновод; нормальные волны; аналитические решения; дисперсионные соотношения.

Введение. Обзор результатов различных исследований, проведенных в последние годы с конструкциями в виде плит и цилиндров из функционально градиентных материалов, представлен в [1–3]. Решение задачи о распространении нормальных упругих волн в трансверсально-изотропных цилиндрах кругового сечения сводится к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами. В случае однородного цилиндра эти уравнения разрешимы через цилиндрические функции, что становится невозможным при переходе к рассмотрению функционально-градиентных материалов. Для построения общих аналитических решений системы дифференциальных уравнений в этом случае плодотворным оказался подход, основанный на задании специального вида функционального закона радиального изменения физико-механических характеристик материала волновода. Таким способом построены в аналитическом виде общие решения и исследованы эффекты влияния фактора неоднородности материала на топологию дисперсионных спектров, фазовых и групповых скоростей распространяющихся осесимметричных нормальных волн в трансверсально-изотропных цилиндрах [4, 5], а также неосесимметричных нормальных волн в цилиндрически ортотропных цилиндрах [6] с экспоненциальным законом радиальной неоднородности материала волновода.

В данной статье указанная методика распространена на более общий случай экспоненциально-степенного закона радиальной неоднородности трансверсально-изотропного материала волновода.

Постановка задачи. Рассматривается волновод в форме протяженного цилиндра радиуса R, изготовленный из трансверсально изотропного материала, имеющий в поперечном сечении форму круга. Волновод в отнесенных к параметру $R_* = R$ безразмерных цилиндрических координатах занимает область V с границей G

$$V = \{r \in [0,1],\ \theta \in [-\pi,\pi],\ z \in (-\infty,\infty)\},\quad G = \{r = 1,\ \theta \in [-\pi,\pi],\ z \in (-\infty,\infty)\}.$$

Математическая модель динамического напряженно-деформированного состояния упругих тел включает систему дифференциальных уравнений движения

$$\partial_r\sigma_{rr}+r^{-1}\partial_\theta\sigma_{r\theta}+\partial_z\sigma_{rz}+r^{-1}\left(\sigma_{rr}-\sigma_{\theta\theta}\right)-\left(\rho R_*^2/c_*\right)\partial_t^2u_r=0,$$
$$\partial_r\sigma_{r\theta}+r^{-1}\partial_\theta\sigma_{\theta\theta}+\partial_z\sigma_{\theta z}+2r^{-1}\sigma_{r\theta}-\left(\rho R_*^2/c_*\right)\partial_t^2u_\theta=0,$$
$$\partial_r\sigma_{rz}+r^{-1}\partial_\theta\sigma_{\theta z}+\partial_z\sigma_{zz}+r^{-1}\sigma_{rz}-\left(\rho R_*^2/c_*\right)\partial_t^2u_z=0, \quad (1)$$

соотношения обобщенного линейного закона Гука

$$\sigma_{rr}=c_{11}\varepsilon_{rr}+c_{12}\varepsilon_{\theta\theta}+c_{13}\varepsilon_{zz}, \quad \sigma_{\theta\theta}=c_{12}\varepsilon_{rr}+c_{11}\varepsilon_{\theta\theta}+c_{13}\varepsilon_{zz},$$
$$\sigma_{zz}=c_{13}\varepsilon_{rr}+c_{13}\varepsilon_{\theta\theta}+c_{33}\varepsilon_{zz}, \quad \sigma_{\theta z}=c_{44}\varepsilon_{\theta z}, \quad \sigma_{rz}=c_{44}\varepsilon_{rz}, \quad \sigma_{r\theta}=c_{66}\varepsilon_{r\theta}, \quad (2)$$

уравнения связи деформаций с перемещениями

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

Во введенных представлениях напряжения и модули упругости $\left(c_{66}=\left(c_{11}-c_{12}\right)/2\right)$ отнесены к нормирующему параметру c_*. Здесь ρ – плотность материала волновода; t – время; $\partial_j=\partial/\partial j$ $\left(j=r,\theta,z,t\right)$.

Представленная модель включает также граничные условия свободной

$$\sigma_{rr}\big|_{(r,\theta,z)\in G}=\sigma_{r\theta}\big|_{(r,\theta,z)\in G}=\sigma_{rz}\big|_{(r,\theta,z)\in G}=0, \quad (4)$$

либо жестко закрепленной поверхности

$$u_r\big|_{(r,\theta,z)\in G}=u_\theta\big|_{(r,\theta,z)\in G}=u_z\big|_{(r,\theta,z)\in G}=0. \quad (5)$$

В поставленной задаче полагается, что материал волновода является функционально-неоднородным в радиальном направлении

$$\rho=\tilde{\rho}\exp\left(f_{\lambda,q}\left(r\right)\right), \quad c_{jp}=\tilde{c}_{jp}\exp\left(f_{\lambda,q}\left(r\right)\right), \quad f_{\lambda,q}\left(r\right)=\lambda r^q. \quad (6)$$

Здесь λ $\left(\lambda\in\mathbb{R}\right)$ и q $\left(q\in\{0\}\cup\mathbb{N}\right)$ – параметры, характеризующие неоднородность материала; $\tilde{\rho}$ и $\tilde{c}_{jp}$ соответственно плотность и нормированные модули упругости однородного материала.

Построение системы рекуррентных уравнений. Для исследования нормальных волн в матричной форме вводятся комплексные представления

$$\mathbf{U}\left(r,\theta,z,t\right)=\exp\left(-\delta f_{\lambda,p}\left(r\right)-i\omega t+i\tilde{k}z\right)\mathbf{T}_1^{(\tau)}\left(\theta\right)\mathbf{U}^{(\tau)}\left(r\right). \quad (7)$$

Здесь δ $\left(\delta\in\mathbb{R}\right)$ – произвольный параметр; $\mathbf{U}\left(r,\theta,z,t\right)$ вектор-столбец с компонентами

$$\mathbf{U}\left(r,\theta,z,t\right)=\left[u_r\left(r,\theta,z,t\right),u_\theta\left(r,\theta,z,t\right),u_z\left(r,\theta,z,t\right)\right]^T;$$

$\mathbf{U}^{(\tau)}\left(r\right)$ – вектор-столбец с амплитудными составляющими вектора перемещений

$$\mathbf{U}^{(\tau)}\left(r\right)=\left[\tilde{u}_r^{(\tau)}\left(r\right),\tilde{u}_\theta^{(\tau)}\left(r\right),\tilde{u}_z^{(\tau)}\left(r\right)\right]^T;$$

$\mathbf{T}_1^{(\tau)}\left(\theta\right)$ – диагональная матрица с отличными от нуля элементами

$$\left[\mathbf{T}_1^{(\tau)}(\theta)\right]_{1,1}=\cos(\tau\theta+\beta),\quad \left[\mathbf{T}_1^{(\tau)}(\theta)\right]_{2,2}=\sin(\tau\theta+\beta),\quad \left[\mathbf{T}_1^{(\tau)}(\theta)\right]_{3,3}=i\cos(\tau\theta+\beta).$$

В приведенных соотношениях и ниже $[\mathbf{X}]_{j,p}$ или $[\mathbf{X}]_j$ $(j,p\in\mathbb{N})$ обозначает элемент соответственно матрицы или вектора. Параметр β $(\beta=0,\pi/2)$ задает независимый тип волновых движений, а именно, условно симметричные относительно плоскости $(\theta=0,z)$ при $\beta=0$

$$u_r(r,-\theta,z,t)=u_r(r,\theta,z,t),\quad u_\theta(r,-\theta,z,t)=-u_\theta(r,\theta,z,t),\quad u_z(r,-\theta,z,t)=u_z(r,\theta,z,t)$$

и условно антисимметричные относительно указанной плоскости при $\beta=\pi/2$

$$u_r(r,-\theta,z,t)=-u_r(r,\theta,z,t),\quad u_\theta(r,-\theta,z,t)=u_\theta(r,\theta,z,t),\quad u_z(r,-\theta,z,t)=-u_z(r,\theta,z,t).$$

Из геометрических соображений на азимутальное волновое число τ накладывается ограничение вида $\tau\in\mathbb{Z}$. Следовательно, задачи исследования осесимметричных крутильных $(\tau=0,\,\beta=\pi/2)$ и продольно-сдвиговых $(\tau=0,\,\beta=0)$, а также неосесимметричных $(\tau\in\mathbb{N},\,\beta=0)$ волн могут рассматриваться независимо. В случае неосесимметричных волн варианты $\beta=0$ и $\beta=\pi/2$ эквивалентны с точностью до поворота цилиндрической системы координат в плоскости (r,θ) на угол $\pi/(2\tau)$.

На основании уравнений (2) и (3) в матричной форме получаются аналогичные (7) комплексные представления

$$\mathbf{S}(r,\theta,z,t)=\exp\left((1-\delta)f_{\lambda,p}(r)-i\omega t+i\tilde{k}z\right)\mathbf{T}_2^{(\tau)}(\theta)\mathbf{S}^{(\tau)}(r),\tag{8}$$

где $\mathbf{T}_2^{(\tau)}(\theta)$ – диагональная матрица с отличными от нуля элементами

$$\left[\mathbf{T}_2^{(\tau)}(\theta)\right]_{j,j}=\cos(\tau\theta+\beta)\quad \left(j=\overline{1,3}\right),\quad \left[\mathbf{T}_2^{(\tau)}(\theta)\right]_{4,4}=i\sin(\tau\theta+\beta),$$
$$\left[\mathbf{T}_2^{(\tau)}(\theta)\right]_{5,5}=i\cos(\tau\theta+\beta),\quad \left[\mathbf{T}_2^{(\tau)}(\theta)\right]_{6,6}=\sin(\tau\theta+\beta);$$

$\mathbf{S}(r,\theta,z,t)$ – вектор-столбец с компонентами

$$\mathbf{S}(r,\theta,z,t)=\left[\sigma_{rr}(r,\theta,z,t),\sigma_{\theta\theta},\sigma_{zz},\,\sigma_{\theta z},\sigma_{rz},\sigma_{r\theta}\right]^T;$$

$\mathbf{S}^{(\tau)}(r)$ – вектор-столбец с компонентами

$$\mathbf{S}^{(\tau)}(r)=\left[\tilde{\sigma}_{rr}^{(\tau)}(r),\tilde{\sigma}_{\theta\theta}^{(\tau)}(r),\tilde{\sigma}_{zz}^{(\tau)}(r),\tilde{\sigma}_{\theta z}^{(\tau)}(r),\tilde{\sigma}_{rz}^{(\tau)}(r),\tilde{\sigma}_{r\theta}^{(\tau)}(r)\right]^T.$$

В матричной форме связь между векторами $\mathbf{U}^{(\tau)}(r)$ и $\mathbf{S}^{(\tau)}(r)$ имеет вид

$$\mathbf{S}^{(\tau)}(r)=\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\bullet\mathbf{U}^{(\tau)}(r).\tag{9}$$

Здесь $\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)$ – матричный оператор с отличными от нуля элементами

$$\left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{1,1}=\tilde{c}_{11}D+\tilde{c}_{12}r^{-1},\quad \left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{2,1}=\tilde{c}_{12}D+\tilde{c}_{11}r^{-1},$$

$$\left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{3,1}=\tilde{c}_{13}\left(D+r^{-1}\right),\quad \left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{1,2}=\tilde{c}_{12}\tau r^{-1},\quad \left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{2,2}=\tilde{c}_{11}\tau r^{-1},$$

$$\left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{3,2}=\tilde{c}_{13}\tau r^{-1},\quad \left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{1,3}=\left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{2,3}=-\tilde{c}_{13}\tilde{k},\quad \left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{3,3}=-\tilde{c}_{33}\tilde{k},$$

$$\left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{4,2}=\left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{5,1}=\tilde{c}_{44}\tilde{k},\quad \left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{4,3}=-\tilde{c}_{44}\tau r^{-1},$$

$$\left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{5,3}=\tilde{c}_{44}D,\quad \left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{6,1}=-\tilde{c}_{66}\tau r^{-1},\quad \left[\mathbf{M}_2^{(\tau)}(r)\right]_{6,2}=\tilde{c}_{66}\left(D-r^{-1}\right),$$

$$D=d_r-\delta\lambda q r^{q-1},\quad d_r=d/dr.$$

С учетом соотношений (7) – (9) на основании системы уравнений (1) получается однородная система обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с переменными коэффициентами

$$\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\bullet\mathbf{U}^{(\tau)}(r)=\mathbf{O},\tag{10}$$

где $\mathbf{O}$ – нулевой вектор-столбец; $\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)$ – матричный оператор с элементами

$$\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{1,1}=\tilde{c}_{11}r^2d_r^2+\tilde{c}_{11}\left(1+(1-2\delta)\lambda q r^q\right)rd_r-\tilde{c}_{11}-\tau^2\tilde{c}_{66}+$$
$$+\left(\Omega^2-\tilde{k}^2\tilde{c}_{44}\right)r^2+\lambda q r^q\left(-\delta q\left(1+(1-\delta)\lambda r^q\right)\tilde{c}_{11}+\tilde{c}_{12}\right),$$

$$\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{1,2}=\tau\left(\left(\tilde{c}_{12}+\tilde{c}_{66}\right)rd_r+\lambda q r^q\left((1-\delta)\tilde{c}_{12}-\delta\tilde{c}_{66}\right)-\left(\tilde{c}_{11}+\tilde{c}_{66}\right)\right),$$

$$\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{1,3}=-\tilde{k}r\left(\left(\tilde{c}_{13}+\tilde{c}_{44}\right)rd_r+\lambda q r^q\left((1-\delta)\tilde{c}_{13}-\delta\tilde{c}_{44}\right)\right),$$

$$\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{2,1}=-\tau\left(\left(\tilde{c}_{12}+\tilde{c}_{66}\right)rd_r-\lambda q r^q\left(\delta\tilde{c}_{12}-(1-\delta)\tilde{c}_{66}\right)+\tilde{c}_{11}+\tilde{c}_{66}\right),$$

$$\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{2,2}=\tilde{c}_{66}\left(r^2d_r^2+\left(1+(1-2\delta)\lambda q r^q\right)rd_r\right)-\tilde{c}_{66}-\tau^2\tilde{c}_{11}+$$
$$+\left(\Omega^2-\tilde{k}^2\tilde{c}_{44}\right)r^2-\lambda q r^q\left(1+\delta q+\delta(1-\delta)\lambda q r^q\right)\tilde{c}_{66},$$

$$\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{2,3}=\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{3,2}=\tilde{k}\tau\left(\tilde{c}_{13}+\tilde{c}_{44}\right)r,$$

$$\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{3,1}=\tilde{k}r\left(\left(\tilde{c}_{13}+\tilde{c}_{44}\right)\left(rd_r+1\right)+\lambda q r^q\left((1-\delta)\tilde{c}_{44}-\delta\tilde{c}_{13}\right)\right),$$

$$\left[\mathbf{M}_3^{(\tau)}(r)\right]_{3,3}=\tilde{c}_{44}\left(r^2d_r^2+\left(1+(1-2\delta)\lambda q r^q\right)rd_r\right)-\tau^2\tilde{c}_{44}+$$
$$\left(\Omega^2-\tilde{k}^2\tilde{c}_{33}\right)r^2-\delta\lambda q^2r^q\left(1+(1-\delta)\lambda r^q\right)\tilde{c}_{44},\quad \Omega^2=\tilde{\rho}\,\omega^2R_*^2/c_*.$$

Для искомых решений уравнений (10) вводятся матричные разложения

$$\mathbf{U}^{(\tau)}(r)=\mathbf{A}_1(r)\sum_{m=0}^{\infty}r^{m+\eta}\,\mathbf{X}_m^{(\tau,\eta)}\qquad \left\|\mathbf{X}_0^{(\tau,\eta)}\right\|\neq 0,\tag{11}$$

а также ограничения на параметр η

$$\begin{aligned}&\eta\in\{-1,0\}\ \ \textit{или}\ \ \Re(\eta)>0,\ \textit{если}\ \left[\mathbf{X}_0^{(\tau,\eta)}\right]_3=0,\\&\eta\in\{0,1\}\ \ \textit{или}\ \ \Re(\eta)>1,\ \textit{если}\ \left[\mathbf{X}_0^{(\tau,\eta)}\right]_3\neq 0.\end{aligned}\tag{12}$$

Разложение (11) с учетом (9) определяет такой вид вектора $\mathbf{S}^{(\tau)}(r)$

$$\mathbf{S}^{(\tau)}(r)=\mathbf{A}_2(r)\sum_{m=0}^{\infty} r^{m+\eta}\,\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\mathbf{X}_m^{(\tau,\eta)}\,. \tag{13}$$

Здесь $\mathbf{A}_j(r)$ $\left(j=\overline{1,2}\right)$ и $\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)$ матрицы с отличными от нуля элементами

$$\left[\mathbf{A}_1(r)\right]_{1,1}=\left[\mathbf{A}_1(r)\right]_{2,2}=r,\quad \left[\mathbf{A}_1(r)\right]_{3,3}=1,$$

$$\left[\mathbf{A}_2(r)\right]_{j,j}=1\quad (j=1,2,3,6),\quad \left[\mathbf{A}_2(r)\right]_{j,j}=r^{-1}\quad (j=4,5),$$

$$\left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{1,1}=(\chi+1)\tilde{c}_{11}+\tilde{c}_{12},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{1,2}=\tau\tilde{c}_{12},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{2,1}=(\chi+1)\tilde{c}_{12}+\tilde{c}_{11},$$

$$\left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{2,2}=\tau\tilde{c}_{11},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{3,1}=(\chi+2)\tilde{c}_{13},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{3,2}=\tau\tilde{c}_{13},$$

$$\left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{1,3}=\left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{2,3}=-\tilde{k}\tilde{c}_{13},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{3,3}=-\tilde{k}\tilde{c}_{33},$$

$$\left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{4,2}=\left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{5,1}=\tilde{k}r^2\tilde{c}_{44},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{4,3}=-\tau\tilde{c}_{44},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{5,3}=\chi\tilde{c}_{44},$$

$$\left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{6,1}=-\tau\tilde{c}_{66},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(\tau,\eta)}(r)\right]_{6,2}=\chi\tilde{c}_{66},\quad \chi=m+\eta-\delta\lambda q r^q\,.$$

В результате подстановки (11) в (10) получается матричное функциональное уравнение

$$\sum_{m=0}^{\infty} r^{m+\eta}\Big(\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\mathbf{X}_m^{(\tau,\eta)}+\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,2)}\mathbf{X}_{m-2}^{(\tau,\eta)}+\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,3)}\mathbf{X}_{m-q}^{(\tau,\eta)}+$$

$$+\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,4)}\mathbf{X}_{m-2-q}^{(\tau,\eta)}+\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,5)}\mathbf{X}_{m-2q}^{(\tau,\eta)}\Big)=\mathbf{O},\quad r\in[0,\infty),\quad \mathbf{X}_j^{(\tau,\eta)}=\mathbf{O}\qquad (j<0).$$

Условие разрешимости данного уравнения, определяющее допустимые значения параметра η, выглядит так

$$\det\left(\mathbf{Q}_0^{(\tau,\eta,1)}\right)=0\,. \tag{14}$$

Искомые коэффициенты $\mathbf{X}_m^{(\tau,\eta)}$ разложений (11), (13) определяются из уравнений

$$\mathbf{Q}_0^{(\tau,\eta,1)}\mathbf{X}_0^{(\tau,\eta)}=\mathbf{O}, \tag{15}$$

$$\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\mathbf{X}_m^{(\tau,\eta)}=-\Big(\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,2)}\mathbf{X}_{m-2}^{(\tau,\eta)}+\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,3)}\mathbf{X}_{m-q}^{(\tau,\eta)}+\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,4)}\mathbf{X}_{m-2-q}^{(\tau,\eta)}+\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,5)}\mathbf{X}_{m-2q}^{(\tau,\eta)}\Big). \tag{16}$$

Здесь $m=1,2,\ldots$; $\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,n)}$ $\left(n=\overline{1,5}\right)$ – квадратные матрицы с ненулевыми элементами

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\right]_{1,1}=\upsilon(\upsilon+2)\tilde{c}_{11}-\tau^2\tilde{c}_{66},\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\right]_{1,2}=\tau\left(\upsilon\tilde{c}_{11}-(\upsilon+2)\tilde{c}_{66}\right),$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\right]_{1,3}=-\upsilon\tau\left(\tilde{c}_{13}+\tilde{c}_{44}\right),\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\right]_{2,1}=\tau\left(\upsilon\tilde{c}_{66}-(\upsilon+2)\tilde{c}_{11}\right),$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\right]_{2,2}=\upsilon(\upsilon+2)\tilde{c}_{66}-\tau^2\tilde{c}_{11},\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\right]_{2,3}=\upsilon\tau\left(\tilde{c}_{13}+\tilde{c}_{44}\right),$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,1)}\right]_{3,3}=\left(\upsilon^2-\tau^2\right)\tilde{c}_{44},\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,2)}\right]_{1,1}=\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,2)}\right]_{2,2}=\Omega^2-\tilde{k}^2\tilde{c}_{44},$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,2)}\right]_{3,1}=\tilde{k}\upsilon\left(\tilde{c}_{13}+\tilde{c}_{44}\right),\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,2)}\right]_{3,2}=\tilde{k}\tau\left(\tilde{c}_{13}+\tilde{c}_{44}\right),$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,2)}\right]_{3,3}=\Omega^2-\tilde{k}^2\tilde{c}_{33},\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,3)}\right]_{1,2}=\lambda q\tau\left(\left(1-\delta\right)\tilde{c}_{11}-\left(2-\delta\right)\tilde{c}_{66}\right),$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,3)}\right]_{1,1}=\lambda q\left(\left(\left(q-2\upsilon-2\right)\delta-q+\upsilon+2\right)\tilde{c}_{11}-2\tilde{c}_{66}\right),$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,3)}\right]_{1,3}=\lambda q\tilde{k}\left(\delta\tilde{c}_{44}-\left(1-\delta\right)\tilde{c}_{13}\right),\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,3)}\right]_{2,1}=\lambda q\tau\left(\delta\tilde{c}_{11}-\left(1+\delta\right)\tilde{c}_{66}\right),$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,3)}\right]_{2,2}=\lambda q\left(\left(q-2\upsilon-2\right)\delta-q-\upsilon\right)\tilde{c}_{66},$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,3)}\right]_{3,3}=\lambda q\left(\left(q-2\upsilon\right)\delta-q+\upsilon\right)\tilde{c}_{44},\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,4)}\right]_{3,1}=\lambda q\tilde{k}\left(\left(1-\delta\right)\tilde{c}_{44}-\delta\tilde{c}_{13}\right),$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,5)}\right]_{1,1}=-\delta\left(1-\delta\right)\lambda^2q^2\tilde{c}_{11},\quad \left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,5)}\right]_{2,2}=-\delta\left(1-\delta\right)\lambda^2q^2\tilde{c}_{66},$$

$$\left[\mathbf{Q}_m^{(\tau,\eta,5)}\right]_{3,3}=-\delta\left(1-\delta\right)\lambda^2q^2\tilde{c}_{44},\quad \upsilon=m+\eta\,.$$

Базисные решения задачи в случае крутильных волн. Осесимметричный случай $\left(\tau=0\right)$ подлежит отдельному рассмотрению, поскольку группа соотношений (7)–(11), (13), (15), (16) распадается две независимые подгруппы, определяющие при $\beta=\pi/2$ решения задачи для крутильных волн, а при $\beta=0$ – для продольно-сдвиговых волн. В случае $\tau=0$ и $\beta=\pi/2$ соотношения (7) и (8) соответственно преобразуются к такому виду

$$u_\theta\left(r,z,t\right)=\exp\left(-\delta f_{\lambda,p}\left(r\right)-i\omega t+i\tilde{k}z\right)\tilde{u}_\theta^{(TW)}\left(r\right),$$

$$\mathbf{S}\left(r,z,t\right)=\exp\left(\left(1-\delta\right)f_{\lambda,p}\left(r\right)-i\omega t+i\tilde{k}z\right)\mathbf{T}_2^{(TW)}\mathbf{S}^{(TW)}\left(r\right),\tag{17}$$

где $\mathbf{S}\left(r,z,t\right)$ – вектор-столбец с ненулевыми компонентами

$$\mathbf{S}\left(r,z,t\right)=\left[\sigma_{\theta z}\left(r,z,t\right),\sigma_{r\theta}\left(r,z,t\right)\right]^T;$$

$\mathbf{S}^{(TW)}\left(r\right)$ – вектор-столбец с амплитудными составляющими ненулевых компонент

$$\mathbf{S}^{(TW)}\left(r\right)=\left[\tilde{\sigma}_{\theta z}^{(TW)}\left(r\right),\tilde{\sigma}_{r\theta}^{(TW)}\left(r\right)\right]^T;$$

$\mathbf{T}_2^{(TW)}$ – диагональная матрица с отличными от нуля элементами

$$\left[\mathbf{T}_2^{(TW)}\right]_{1,1}=i,\quad \left[\mathbf{T}_2^{(TW)}\right]_{2,2}=1.$$

С учетом ограничений (12) в рассматриваемом случае из уравнения (14) однозначно определяется значение параметра $\eta=0$. Тогда соотношения (11), (13) получают вид

$$\tilde{u}_\theta^{(TW)}\left(r\right)=b\tilde{u}_\theta^{(TW,B)}\left(r\right),\quad \mathbf{S}^{(TW)}\left(r\right)=b\mathbf{S}^{(TW,B)}\left(r\right),\tag{18}$$

где

$$\tilde{u}_\theta^{(TW,B)}\left(r\right)=\sum_{m=0}^{\infty}r^{m+1}x_m^{(TW)},\quad \mathbf{S}^{(TW,B)}\left(r\right)=\mathbf{A}_2^{(TW)}\sum_{m=0}^{\infty}r^m x_m^{(TW)}\mathbf{H}_m^{(TW)}\left(r\right).\tag{19}$$

В приведенных соотношениях

$$\mathbf{A}_2^{(TW)} = \begin{bmatrix} r^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_m^{(TW)}(r) = \begin{bmatrix} \tilde{k} r^2 \tilde{c}_{44} \\ \left(m - \delta\lambda q r^q\right)\tilde{c}_{66} \end{bmatrix},$$

b – произвольная постоянная. Коэффициенты $x_m^{(TW)}$ определяются полученными из (16) явными рекуррентными соотношениями

$$x_m^{(TW)} = 0 \quad (m < 0), \quad x_0^{(TW)} = 1,$$
$$x_m^{(TW)} = w_m^{(TW,1)} x_{m-2}^{(TW)} + w_m^{(TW,2)} x_{m-q}^{(TW)} + w_m^{(TW,3)} x_{m-2q}^{(TW)} \quad (m = 1,2,...). \tag{20}$$

Здесь

$$w_m^{(TW,1)} = -\kappa^2 / \left(m(m+2)\right), \quad w_m^{(TW,2)} = \lambda q \left(\delta(2m+2-q) - m + q\right) / \left(m(m+2)\right),$$
$$w_m^{(TW,3)} = \delta(1-\delta)\lambda^2 q^2 / \left(m(m+2)\right), \quad \kappa^2 = \left(\Omega^2 - \tilde{k}^2 \tilde{c}_{44}\right) / \tilde{c}_{66}. \tag{21}$$

Следует отметить, что при $m \to \infty$ справедливы следующие асимптотические оценки для коэффициентов в рекуррентных соотношениях (20)

$$w_m^{(TW,1)} \approx -m^{-2}\kappa^2, \quad w_m^{(TW,2)} \approx m^{-1}(2\delta - 1)\lambda q, \quad w_m^{(TW,3)} \approx m^{-2}\delta(1-\delta)\lambda^2 q^2,$$

непосредственным следствием которых является абсолютная и равномерная сходимость разложений в (19) на любом конечном отрезке $r \in [0, r_*]$ $(r_* < \infty)$.

В рассматриваемом случае крутильных волн в системе дифференциальных уравнений (10) остается одно уравнение

$$\left[\mathbf{M}_3^{(0)}(r)\right]_{2,2} \bullet \tilde{u}_\theta^{(TW)}(r) = 0. \tag{22}$$

В случае однородного материала $(q = 0)$ уравнение (22) представляет собой уравнение Бесселя. При $q = 1$ и $q = 2$ (неоднородный материал) это уравнение допускает решение в специальных функциях.

При $q = 1$ уравнение (22) получает вид

$$\left(d_r^2 + \left((1-2\delta)\lambda + r^{-1}\right)d_r + \kappa^2 - \delta(1-\delta)\lambda^2 - (1+\delta)\lambda r^{-1} - r^{-2}\right)\tilde{u}_\theta^{(TW)}(r) = 0.$$

После замен в данном уравнении

$$\tilde{u}_\theta^{(TW)}(r) = e_1 f(r), \quad r = \xi/\gamma, \quad e_1 = \exp\left((\delta - 1/2)\lambda r\right)/\sqrt{r}$$

получаем уравнение Уиттекера [7]

$$\left(d_\xi^2 + -1/4 + \nu/\xi + \left(1/4 - \mu^2\right)/\xi^2\right) f(\xi) = 0$$

с параметрами $\nu = -3\lambda/(2\gamma)$ и $\mu = 1$, $\gamma = \sqrt{\lambda^2 - 4\kappa^2}$. Из соотношений (18) имеем

$$\tilde{u}_\theta^{(TW,B)}(r) = e_1 \left[\mathbf{Y}_1^{(TW)}(r)\right]_1, \quad \mathbf{S}^{(TW,B)}(r) = \mathbf{P}_1^{(TW,2)}(r)\mathbf{Y}_1^{(TW)}(r). \tag{23}$$

Здесь

$$\mathbf{P}_1^{(TW)} = e_1 \begin{bmatrix} \tilde{k}\tilde{c}_{44} & 0 \\ \left(1-\lambda\gamma^{-1}\right)\left(\gamma-3r^{-1}\right)\tilde{c}_{66}/2 & 3\left(1-\lambda\gamma^{-1}\right)r^{-1}\tilde{c}_{66}/2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Y}_1^{(TW)}(r) = \begin{bmatrix} M_{\nu,\mu}(\gamma r) \\ M_{\nu+1,\mu}(\gamma r) \end{bmatrix}.$$

При $q = 2$ в уравнение (22) принимает вид

$$\left(d_r^2 + \left(2(1-2\delta)\lambda r + r^{-1}\right)d_r - 4\delta(1-\delta)\lambda^2 r^2 + \kappa^2 - 2(1+2\delta)\lambda - r^{-2}\right)\tilde{u}_\theta^{(TW)}(r) = 0.$$

Вводятся замены

$$\tilde{u}_\theta^{(TW)}(r) = e_2 f(r), \quad r = \sqrt{\xi/\lambda}, \quad e_2 = \exp\left((\delta - 1/2)\lambda r^2\right)/r.$$

В результате данное уравнение также преобразуется в уравнение Уиттекера с параметрами $\nu = \kappa^2/(4\lambda) - 1$ и $\mu = 1/2$. С учетом (18) в этом случае получается

$$\tilde{u}_\theta^{(TW,B)}(r) = e_2\left[\mathbf{Y}_2^{(TW)}(r)\right]_1, \quad \mathbf{S}^{(TW,B)}(r) = \mathbf{P}_2^{(TW,2)}(r)\mathbf{Y}_2^{(TW)}(r), \tag{24}$$

где

$$\mathbf{P}_2^{(TW,2)} = e_2 \begin{bmatrix} \tilde{k}\tilde{c}_{44} & 0 \\ \left(\delta\lambda(2r-1) - 2(\nu+1)r^{-1}\right)\tilde{c}_{66} & 2(\nu+1)r^{-1}\tilde{c}_{66} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Y}_2^{(TW)}(r) = \begin{bmatrix} M_{\nu,\mu}(\lambda r^2) \\ M_{\nu+1,\mu}(\lambda r^2) \end{bmatrix},$$

$M_{\nu,\mu}(\xi)$ – функция Уиттекера.

Соотношения (17)–(20) $(q \in \mathbb{N})$, или (17), (18), (23) $(q = 1)$, или (17), (18), (24) $(q = 2)$ определяют базисные решения задачи в случае крутильных волн. При этом следует отметить, что соотношения (23) и (24) для $\delta = 1/2$ не содержат экспоненциальной составляющей. Этот факт может рассматриваться с позиций улучшения сходимости разложений (19). Численный эксперимент подтвердил сделанное предположение. В качестве однородного материала выбирался Zn $(c_* = 10^{10}\ H/м^2)$

$$\left\{\tilde{c}_{11} = 16{,}35;\ \tilde{c}_{12} = 2{,}64;\ \tilde{c}_{13} = 5{,}17;\ \tilde{c}_{33} = 5{,}31;\ \tilde{c}_{44} = 3{,}78;\ \tilde{\rho} = 7134\ кг/м^3\right\}, \tag{25}$$

а характеристики неоднородности задавались так: $\tilde{k} = 2$; $\Omega = 1$; $\lambda = \ln(3/2)$. В табл. 1, 2 приведены порядки значений $\left|x_m^{(TW)}\right|$ соответственно для $q = 1$ и $q = 6$.

Таблица 1

δ	m					
	0	20	40	60	80	100
–1	1	10^{-14}	10^{-38}	10^{-66}	10^{-97}	10^{-130}
0	1	10^{-17}	10^{-42}	10^{-72}	10^{-105}	10^{-140}
0,5	1	10^{-17}	10^{-44}	10^{-75}	10^{-109}	10^{-145}
1	1	10^{-16}	10^{-41}	10^{-71}	10^{-104}	10^{-139}
2	1	10^{-14}	10^{-38}	10^{-65}	10^{-96}	10^{-129}

Таблица 2

δ	m					
	0	20	40	60	80	100
–1	1	10^{-3}	10^{-6}	10^{-11}	10^{-14}	10^{-18}
0	1	10^{-4}	10^{-9}	10^{-14}	10^{-18}	10^{-24}
0,5	1	10^{-4}	10^{-9}	10^{-14}	10^{-20}	10^{-27}
1	1	10^{-3}	10^{-7}	10^{-11}	10^{-16}	10^{-22}
2	1	10^{-2}	10^{-5}	10^{-8}	10^{-12}	10^{-17}

Базисные решения задачи в случае продольно-сдвиговых волн. При $\tau = 0$ и $\beta = 0$ представления (7) и (8) соответственно преобразуются к такому виду

$$\mathbf{U}(r,z,t) = \exp\left(-\delta f_{\lambda,p}(r) - i\omega t + i\tilde{k}z\right)\mathbf{T}_1^{(LSW)}\mathbf{U}^{(LSW)}(r),$$
$$\mathbf{S}(r,z,t) = \exp\left((1-\delta) f_{\lambda,p}(r) - i\omega t + i\tilde{k}z\right)\mathbf{T}_2^{(LSW)}\mathbf{S}^{(LSW)}(r). \qquad (26)$$

Здесь $\mathbf{U}(r,z,t)$ и $\mathbf{S}(r,z,t)$ – вектор-столбцы с ненулевыми компонентами

$$\mathbf{U}(r,z,t) = \left[u_r(r,z,t), u_z(r,z,t)\right]^T, \quad \mathbf{S}(r,z,t) = \left[\sigma_{rr}(r,z,t), \sigma_{\theta\theta}, \sigma_{zz}, \sigma_{rz}\right]^T;$$

$\mathbf{U}^{(LSW)}(r)$ и $\mathbf{S}^{(LSW)}(r)$ – вектор-столбцы с ненулевыми компонентами

$$\mathbf{U}^{(LSW)}(r) = \left[\tilde{u}_r^{(LSW)}(r), \tilde{u}_z^{(LSW)}(r)\right]^T,$$
$$\mathbf{S}^{(LSW)}(r) = \left[\tilde{\sigma}_{rr}^{(LSW)}(r), \tilde{\sigma}_{\theta\theta}^{(LSW)}(r), \tilde{\sigma}_{zz}^{(LSW)}(r), \tilde{\sigma}_{rz}^{(LSW)}(r)\right]^T;$$

$\mathbf{T}_1^{(LSW)}$ и $\mathbf{T}_2^{(LSW)}$ – диагональные матрицы с отличными от нуля элементами

$$\left[\mathbf{T}_1^{(LSW)}\right]_{1,1} = 1, \quad \left[\mathbf{T}_1^{(LSW)}\right]_{2,2} = i, \quad \left[\mathbf{T}_2^{(LSW)}\right]_{j,j} = 1 \quad \left(j = \overline{1,3}\right), \quad \left[\mathbf{T}_2^{(LSW)}\right]_{4,4} = i.$$

Из уравнения (14) с учетом ограничений (12) однозначно определяется значение параметра $\eta = 0$, которому соответствуют два различных векторных решения уравнения (15) $[b_1, 0]^T$ и $[0, b_2]^T$, где b_j $\left(j = \overline{1,2}\right)$ – произвольные постоянные. Следовательно, соотношения (11), (13) получают вид

$$\mathbf{U}^{(LSW)}(r) = \mathbf{U}^{(LSW,B)}(r)\mathbf{B}, \quad \mathbf{S}^{(LSW)}(r) = \mathbf{S}^{(LSW,B)}(r)\mathbf{B}, \qquad (27)$$

где $\mathbf{B}$ – вектор-столбец второго порядка с произвольными постоянными компонентами; $\mathbf{U}^{(LSW,B)}(r)$ и $\mathbf{S}^{(LSW,B)}(r)$ – матричные разложения следующего вида

$$\mathbf{U}^{(LSW,B)} = \mathbf{A}_1^{(LSW)}(r)\sum_{m=0}^{\infty} r^m \mathbf{X}_m^{(LSW)},$$
$$\mathbf{S}^{(LSW,B)} = \mathbf{A}_2^{(LSW)}(r)\sum_{m=0}^{\infty} r^m \mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\mathbf{X}_m^{(LSW)}. \qquad (28)$$

Здесь $\mathbf{A}_j^{(LSW)}(r)$ $(j=1,2)$ и $\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)$ – соответственно диагональные и прямоугольная матрицы с отличными от нуля элементами

$$\left[\mathbf{A}_1^{(LSW)}(r)\right]_{1,1}=r,\quad \left[\mathbf{A}_1^{(LSW)}(r)\right]_{2,2}=1,\quad \left[\mathbf{A}_2^{(LSW)}(r)\right]_{j,j}=1\quad \left(j=\overline{1,3}\right),$$

$$\left[\mathbf{A}_2^{(LSW)}(r)\right]_{4,4}=r^{-1},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\right]_{1,1}=(\chi+1)\tilde{c}_{11}+\tilde{c}_{12},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\right]_{1,2}=-\tilde{k}\tilde{c}_{13},$$

$$\left[\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\right]_{2,1}=(\chi+1)\tilde{c}_{12}+\tilde{c}_{11},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\right]_{2,2}=-\tilde{k}\tilde{c}_{13},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\right]_{3,1}=(\chi+2)\tilde{c}_{13},$$

$$\left[\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\right]_{3,2}=-\tilde{k}\tilde{c}_{33},\quad \left[\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\right]_{4,1}=\tilde{k}\tilde{c}_{44}r^2,\quad \left[\mathbf{H}_m^{(LSW)}(r)\right]_{4,2}=\chi\tilde{c}_{44},\quad \chi=m-\delta\lambda q r^q.$$

Поскольку

$$\det\left(\mathbf{R}_m^{(1)}\right)=m^3(m+2)\tilde{c}_{11}\tilde{c}_{44}\neq 0\qquad (m\geq 1),$$

следовательно, матричные коэффициенты $\mathbf{X}_m^{(LSW)}$ определяются полученными из (16) явными рекуррентными соотношениями

$$\mathbf{X}_m^{(LSW)}=\mathbf{O}\quad (m<0),\qquad \mathbf{X}_0^{(LSW)}=\mathbf{E},$$

$$\mathbf{X}_m^{(LSW)}=\mathbf{W}_m^{(LSW,1)}\mathbf{X}_{m-2}^{(LSW)}+\mathbf{W}_m^{(LSW,2)}\mathbf{X}_{m-q}^{(LSW)}+\mathbf{W}_m^{(LSW,3)}\mathbf{X}_{m-2-q}^{(LSW)}+\mathbf{W}_m^{(LSW,4)}\mathbf{X}_{m-2q}^{(LSW)}.\quad (29)$$

Здесь $m=1,2,...$; $\mathbf{O}$ и $\mathbf{E}$ – нулевая и единичная матрицы второго порядка;

$$\mathbf{W}_m^{(LSW,j)}=-\left(\left[\mathbf{Q}_m^{(0,0,1)}\right]_{(1,3),(1,3)}\right)^{-1}\left[\mathbf{Q}_m^{(0,0,j+1)}\right]_{(1,3),(1,3)}\qquad \left(j=\overline{1,4}\right).$$

В приведенных соотношениях и ниже обозначение $[\mathbf{X}]_{(p_1,p_2,...,p_m),(s_1,s_2,...,s_n)}$ используется для определения подматрицы матрицы $\mathbf{X}$.

Соотношения (26)–(28) определяют базисные решения задачи в случае продольно-сдвиговых волн. Следует отметить, что при $m\to\infty$ справедливы следующие асимптотические оценки для норм матричных коэффициентов в рекуррентных представлениях (29)

$$\left\|\mathbf{W}_m^{(LSW,1)}\right\|\approx m^{-1}\left|\tilde{k}\right|\left(1+\tilde{c}_{13}/\tilde{c}_{44}\right),\quad \left\|\mathbf{W}_m^{(LSW,2)}\right\|\approx m^{-1}q\sqrt{2}\left|\lambda(1-2\delta)\right|,$$

$$\left\|\mathbf{W}_m^{(LSW,3)}\right\|\approx m^{-2}q\left|\lambda\tilde{k}\left(\delta\left(1+\tilde{c}_{13}/\tilde{c}_{44}\right)-1\right)\right|,\quad \left\|\mathbf{W}_m^{(LSW,4)}\right\|\approx m^{-2}\lambda^2q^2\sqrt{2}\left|\delta(1-\delta)\right|,$$

следствием которых является абсолютная и равномерная сходимость разложений в (28) на любом конечном отрезке $r\in[0,r_*]$ $(r_*<\infty)$. В качестве нормы матриц здесь и ниже используется мультипликативная согласованная эвклидова норма [8].

В случае продольно-сдвиговых волн также проводился численный эксперимент, подтвердивший оптимальность выбора значения параметра $\delta=1/2$ для ускорения сходимости разложений (28).

Базисные решения задачи в неосесимметричном случае. При $\tau\in\mathbb{N}$ уравнение (14) принимает вид

$$\left(\eta^2-\tau^2\right)^2\left((\eta+2)^2-\tau^2\right)\tilde{c}_{11}\tilde{c}_{44}\tilde{c}_{66}=0.$$

С учетом ограничений (12) из данного уравнения определяются два допустимые значения параметра $\eta = \tau$ и $\eta = \tau - 2$. В случае $\eta = \tau$ уравнение (15) с точностью до произвольного скалярного множителя имеет два различных решения

$$\mathbf{X}_0^{(\tau,\tau,1)} = \left[1, -1, 2\left(\tilde{c}_{11} + \tilde{c}_{66}\right) \Big/ \left(\tilde{k}\left(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44}\right)\right)\right]^T,$$

$$\mathbf{X}_0^{(\tau,\tau,2)} = \left[1, 1, 2(\tau+1)\left(\tilde{c}_{11} - \tilde{c}_{66}\right) \Big/ \left(\tilde{k}\left(\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44}\right)\right)\right]^T. \tag{30}$$

Рекуррентные уравнения (16) с учетом того, что

$$\det\left(\mathbf{Q}_m^{(\tau,\tau,1)}\right) = m(m+2)(m+2\tau)^2(m+2\tau+2)\tilde{c}_{11}\tilde{c}_{44}\tilde{c}_{66} \neq 0 \qquad (m \geq 1)$$

преобразуются в явные рекуррентные соотношения для определения последующих векторных коэффициентов разложений в (11), (13) вида

$$\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau,j)} = \mathbf{O} \qquad (m < 0),$$

$$\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau,j)} = \mathbf{W}_m^{(\tau,1,1)}\mathbf{X}_{m-2}^{(\tau,\tau,j)} + \mathbf{W}_m^{(\tau,1,2)}\mathbf{X}_{m-q}^{(\tau,\tau,j)} + \mathbf{W}_m^{(\tau,1,3)}\mathbf{X}_{m-2-q}^{(\tau,\tau,j)} + \mathbf{W}_m^{(\tau,1,4)}\mathbf{X}_{m-2q}^{(\tau,\tau,j)} \quad (m = 1, 2, \ldots)$$

$$(j = 1, 2). \tag{31}$$

Здесь $\mathbf{O}$ – нулевой вектор-столбец;

$$\mathbf{W}_m^{(\tau,1,j)} = -\left(\mathbf{Q}_m^{(\tau,\tau,1)}\right)^{-1}\mathbf{Q}_m^{(\tau,\tau,j+1)} \qquad \left(j = \overline{1,4}\right).$$

В случае $\eta = \tau - 2$ из уравнения (15) с точностью до произвольного скалярного множителя определяется третье начальное значение для рекуррентных уравнений (16)

$$\mathbf{X}_0^{(\tau,\tau-2)} = [1, -1, 0]^T. \tag{32}$$

Поскольку

$$\det\left(\mathbf{Q}_m^{(\tau,\tau-2,1)}\right) = m(m-2)^2(m+2\tau)\left(m+2(\tau-1)\right)^2\tilde{c}_{11}\tilde{c}_{44}\tilde{c}_{66}$$

обращается в нуль при $m = 2$, следовательно, рекуррентные уравнения (16) для $\eta = \tau - 2$ требуют отдельного рассмотрения в случаях $m = 1$, $m = 2$ и $m \geq 3$. Полагая

$$\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau-2)} = \mathbf{O} \quad (m < 0) \tag{33}$$

при $m = 1$ решение уравнений (16) записывается так

$$\mathbf{X}_1^{(\tau,\tau-2)} = -\left(\mathbf{Q}_1^{(\tau,\tau-2,1)}\right)^{-1}\mathbf{Q}_1^{(\tau,\tau-2,3)}\mathbf{X}_{1-q}^{(\tau,\tau-2)}. \tag{34}$$

При $m = 2$ система линейных уравнений третьего порядка, соответствующая матричному уравнению из (16)

$$\mathbf{Q}_2^{(\tau,\tau-2,1)}\mathbf{X}_2^{(\tau,\tau-2)} = \mathbf{Z},$$

$$\mathbf{Z} = -\left(\mathbf{Q}_2^{(\tau,\tau-2,2)}\mathbf{X}_0^{(\tau,\tau-2)} + \mathbf{Q}_2^{(\tau,\tau-2,3)}\mathbf{X}_{2-q}^{(\tau,\tau-2)} + \mathbf{Q}_2^{(\tau,\tau-2,5)}\mathbf{X}_{2-2q}^{(\tau,\tau-2)}\right) \tag{35}$$

имеет вырожденную матрицу характерной структуры

$$\left[\mathbf{Q}_2^{(\tau,\tau-2,1)}\right]_{1,j} + \left[\mathbf{Q}_2^{(\tau,\tau-2,1)}\right]_{2,j} = 0, \quad \left[\mathbf{Q}_2^{(\tau,\tau-2,1)}\right]_{3,j} = 0 \quad \left(j = \overline{1,3}\right).$$

Отсюда следует, что условием существования решения уравнения (35) будет

$$[\mathbf{Z}]_1 + [\mathbf{Z}]_2 = 0, \quad [\mathbf{Z}]_3 = 0. \tag{36}$$

При выполнении (36) уравнение (35) имеет бесконечное множество решений, из которых в качестве искомого подходит любое, например, с точностью до произвольного скалярного множителя записанное так

$$\mathbf{X}_2^{(\tau,\tau-2)} = \left[0, 0, [\mathbf{Z}]_1 \Big/ \left[\mathbf{Q}_2^{(\tau,\tau-2,1)}\right]_{1,3}\right]^T. \tag{37}$$

Следует отметить, что условие (36) выполняется тождественно для $q \neq 1$ $\left(\mathbf{X}_1^{(\tau,\tau-2)} \equiv \mathbf{O}\right)$, а при $q = 1$ $\left(\mathbf{X}_1^{(\tau,\tau-2)} \neq \mathbf{O}\right)$ принимает вид

$$[\mathbf{Z}]_1 + [\mathbf{Z}]_2 = -4\lambda^2\left(\tau^2 - 1\right)\left(1 - \tilde{c}_{66}/\tilde{c}_{11}\right)\tilde{c}_{66} \Big/ \left(4\tau^2 - 1\right) = 0, \quad [\mathbf{Z}]_3 \equiv 0.$$

Таким образом, построение решения уравнений (16) при $q = 1$ возможно только для $\tau = 1$. С учетом указанных ограничений

$$(\tau, q) \in \{(1,1)\} \cup \mathbb{N} \times \left(\mathbb{N} \setminus \{1\} \cup \{0\}\right) \tag{38}$$

искомые решения уравнений (16) с учетом (32)–(34) и (37) определяются явными рекуррентными соотношениями

$$\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau-2)} = \mathbf{W}_m^{(\tau,2,1)}\mathbf{X}_{m-2}^{(\tau,\tau-2)} + \mathbf{W}_m^{(\tau,2,2)}\mathbf{X}_{m-q}^{(\tau,\tau-2)} + \mathbf{W}_m^{(\tau,2,3)}\mathbf{X}_{m-2-q}^{(\tau,\tau-2)} + \mathbf{W}_m^{(\tau,2,4)}\mathbf{X}_{m-2q}^{(\tau,\tau-2)}. \tag{39}$$

Здесь $m = 3, 4, \ldots$;

$$\mathbf{W}_m^{(\tau,2,j)} = -\left(\mathbf{Q}_m^{(\tau,\tau-2,1)}\right)^{-1}\mathbf{Q}_m^{(\tau,\tau-2,j+1)} \quad \left(j = \overline{1,4}\right).$$

Окончательно соотношения (11), (13) принимают вид

$$\mathbf{U}^{(\tau)}(r) = \mathbf{U}^{(\tau,B)}(r)\mathbf{B}, \quad \mathbf{S}^{(\tau)}(r) = \mathbf{S}^{(\tau,B)}(r)\mathbf{B}, \tag{40}$$

где $\mathbf{B}$ – вектор-столбец с произвольными постоянными компонентами; $\mathbf{U}^{(\tau,B)}(r)$ и $\mathbf{S}^{(\tau,B)}(r)$ – матричные разложения следующего вида

$$\mathbf{U}^{(\tau,B)}(r) = \mathbf{A}_1(r)\sum_{m=0}^{\infty} r^{m+\tau}\left[\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau,1)}, \mathbf{X}_m^{(\tau,\tau,2)}, r^{-2}\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau-2)}\right],$$

$$\mathbf{S}^{(\tau,B)}(r) = \mathbf{A}_2(r)\sum_{m=0}^{\infty} r^{m+\tau}\left[\mathbf{H}_m^{(\tau)}(r)\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau,1)}, \mathbf{H}_m^{(\tau)}(r)\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau,2)}, r^{-2}\mathbf{H}_m^{(\tau-2)}(r)\mathbf{X}_m^{(\tau,\tau-2)}\right]. \tag{41}$$

Соотношения (7), (8), (40), (41) при выполнении ограничений (38) определяют базисные решения задачи в случае неосесимметричных волн.

Справедливость следующих асимптотических оценок при $m \to \infty$ для норм матричных коэффициентов в рекуррентных соотношениях (31) и (39)

$$\left\|\mathbf{W}_m^{(\tau,j,1)}\right\| \approx m^{-1}\left|\tilde{k}\right|\left(1 + \tilde{c}_{13}/\tilde{c}_{44}\right), \quad \left\|\mathbf{W}_m^{(\tau,j,2)}\right\| \approx m^{-1}q\sqrt{3}\left|\lambda(1 - 2\delta)\right|,$$

$$\left\|\mathbf{W}_m^{(\tau,j,3)}\right\| \approx m^{-2}q\left|\lambda\tilde{k}\left(\delta\left(1+\tilde{c}_{13}/\tilde{c}_{44}\right)-1\right)\right|, \quad \left\|\mathbf{W}_m^{(\tau,j,4)}\right\| \approx m^{-2}\lambda^2 q^2\sqrt{3}\left|\delta\left(1-\delta\right)\right| \quad \left(j=1,2\right)$$

обеспечивает абсолютную и равномерную сходимость разложений в (41) на любом конечном отрезке $r \in \left[0, r_*\right]$ $\left(r_* < \infty\right)$.

Дисперсионные соотношения. В рассмотренных случаях волновых процессов граничные условия свободной (4) либо жестко закрепленной (5) граничной поверхности соответственно порождают дисперсионное уравнение, определяющее спектр задачи, а также уравнение для определения неизвестного векторного коэффициента $\mathbf{B}$ (продольно-сдвиговые и неосесимметричные волны). В случае крутильных волн на основании базисных решений (17)–(20) $\left(q \in \mathbb{N}\right)$, или (17), (18), (23) $\left(q=1\right)$, или (17), (18), (24) $\left(q=2\right)$ соответственно получаются

$$\left[\mathbf{S}^{(TW,B)}\left(1\right)\right]_2 = 0 \quad \text{либо} \quad \tilde{u}_\theta^{(TW,B)}\left(1\right) = 0, \quad b = 1. \tag{42}$$

В случае продольно-сдвиговых волн на основании базисных решений (26)–(28) соответственно получаются

$$\begin{gathered}\det\left(\left[\mathbf{S}^{(LSW,B)}\left(1\right)\right]_{(1,4),(1,2)}\right) = 0, \\ \left[\mathbf{S}^{(LSW,B)}\left(1\right)\right]_{(1,4),(1,2)}\mathbf{B} = \mathbf{O};\end{gathered} \quad \text{либо} \quad \begin{gathered}\det\left(\mathbf{U}^{(LSW,B)}\left(1\right)\right) = 0, \\ \mathbf{U}^{(LSW,B)}\left(1\right)\mathbf{B} = \mathbf{O}.\end{gathered} \tag{43}$$

В случае неосесимметричных волн на основании базисных решений (7), (8), (40), (41) соответственно получаются

$$\begin{gathered}\det\left(\left[\mathbf{S}^{(\tau,B)}\left(1\right)\right]_{(1,5,6),(1,2,3)}\right) = 0, \\ \left[\mathbf{S}^{(\tau,B)}\left(1\right)\right]_{(1,5,6),(1,2,3)}\mathbf{B} = \mathbf{O};\end{gathered} \quad \text{либо} \quad \begin{gathered}\det\left(\mathbf{U}^{(\tau,B)}\left(1\right)\right) = 0, \\ \mathbf{U}^{(\tau,B)}\left(1\right)\mathbf{B} = \mathbf{O}.\end{gathered} \tag{44}$$

Следует отметить, что в случае крутильных волн специфика рассмотренного варианта закона радиальной неоднородности физико-механических свойств материала волновода (6) с учетом соотношений (19)–(21) влечет за собой опосредованную зависимость решений (42) от нормированных параметров волны Ω и $\tilde{k}$ через определенный в (21) параметр κ. Следствием этого является, во-первых, характерная структура спектра бегущих нормальных волн как множества кривых вида $\Omega_j\left(\tilde{k}\right) = \sqrt{\tilde{c}_{66}\kappa_j^2 + \tilde{c}_{44}\tilde{k}^2}$ $\left(j=\overline{1,\infty}\right)$, где значения $\sqrt{\tilde{c}_{66}}\,\kappa_j\left(\lambda,q,\delta\right)$ по физическому смыслу являются критическими частотами для мод волн указанного типа, во-вторых, неизменность предельных при $\tilde{k} \to \infty$ значений параметров скоростей объемных сдвиговых волн при любых значениях параметров λ, q и δ. Последнее утверждение, в частности, определяет независимость асимптотического поведения мод нормальных волн кручения в высокочастотном коротковолновом диапазоне от указанных параметров.

Анализ результатов численного эксперимента. При численном эксперименте значение параметра δ бралось фиксированным $\delta = 1/2$, а в качестве однородного $\left(\lambda,q\right) = \left(0,0\right)$ материала цилиндра был выбран Zn (25). Расчет фрагментов спектров бегущих крутильных (42), продольно-сдвиговых (43) и неосесимметричных $\tau = 1$ (44) нормальных волн проводился в диапазонах изменения нормализованной частоты

$\omega a c_t^{-1} \in [0;80]$ и нормализованного волнового числа $ka \in [0;45]$ для случаев однородного $(\lambda, q) = (0,0)$ и неоднородных $(\lambda, q) \in \{(\ln(3/2),1),(\ln(3/2),6)\}$ цилиндров со свободной граничной поверхностью. Нормирующие параметры a и c_t с размерностью соответственно длины и скорости для всех рисунков имеют фиксированное значение $a = R_*$ и $c_t = \sqrt{c_*/\tilde{\rho}}$.

Ниже представлены спектры распространяющихся продольно-сдвиговых (рис. 1) и неосесимметричных $\tau = 1$ (рис. 2) нормальных волн в протяженных цилиндрах с параметрами неоднородности $(\lambda, q) = (\ln(3/2),6)$.

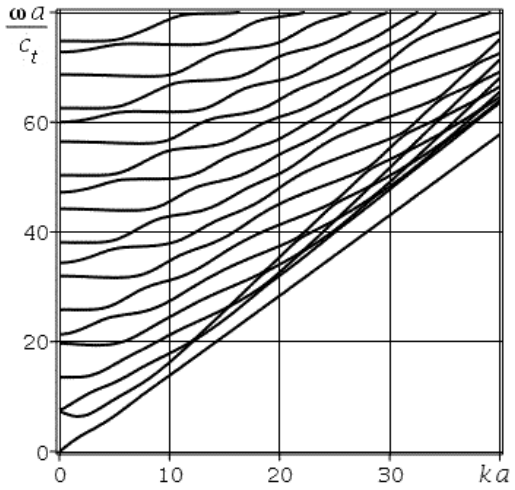


Рис. 1

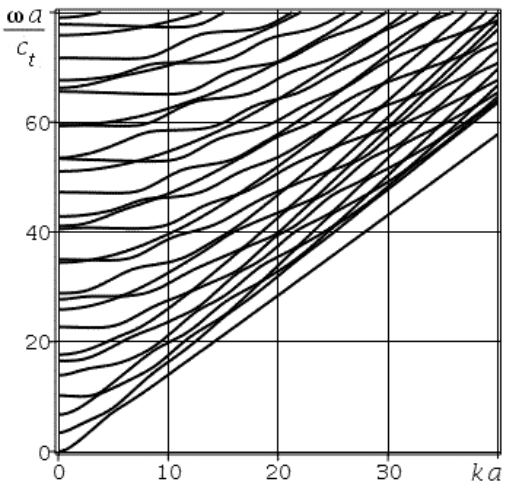


Рис. 2

Места визуального контакта мод характеризуют зоны их локального сближения и взаимного отталкивания. Сравнительный анализ всех построенных спектров показал общность качественной топологической картины мод распространяющихся волн, при этом отмечается локальное количественное влияние характера неоднородности на поведение отдельных мод.

Для анализа количественных различий полученных спектров использовалась функция сравнения парных по номеру в соответствующих спектрах мод $\Delta\Omega(ka) = \left(\omega_{\lambda,q}(ka) - \omega_{0,0}(ka)\right)a/c_t$. Результаты для участвующих в сравнении пар волноводов "неоднородный – однородный цилиндр" представлены для пяти низших мод, порядковый номер сопоставляемых мод визуализировался уникальным в рамках рисунка типом линии. Ниже приведены результаты сравнений для пар волноводов с параметрами неоднородности $(\lambda, q) = (\ln(3/2),1)$ и $(\lambda, q) = (\ln(3/2),6)$: в случае крутильных волн соответственно рис. 3 и рис. 4; в случае продольно-сдвиговых волн соответственно рис. 5 и рис. 6; в случае неосесимметричных $(\tau = 1)$ волн соответственно рис. 7 и рис. 8. В качестве закономерностей, выявленных в исследованных диапазонах изменения волновых параметров для крутильных волн отмечается системное смещение по отношению к однородному волноводу всех мод в область более высоких частот при значениях параметров неоднородности $(\lambda, q) = (\ln(3/2),1)$ и в область более низких частот при значениях параметров неоднородности $(\lambda, q) = (\ln(3/2),6)$, а также общая тенденция асимптотического

приближения к модам однородного волновода в высокочастотном коротковолновом диапазоне.

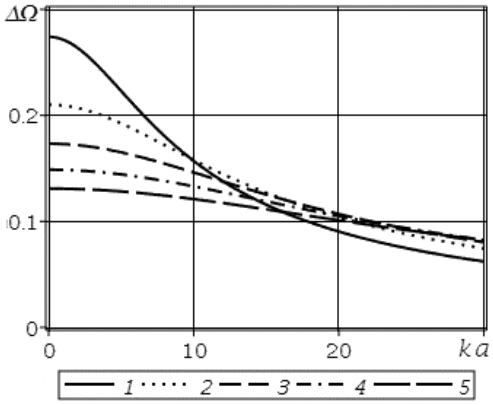


Рис. 3

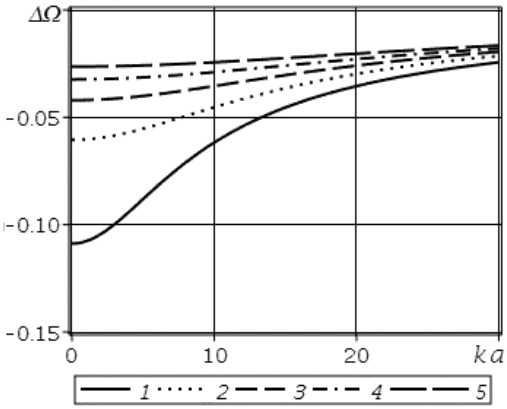


Рис. 4

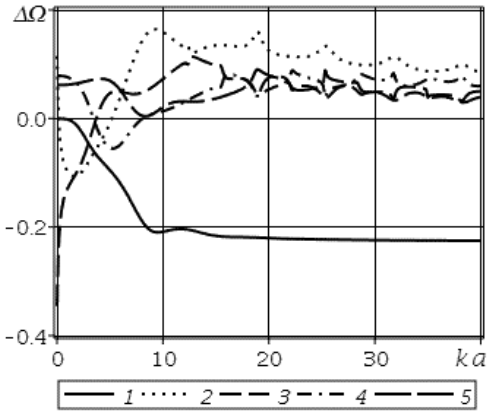


Рис. 5

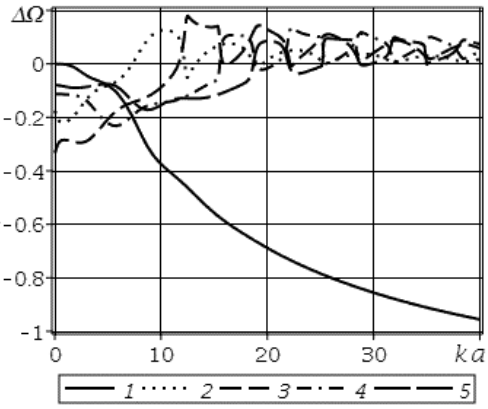


Рис. 6

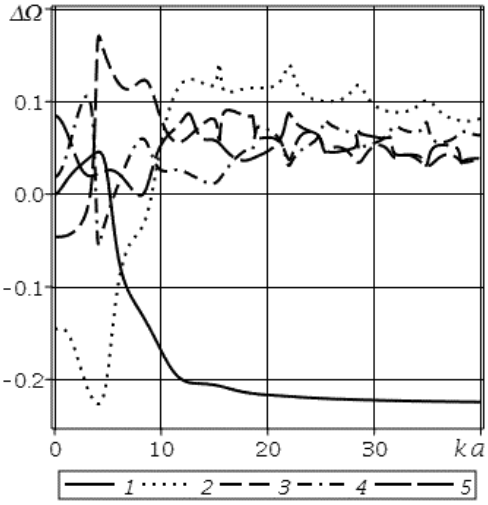


Рис. 7

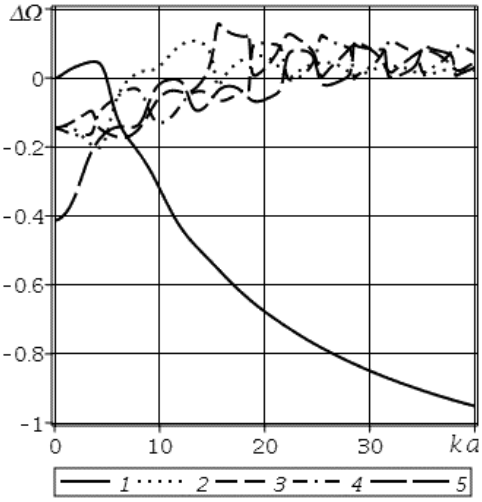


Рис. 8

В случае продольно-сдвиговых волн отмечается, что системное смещение по отношению к однородному волноводу в область более низких частот характерно только

для первой моды при рассмотренных вариантах неоднородности, а также в длинноволновом диапазоне $ka \in [0,7]$ у всех мод для значений параметров неоднородности $(\lambda, q) = (\ln(3/2), 6)$. При этом количественная оценка смещения первой моды для $(\lambda, q) = (\ln(3/2), 6)$ оказалась приблизительно в 4 раза больше, чем для $(\lambda, q) = (\ln(3/2), 1)$. Выявлено также существенное влияние зон локального сближения и взаимного отталкивания смежных в спектре мод на взаимное расположение сопоставляемых мод в паре "неоднородный – однородный цилиндр", на пример, в спектре продольно-сдвиговых волн для $(\lambda, q) = (\ln(3/2), 6)$ при $ka \approx 12$ второй и третьей моды, а также при $ka \approx 16$ третьей и четвертой моды.

Ниже представлены графики нормализованных фазовых c_p / c_t (рис. 9 и рис. 10) и групповых c_g / c_t (рис. 11 и рис. 12) скоростей бегущих нормальных волн в неоднородных цилиндрах с параметрами неоднородности $(\lambda, q) = (\ln(3/2), 6)$ для продольно-сдвиговых (рис. 9 и рис. 11) и неосесимметричных $(\tau = 1)$ (рис. 10 и рис. 12) волн. Здесь наряду с ярко выраженными характерными участками «обмена» групповыми скоростями смежных мод в зонах их локального сближения, отмечается также асимптотическая стабилизация значений групповых скоростей первых двух мод.

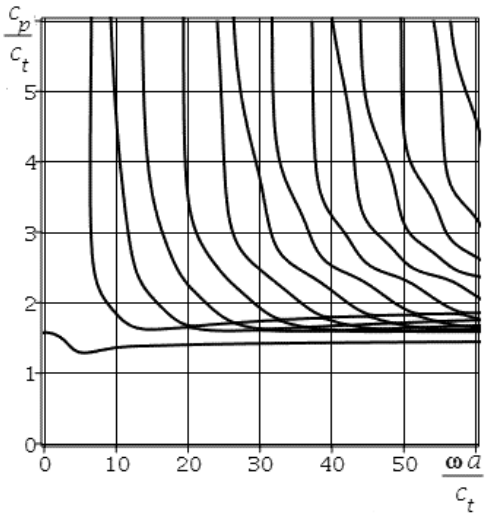


Рис. 9

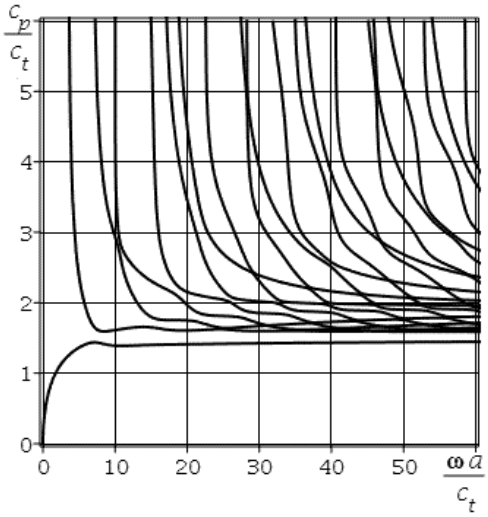


Рис. 10

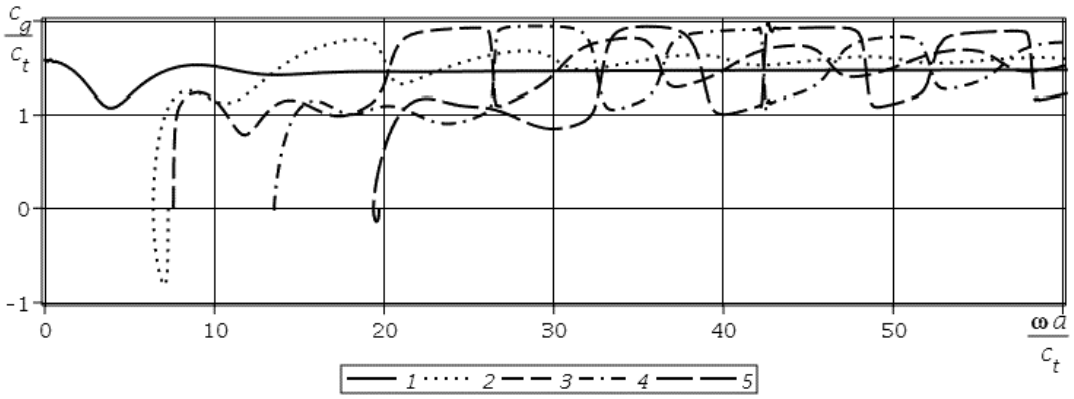


Рис. 11

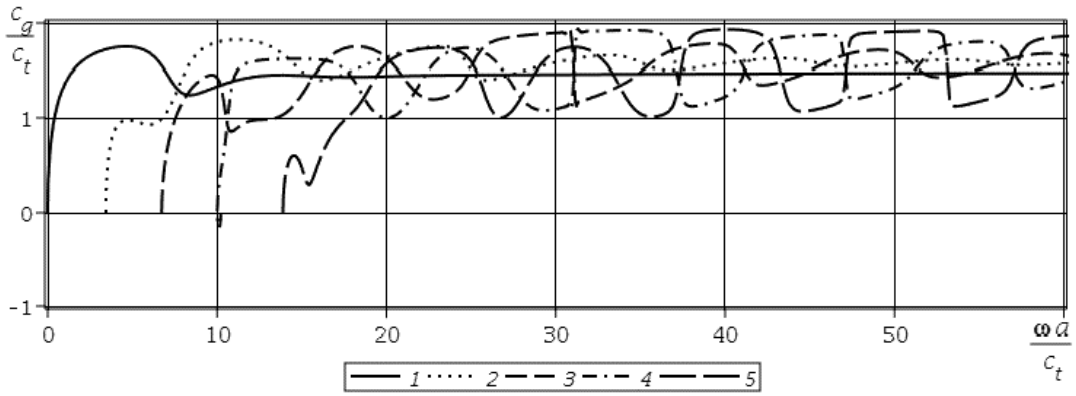


Рис. 12

Выводы. В матричной форме в виде равномерно и абсолютно сходящихся степенных рядов с определяемыми из явных рекуррентных соотношений векторными коэффициентами построено общее решение уравнений модели, описывающей осесимметричные крутильные и продольно-сдвиговые, а также неосесимметричные нормальные волны в цилиндрах кругового сечения с экспоненциально-степенной радиальной неоднородностью физико-механических параметров трансверсально изотропного материала. В двух частных случаях неоднородности для крутильных волн указанные решения представлены через специальные функции Уиттекера.

Получены дисперсионные соотношения, определяющие спектры всех типов волн для случаев свободного и жестко закрепленного цилиндра. Изучены эффекты влияния параметров неоднородности на топологию дисперсионных спектров, распределение фазовых и групповых скоростей распространяющихся нормальных волн. Установлены тенденции системного характера в топологии спектров крутильных волн, а также в поведении первой моды в случае продольно-сдвиговых волн для однородных и неоднородных цилиндров.

Полученные результаты могут быть использованы в прикладных исследованиях, связанных с расчетами характеристик волноводных компонентов акустоэлектронных устройств, анализа моделей ультраакустической диагностики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Stress, vibration and buckling analyses of FGM plates – A state-of-the-art review / K. Swaminathan, D.T. Naveenkumar, A.M. Zenkour, E. Carrera. // Composite Structures. – 2015. – № 120. – P. 10-31.
2. Dai H.-L. A review of recent researches on FGM cylindrical structures under coupled physical interactions, 2000–2015 / H.-L. Dai, Y.-N. Rao, T. Dai. // Composite Structures. – 2016. – № 152. – P. 199-225.
3. Алтухов Е.В. Равновесие и установившиеся колебания изотропных пластин: Монография. / Е.В. Алтухов, М.В. Фоменко. – Донецк: Изд-во ДонНУ, 2014. – 436 с.
4. Моисеенко И.А. Спектры нормальных упругих волн кручения в экспоненциально-неоднородных трансверсально-изотропных цилиндрах / И.А. Моисеенко // Теоретическая и прикладная механика. – 2014. – Вып. 9 (55). – С. 139-145.
5. Моисеенко И.А. Продольные волны в экспоненциально-неоднородных трансверсально-изотропных цилиндрах / И.А. Моисеенко. // Вестник Запорожского национального университета: Сборник научных статей. Физико-математические науки. – Запорожье: Запорожский национальный университет. – 2015. – № 3. – С. 179-189.
6. Моисеенко И.А. Спектры неосесимметричных нормальных упругих волн в ортотропных цилиндрах с функционально-градиентной радиальной неоднородностью / И.А. Моисеенко, В.И.Сторожев. // Механика твердого тела. – 2015. – Вып. 45. – С. 112-124.

7. Абрамовиц М. Справочник по специальным функциям, с формулами, графиками и математическими таблицами / М. Абрамовиц, И. Стиган. – М.: Наука, 1979. – 832 с.
8. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц / Ф.Р. Гантмахер. – М.: Наука, 1966. – 576 с.

Поступила в редакцию 15.01.2018 г.

PROPAGATION OF NORMAL WAVES ALONG TRANSVERSELY ISOTROPIC FUNCTIONALLY GRADED CYLINDERS

I.A. Moiseyenko

The process of wave propagation is described complete system of linear dynamical equations of elasticity theory. The elastic modules and density of the cylinder material are taken as a exponentially-power functions of the radial coordinate. The general solution of the system of differential equations are constructed in a matrix form in the form of expansions of the radial components of the solution into uniformly and absolutely convergent power series in the radial coordinate. The dispersion relations describing the harmonic spectra of normal waves in the case of free and rigidly fixed of boundary surface, is presented. The effects of the parameters of radial inhomogeneity on the topology of dispersion spectra, the distribution of phase and group velocities of propagating normal waves is studied.

***Keywords**:* FGMs; transversely isotropic waveguide; normal waves; analytical solutions; dispersion relations.

Моисеенко Игорь Алексеевич
кандидат физико-математических наук, доцент;
Донецкий национальный университет, г. Донецк,
доцент кафедры теории упругости и вычислительной математики
E-mail: mian@i.ua
+38 (050) 0845402

Moiseyenko Igor Alekseyevich
Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Docent
Donetsk National University, Donetsk

Ф И З И К А

УДК 539.213; 530.1; 524.3; 524.8

АНИЗОТРОПНАЯ МОДЕЛЬ И ПЕРЕХОДНЫЕ СИГНАЛЫ ОТ БИНАРНЫХ КОСМОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ: ЧЕРНЫХ ДЫР, НЕЙТРОННЫХ ЗВЕЗД

© 2018. ***В.С. Абрамов***

Предложена анизотропная модель для описания отдельных бинарных структур Вселенной. Установлены связи параметров гравитационных волн, реликтовых фотонов, бозона Хиггса и даны оценки этих параметров на примерах: слияния бинарных черных дыр, бинарных нейтронных звезд; “Холодного реликтового пятна” (супервойда). На основе гипотезы иерархического строения Вселенной для описания отдельных структур предложено использовать модели фрактальных наносистем (дислокаций, квантовых точек). Исследовано поведение полей деформации от фрактального индекса для ряда модельных наносистем с переменными параметрами. Показано, что для фрактального слоя без квантовой точки характерно наличие нелинейных осцилляций. Для границ ядер квантовых точек наблюдается стохастическое поведение, возможен эффект анизотропии.

Ключевые слова: фрактальные структуры Вселенной, бозон Хиггса, гравитационные волны, реликтовые фотоны, бинарные черные дыры и нейтронные звезды, анизотропная модель, численное моделирование.

Введение. Гипотезу о наличии темной материи, темной энергии во Вселенной можно проверить на основе прямых гравитационных эффектов, волн [1]. Электромагнитное излучение (фотоны) этой прямой информации не несет. За создание детектора гравитационных волн и экспериментальное доказательство их существования Р. Вайсу, К. Торну и Б. Бэрришу в 2017 году была присуждена Нобелевская премия по физике. Слияние двух черных дыр с выделением энергии в форме гравитационных волн (GW) было зарегистрировано интерферометрами LIGO в Ливингстоне и Хэнфорде [2]. Эти сигналы представляют собой зависимости амплитуд гравитационных волн от времени и регистрируются детекторами LD (Livingston Detector) и HD (Hanford Detector). Появление GW от слияния двух нейтронных звезд впервые было зафиксировано 17 августа 2017 года [3]. Эти достижения в космологии дают толчок для развития новых теоретических моделей фрактальных структур Вселенной: Галактик, сверхскоплений Галактик, стен, филаментов, войдов [4], супервойда или “Холодного реликтового пятна” [5], черных дыр, нейтронных звезд [6]. Гипотеза иерархического строения Вселенной дает возможность использовать модели фрактальных дислокаций, квантовых точек с переменными параметрами для описания отдельных элементов фрактальных структур Вселенной.

При описании различных нелинейных физических моделей возникают особые точки (аттракторы), линии, поверхности, особые объемные структуры (странные аттракторы). Многие физические свойства вблизи указанных особенностей носят стохастический характер, возникает необходимость моделирования стохастических процессов [7]. Аттракторы и поле деформации, взаимовлияние аттракторов и стохастических процессов в связанных фрактальных многослойных наносистемах исследовались в [8–11]. Модель фрактального осциллятора на основе теории дробного исчисления предложена в [10]. Переходные процессы в многослойной фрактальной наносистеме с нелинейным фрактальным осциллятором исследовались в [11]. При

наличии переменных параметров возникают особенности в поведении таких фрактальных наносистем.

Целью работы является описание анизотропии, переходных сигналов от бинарных объектов (черных дыр, нейтронных звезд); моделирование поля деформации отдельного слоя в многослойной фрактальной наносистеме (с переменными параметрами), исследование влияния фрактального индекса.

Анизотропная модель для бинарных черных дыр. Для расщепленных ветвей энергий $2\varepsilon_{02}$, $2\varepsilon_{01}$ в [12, 13] были получены выражения, связывающие энергию покоя бозона Хиггса E_{H0}=125.03238 ГэВ и параметр порядка для поля Хиггса Δ_0'=21.93272771 ГэВ

$$\varepsilon_{02}=[E_{H0}^2-(\Delta_0')^2]^{1/2};\quad \varepsilon_{01}=[E_{H0}^2+(\Delta_0')^2]^{1/2};\quad \Delta_0'=\psi_0' E_{H0};\quad \psi_0'=\delta N_0'/N_0';$$

$$(\xi_0')^2=N_{01}'/N_{02}';\quad N_{02}'=[(N_0')^2-(\delta N_0')^2]^{1/2};\quad N_{01}'=[(N_0')^2+(\delta N_0')^2]^{1/2}. \qquad (1)$$

Параметры, описывающие наличие Бозе-конденсата с учетом поля Хиггса, и энергии имеют значения

$$N_0'=3.73846796\cdot 10^5,\quad N_{01}'=3.795550194\cdot 10^5,\quad N_{02}'=3.680500523\cdot 10^5,$$

$(\xi_0')^2=1.031259246$, $\psi_0'=0.175416382$; $2\varepsilon_{01}$=253.8829698 ГэВ, $2\varepsilon_{02}$=246.1873393 ГэВ.

Далее была введена квазиодномерная решетка с двумя атомами в элементарной ячейке (типа эффективный атом и бозон Хиггса с массами покоя m_H и M_{H0}). Основные соотношения связи параметра $|\xi_{0H}|^2$ с массами покоя m_H и M_{H0} следующие

$$|\xi_{0H}|^2=m_H/M_{H0}=M_H/m_{H0}=E_H/E_{H0}=R_H/R_{H0};\quad M_{Ha}=N_a M_H;$$

$$M_{H0}'=N_a m_{H0};\quad R_H=2GM_{Ha}/c_0^2;\quad R_{H0}=2GM_{H0}'/c_0^2. \qquad (2)$$

Здесь $M_H=N_a m_H$=24.41158758 г и $m_{H0}=N_a M_{H0}$=134.2770693 г – молярные массы эффективного атома и бозона Хиггса; $E_H=22.73090194$ ГэВ – энергия покоя эффективного атома; $R_H=21.84067257$ мкм, $R_{H0}=120.1356321$ мкм допускают интерпретацию радиусов Шварцшильда черных дыр с массами M_{Ha}, M_{H0}'; $G=6.672\cdot 10^{-8}$ см^{3}г$^{-1}$с$^{-2}$ – гравитационная постоянная Ньютона; $N_a=6.025438\cdot 10^{23}$ – число Авагадро; c_0 – скорость света в вакууме. С учетом значения $|\xi_{0H}|^2$=0.181800122 были получены основные параметры теории $|S_{01}'|=0.039541282$, $S_{02}'=0.03409$, $S_{03}'=0.460458718$, $S_{04}'=0.53409$.

На основе энергий $2\varepsilon_{01}$, $2\varepsilon_{02}$ из (1) и параметров S_{0x}' ($x=1,2,3,4$) получим энергетические спектры $\varepsilon_{sx}=2\varepsilon_{01}S_{0x}'$, $\varepsilon_{sx}'=2\varepsilon_{02}S_{0x}'$. Эти спектры дают возможность (с учетом поля Хиггса) получить значения энергий $\varepsilon_{s3}+\varepsilon_{s2}'=125.2951532$ ГэВ и $\varepsilon_{s3}+\varepsilon_{s1}'=126.6371898$ ГэВ для бозона Хиггса, которые согласуются со значениями энергий 125.3 ГэВ и 126.5 ГэВ, полученными на БАКе [14].

На основе параметров $(\xi_0')^2$, $|\xi_{0H}|^2$ и молярной массы M_H вводим компоненты восприимчивости

$$\chi_{11}=|\xi_{0H}|^2;\quad \chi_{21}=\chi_{02}=[(\xi_0')^2-1]/\chi_{11};\quad \chi_{31}=-\chi_{01};\quad n_F+n_F'=1;$$
$$n_F=M_{02}/M_H=\chi_{02}/\chi_{11};\quad n_F'=M_{01}/M_H=-\chi_{01}/\chi_{11}. \qquad (3)$$

С учетом (3) находим численные значения: $\chi_{11}=0.181800122$, $\chi_{02}=0.171942932$, $\chi_{01}=-0.00985719$, $n_F=0.945780069$, $n_F'=0.054219931$, $M_{01}=1.323594585$ г, $M_{02}=23.087993$ г. Далее на основе (3) и E_{H0} находим характерные энергии

$$E_{1\nu}=-\chi_{01}E_{H0}=n_F'E_H;\quad E_{2\nu}=\chi_{02}E_{H0}=n_FE_H;\quad E_H=\chi_{11}E_{H0}.$$
$$E_{1\nu}=M_{01}c_0^2=1.232467935\,\text{ГэВ},\quad E_{2\nu}=M_{02}c_0^2=21.49843401\,\text{ГэВ}. \qquad (4)$$

Далее вводим вектор-строку $\hat{\chi}_1=(\chi_{11},\chi_{21},\chi_{31})$ и вектор-столбец $\hat{\chi}_1^+$. Находим эффективную восприимчивость $|\chi_{ef}|$, эффективную молярную массу M_{ef} из условий

$$|\chi_{ef}|=M_{ef}/m_{H0};\quad \hat{\chi}_1\hat{\chi}_1^+=|\chi_{ef}|^2=|\chi_{01}|^2+|\chi_{02}|^2+|\xi_{0H}|^4;\quad M_{ef}^2=M_{01}^2+M_{02}^2+M_H^2. \qquad (5)$$

Численные значения равны: $|\chi_{ef}|=0.250425279$, $M_{ef}=33.62637256$ г.

Для учета нелинейных зависимостей эффективных смещений $u_\mu=\mathrm{F}(\varphi_\mu;k_\mu)$ (где F – неполный эллиптический интеграл первого рода) от угла φ_μ, модуля k_μ эллиптических функций типа $\mathrm{sn}(u_\mu;k_\mu)$, $\mathrm{cn}(u_\mu;k_\mu)$ используем модель фрактального осциллятора [10, 11]. В этой модели введена матрица $\hat{T}_{ef}$ с элементами t_{ij} $(i,j=1,2,3)$

$$t_{11}=k_\mu';\quad t_{12}=-k_\mu;\quad t_{21}=k_\mu\mathrm{cn}(u_\mu;k_\mu);\quad t_{22}=k_\mu'\mathrm{cn}(u_\mu;k_\mu);\quad t_{23}=-\mathrm{sn}(u_\mu;k_\mu);$$
$$t_{13}=0;\quad t_{31}=k_\mu\mathrm{sn}(u_\mu;k_\mu);\quad t_{32}=k_\mu'\mathrm{sn}(u_\mu;k_\mu);\quad t_{33}=\mathrm{cn}(u_\mu;k_\mu). \qquad (6)$$

Действие $\hat{T}_{ef}$ на $|\chi_{ef}|$ приводит к матрице $\hat{\chi}_{ef}=\hat{T}_{ef}|\chi_{ef}|$ с элементами χ_{ij}

$$\chi_{11}=k_\mu'|\chi_{ef}|;\quad \chi_{21}=k_\mu|\chi_{ef}|\,\mathrm{cn}(u_\mu;k_\mu);\quad \chi_{31}=k_\mu|\chi_{ef}|\,\mathrm{sn}(u_\mu;k_\mu);$$
$$\chi_{12}=-k_\mu|\chi_{ef}|;\quad \chi_{22}=\chi_{11}\cos\varphi_\mu;\quad \chi_{32}=\chi_{11}\sin\varphi_\mu;\quad \chi_{23}=-|\chi_{ef}|\sin\varphi_\mu;$$
$$\chi_{13}=0;\quad \chi_{33}=|\chi_{ef}|\cos\varphi_\mu;\quad k_\mu'=\chi_{11}/|\chi_{ef}|;\quad (k_\mu')^2+k_\mu^2=1. \qquad (7)$$

Численные значения равны: $\chi_{12}=-0.172225247$, $\chi_{22}=0.181502111$, $\chi_{32}=0.010405201$, $\chi_{23}=-0.014332913$, $\chi_{33}=0.250014775$, $k_\mu'=0.725965539$, $\sin\varphi_\mu=0.057234291$. Характерные углы $\varphi_\mu=3.281076322^\circ$, $\varphi_\mu'=\pi/2-\varphi_\mu=86.71892368^\circ$, $\varphi_\mu^*=\pi/2+2\varphi_\mu$ можно определять по наличию пиков в рентгеновских структурных спектрах.

Из (1) при $\psi_0'=0$ получим параметр порядка $\Delta_0'=0$ и равенство энергий $2\varepsilon_{02}=2\varepsilon_{01}=2E_{H0}$ ветвей спектра. Тогда из (3) следует $(\xi_0')^2=1$, $\chi_{21}=0$, а из (7) получим условие $k_\mu|\chi_{ef}|\,\mathrm{cn}(u_\mu;k_\mu)=0$. Это условие может быть выполнено либо при $k_\mu=0$, либо при $\mathrm{cn}(u_\mu;k_\mu)=0$. При этом χ_{ij} будут принимать численные значения, отличные от приведенных выше.

Если параметр порядка $\Delta_0' \neq 0$, то из (7) следует необходимость анализа других вектор-строк $\hat{\chi}_2 = (\chi_{12}, \chi_{22}, \chi_{32})$, $\hat{\chi}_3 = (\chi_{13}, \chi_{23}, \chi_{33})$ и вектор-столбцов $\hat{\chi}_2^+$, $\hat{\chi}_3^+$ тензора восприимчивости $\hat{\chi}_{ef}$.

На основе $Q_{H6}=1.537746366$ из [12] и компонентов восприимчивости χ_{ij} запишем для тензора спина черной дыры $\hat{n}_{hs}$ элементы в виде $n_{ij}=2/(2Q_{H6}-z_{ij})$, где $z_{ij}=\chi_{ij}/2$. Для диагональных элементов находим $n_{11}=0.670108192$, $n_{22}=0.670074739$, $n_{33}=0.677854579$. После слияния бинарных черных дыр (БЧД) в [2] определено конечное значение спина черной дыры 0.67 и значение красного смещения $z_s=0.09$. Наши расчетные значения n_{22} и $z_{22}=0.090751056$ близки к этим данным. Это указывает на тензорный характер природы источника спина черной дыры $\hat{n}_{hs}$ и красного смещения z_{ij}, которые связаны с восприимчивостью χ_{ij}.

Основной параметр n_{A0} определяет спектр для чисел заполнения $n_{Ax}=n_{A0}S_{0x}'$ черных дыр. Число квантов $n_{h1}=M_{h1}/M_s$, $n_{h2}=M_{h2}/M_s$ БЧД до слияния и число квантов черной дыры $2n_{A4}=M_{A4}/M_s$ после слияния определяется через космологическое красное смещение z_μ', параметр Q_{H2} из [12, 13] и n_{A0} из выражений

$$\sin^2\varphi_{\mu\lambda}'=2z_Q/(3z_Q+1);\quad \cos^2\varphi_{\mu\lambda}'=(z_Q+1)/(3z_Q+1);\quad z_Q=1/(2n_{A0}-1);$$

$$n_{A0}=(z_{\mu\lambda}')^2-1=(z_\mu'+3/2)(z_\mu'-1/2);\quad z_{\mu\lambda}'=z_\mu'+1/2;\quad 1/z_{\mu\lambda}'=\sin\varphi_{\mu\lambda}';$$

$$n_{A0}'=(z_{\mu\lambda}')^2;\quad n_{A0}'-n_{A0}=1;\quad z_Q'-z_Q=1;\quad \varphi_{\mu\lambda}'=\varphi_a Q_{H2}. \tag{8}$$

Здесь M_{h1}, M_{h2} – массы первой, второй черных дыр до слияния; M_{A4} – масса черной дыры после слияния; M_s – масса Солнца. Используя значения параметров $Q_{H2}=1/3$, $z_\mu'=7.184181$ [12, 13], находим $\sin\varphi_{\mu\lambda}'=0.130137486$, $n_{A0}=58.04663887$. Угол $\varphi_a=22.43261159^\circ$ можно определять по положению пика на аморфном основании в рентгеновском структурном спектре. На основе спектра n_{Ax} находим число квантов черной дыры $2n_{A4}=62.0042587$, которая образовалась после слияния двух черных дыр. Число квантов второй черной дыры до слияния $n_{h2}=n_{A0}/2=n_{A4}-n_{A2}=$ $=n_{A3}+n_{A1}=29.02331944$. В результате слияния этих БЧД гравитационными волнами уносится число квантов $n_G=1/Q_{H2}=3$. Число квантов первой черной дыры до слияния n_{h1} находим из уравнения $(n_{h1}+n_{h2})-2n_{A4}=n_G$, получим $n_{h1}=35.98093926$.

В [12, 13] при описании анизотропии реликтового излучения были получены связи температур $T_A=T_r/N_{ra}=2.61739852$ мК, $T_A'=T_r/z_{A2}'=2.635582153$ мК с температурой реликтового излучения $T_r=2.72548$ К, где $N_{ra}=z_{A2}'+z_\mu'=1041.293475$, $z_{A2}'=1034.109294$ – обычное красное смещение. Отклонение температур $\delta T_A=T_A'-T_A=18.183633$ μK согласуется с экспериментальной средней величиной 18 μK колебаний температуры реликтового фона во фрактальной модели Вселенной.

С другой стороны, в нашей модели супервойд или “Холодное реликтовое пятно” определяется температурой T_A^*, числом квантов N_{ra}^*, параметром z_μ^*

$$T_A^* = T_r / N_{ra}^*; \quad N_{ra}^* = z'_{A2} + z_\mu^*; \quad z_\mu^* = 2n_{A4} + (n_{A1} - n_{A2}). \tag{9}$$

Параметр $z_\mu^* = 62.3206873$ допускает интерпретацию как эффективного космологического смещения на ранних этапах формирования структуры Вселенной после Большого взрыва и связан с числом квантов черной дыры $2n_{A4}$, n_{A1}, n_{A2}. Численные значения равны: $N_{ra}^* = 1096.429981$, $T_A^* = 2.485776608$ мК, $\delta T_A^* = T_A^* - T'_A = -149.8055448$ мкК – отклонение температур согласуется с отклонением (-150 мкК) из [5]. Знак «–» указывает на то, что область супервойда холоднее, чем соседние области.

Описание переходных сигналов от бинарных объектов. Взрывы сверхновых типа 1а, процессы слияния БЧД, бинарных нейтронных звезд (БНЗ) можно рассматривать как отдельные импульсные источники во Вселенной. При этом возникают переходные гравитационно-волновые сигналы, реликтовое излучение фотонов. Для описания характерных параметров и переходных сигналов излучения GW от слияния БЧД или БНЗ будем использовать полуклассическую модель сверхизлучения Р. Дикке [15] и квантовую статистическую теорию сверхизлучения [16, 17]. Для интенсивности излучения J имеем [15]

$$J = J_0[(a_0^2 - a_m^2) + (a_0 + a_m)] = J_0(a_0 + a_m)[(a_0 - a_m) + 1]. \tag{10}$$

Здесь J_0 – начальная интенсивность излучения; параметры a_0, a_m в общем случае зависят от времени, частоты и амплитуды GW, характеристик БЧД или БНЗ. Если $J = J_m$, где J_m – максимальная интенсивность излучения, то из (10) получим выражения для критической плотности ρ_c отношения амплитуды сигнала GW к амплитуде шума

$$\rho_c^2 = (z'_{A2} - 1)/2 + J_m/(2J_0); \quad a_0^2 = a_m^2 + z'_\mu(z'_\mu + 2)/4; \quad a_m = (z'_{A2})^{1/2}. \tag{11}$$

Численные значения параметров равны: $a_m = 32.15756978$, $a_0 = 32.41302977$, $J_m/J_0 = 81.06580421$. Значение $\rho_c = 23.60270093$ близко к критическому значению 23.6 для БЧД из [2]. Параметр a_0 близок к отношению амплитуды сигнала к амплитуде шума 32.4 для БНЗ [3].

На основе модели I из [12, 13] запишем выражения для постоянной Хаббла H_0, скорости υ_0 в модели плоской космологии

$$H_0 = H_{01}/\Omega_{tH} = \upsilon_0/L_0; \quad \upsilon_0 = \upsilon_{01}/\Omega_{tH}; \quad \Omega_{tH} = Q_{H0} + |S'_{01}|. \tag{12}$$

С учетом значений постоянной Хаббла $H_{01} = 73.2$ км·с$^{-1}$·Мпк$^{-1}$, скорости $\upsilon_{01} = 7.32 \cdot 10^6$ см·с$^{-1}$ (описывающих ускоренное расширение Вселенной), $Q_{H0} = 1.039541282$, $L_0 = 0.30857 \cdot 10^{25}$ см [11, 12], из (12) получим значения $H_0 = 67.83540245$ км·с$^{-1}$·Мпк$^{-1}$, $\upsilon_0 = 6.783540245 \cdot 10^6$ см·с$^{-1}$.

В [12, 13] были получены значения для максимума ν_{r1}=160.3988698 GHz и сдвинутой ν_{r2}=142.8161605 GHz частот реликтового излучения фотонов. По данным реликтового излучения, с учетом $\xi_q = \nu_{r1} - \nu_{r2}$, получены значение щели $2|\lambda|N^{1/2}$=8.396945157 ГГц в спектре и плотность холодной темной материи $\Omega'_{c1}=4|\lambda|^2 N/|\xi_q|^2=0.228071512$.

Для расчета длины волны $\lambda_{\gamma b}$ от источника для БНЗ используем энергетические спектры $\varepsilon_{\mu x}=2\varepsilon'_{01}S'_{0x}$, $\varepsilon'_{\mu x}=2\varepsilon'_{02}S'_{0x}$, которые записаны по аналогии с (1) на основе энергии бозона Хиггса и параметра порядка δ_μ

$$2\varepsilon'_{01}=2[E_{H0}^2+(\delta_\mu)^2]^{1/2};\quad 2\varepsilon'_{02}=2[E_{H0}^2-(\delta_\mu)^2]^{1/2};$$

$$\delta_\mu=E_{H0}\sin\varphi_\mu/Q_{H6};\quad \lambda_{\gamma b}=R_{H0}|\chi_{ef}|(\varepsilon_{\mu 4}+\varepsilon_{\mu 2})/(2E_{H0}). \tag{13}$$

Отметим, что параметр порядка δ_μ (описывает наличие Бозе-конденсата) зависит от угла φ_μ, параметра Q_{H6}, что следует из (7), (8). Численные значения равны $\delta_\mu = 4.653654061$ ГэВ, $2\varepsilon'_{01} = 250.2379072$ ГэВ, $2\varepsilon'_{02} = 249.8914929$ ГэВ, $\lambda_{\gamma b} = 17081.85081$ нм. На основе рассчитанной длины волны $\lambda_{\gamma b}$ от источника для БНЗ находим характерные параметры

$$\nu_{\gamma b}=\upsilon_0/\lambda_{\gamma b};\quad \Omega'_{c2}=\nu_{\gamma b}^2/(4|\lambda|^2 N);\quad \upsilon_{\gamma b}^2=\upsilon_0^2/\Omega'_{c2};\quad \Omega_{01}=\upsilon_{01}^2/\upsilon_{\gamma b}^2. \tag{14}$$

Здесь $\nu_{\gamma b}$=3.974973236 ГГц – частота, $\Omega'_{c2}=0.224091707$ – плотность холодной темной материи, $\upsilon_{\gamma b}=14.34353643\cdot 10^6$ см·с$^{-1}$ – эффективная скорость Ферми, связанные с нейтронными звездами; $\Omega_{01}=0.260441196$. С учетом (3), связей $n'_{F\nu}=(n'_F)^2$, $n_{F\nu}=n_F(1+n'_F)$ находим оценки плотностей нейтрино $\Omega_{0\nu}=n'_{F\nu}=0.002939801$ и холодной темной материи $\Omega_{c1}=\Omega'_{c2}+\Omega_{0\nu}=0.227031508$ (близко к оценке плотности холодной темной материи 0.227, полученной другими авторами [1]). Длина волны $\lambda_{\gamma h}$, связанная с источником от черных дыр, определяется выражениями

$$\lambda_{\gamma h}=\lambda_{\gamma b}/\eta_{bh};\quad \eta_{bh}=(1+\Omega_{01}/2)[1+(n'_F)^2/2]. \tag{15}$$

Параметр $\eta_{bh}=1.13188191$ и длина волны $\lambda_{\gamma h}=15091.54856$ нм. Расчетные значения $\lambda_{\gamma h}$, $\lambda_{\gamma b}$ близки к значениям длин волн 15091.4 nm, 17081.7 nm для источников от БЧД [2], БНЗ [3], соответственно. Из (1), (13), (15) следуют взаимосвязи между Бозе-конденсатами для черных дыр и нейтронных звезд через энергию E_{H0}. Величина $z_Q=0.008688605$ из (8) близка к красному смещению 0.009 источника для БНЗ [3].

Находим спектр для чисел заполнения n_{cx} (на основе n_{ch}) и полное число квантов n_{tot} после слияния БНЗ из выражений

$$n_{cx}=n_{ch}S'_{0x}=M_{cx}/M_s\,;\quad n_{ch}=1/(\psi_{ch}-1)\,;\quad \psi^*_{ch}=z'_Q\psi_{ch}\,;\quad \psi_{ch}=1+S'_{02}/\chi_{11}\,;$$
$$n_{tot}=M_{tot}/M_s=2n_{c4}-n_{1c}=2n_{3c}+(2n_{2c}+n_{1c})\,;\quad n'_{tot}=2n_{c4}-2(n_{c1}-n_{c2})\,. \qquad (16)$$

Численные значения следующие $n_{ch}=5.332945778$; $\psi_{ch}=M_{ch}/M_s=1.187513626$; $\psi^*_{ch}=M^*_{ch}/M_s=1.197831463$, где M_{cx} и M_{tot} – эффективные молярные массы до и после слияния. Расчетные значения ψ_{ch} и ψ^*_{ch} близки к 1.188 и 1.1977 для эффективных молярных масс M_{ch} и M^*_{ch} в рамках детектора GW от источника БНЗ [3]; $n_{tot}=2.742837254$ и $n'_{tot}=2.81920162$ близки к 2.74 и 2.82 (низко-спиновое и высоко-спиновое приближения) [3].

Для характерной частоты гравитационной волны ν_{GW} имеем

$$\nu_{GW}=4\nu_{\lambda 0}=N_{ra}\nu_{\gamma 0}\,;\quad \nu_{\lambda 0}=1/(N'_0-N'_{02})\tau_{s0}\,;\quad \tau_{s0}=2(|S'_{01}|+S'_{02})/|\lambda_{\nu 0}|\,;$$
$$\tau_{s0}=\tau_{\lambda 2}/N'_{02}=\tau'_{\lambda 2}/N'_0\,;\quad \tau'_{\lambda 2}-\tau_{\lambda 2}=\tau_{\lambda 0}=1/\nu_{\lambda 0}\,;\quad \nu_0=2z'_\mu\nu_{\lambda 0}/(2z'_\mu+1)\,. \qquad (17)$$

Параметр $|\lambda_{\nu 0}|=130.5593846\,\text{kHz}$ связан с параметром δ_μ из (13), описывающим наличие Бозе-конденсата для нейтронных звезд. При $|\lambda_{\nu 0}|=0$ из (17) следует, что частоты мягких мод $\nu_{\lambda 0}=0$ и $\nu_{GW}=0$. Далее из (17) находим $\tau_{s0}=1.127935494\,\text{мкс}$, $\nu_{\lambda 0}=152.9437161\,\text{Гц}$, $\nu_{GW}=611.7748643\,\text{Гц}$, $\nu_0=142.9918607\,\text{Гц}$, $\tau_{\lambda 0}=6.538352972\,\text{мс}$, $\tau_{\lambda 2}=0.415136712\,\text{с}$, $\tau'_{\lambda 2}=0.421675065\,\text{с}$.

Время появления γ-излучения после слияния нейтронных звезд $\tau_{\gamma 0}$ определяется разностью времен коалесценции τ'_{c0}, τ_{c0} по формулам

$$\tau_{\gamma 0}=\tau'_{c0}-\tau_{c0}=1/\nu_{\gamma 0}\,;\quad \tau'_{c0}=\tau_{\gamma 0}n'_{A0}\,;\quad \tau_{c0}=1/\nu_{c0}=\tau_{\gamma 0}n_{A0}\,;$$
$$\tau_0=1/\nu_0=\tau_{\lambda 0}(1+1/2z'_\mu)\,;\quad \nu_{\gamma 0}=\nu_{c0}n_{A0}=\nu'_{c0}n'_{A0}\,;\quad \nu'_{c0}=1/\tau'_{c0}\,. \qquad (18)$$

Численные значения равны: $\tau_{\gamma 0}=1.702086072\,\text{с}$, $\tau_{c0}=98.80037555\,\text{с}$, $\tau'_{c0}=100.5024616\,\text{с}$, $\nu_{\gamma 0}=0.587514355\,\text{Гц}$, $\nu_{c0}=0.010121419\,\text{Гц}$, $\nu'_{c0}=0.009950005\,\text{Гц}$. Время задержки GW между детекторами LD и HD $\tau_0=6.993405045\,\text{мс}$ из (18) определяется через время задержки $\tau_{\lambda 0}$ из (17) и космологическое красное смещение z'_μ.

Запишем спектры $\nu_{rx}=2\nu_{ra}S'_{0x}$ и $\nu'_{zx}=2\nu'_{z\mu}S'_{0x}$ на основе ν_{ra} и $\nu'_{z\mu}$, где

$$\nu_{ra}=\Omega_{ra}\nu_{\lambda 0}=\Omega_{ra}\nu_{GW}/4\,;\quad \nu'_{z\mu}=\nu_{ra}z'_\mu\,;\quad \Omega_{ra}=N_{ra}\Omega'_{c1}/z'_{A2}\,;\quad \nu_{ra}=\nu_{r3}+\nu_{r1}=\nu_{r4}-\nu_{r2}\,;$$
$$\nu'_{z\mu}=\nu'_{z3}+\nu'_{z1}=\nu'_{z4}-\nu'_{z2}\,;\quad \nu^*_{z\mu}=\nu'_{z3}+\nu'_{z2}=\nu'_{z4}-\nu'_{z1}\,. \qquad (19)$$

Численные значения равны $\Omega_{ra}=0.229655974$, $\nu_{ra}=35.12443809\,\text{Гц}$, $\nu'_{z\mu}=252.3403208\,\text{Гц}$, $\nu^*_{z\mu}=249.5891642\,\text{Гц}$. Если $z'_\mu=1$, то из (19) следует, что спектр $\nu'_{z\mu}$ переходит в спектр ν_{ra}. При слиянии черных дыр детекторы LD и HD зафиксировали сигналы как серию импульсов, частота которых увеличивалась с $35\,\text{Гц}$ до $250\,\text{Гц}$. При этом амплитуда сигналов возрастала до максимального значения, а

затем резко падала до уровня шума. Наши расчетные значения частот ν_{ra}, $\nu'_{z\mu}$, $\nu^*_{z\mu}$ согласуются с данными по обнаружению GW при слиянии БЧД [2].

Далее запишем спектр $\nu_{Wx} = \nu_{GW} S'_{0x}$ на основе частоты ν_{GW}. Значение частоты ν_{W1}=24.19036243 Гц согласуется со значением частоты 24 Гц, которую начинает регистрировать детектор LD в эксперименте по обнаружению GW при слиянии БНЗ [3].

Пусть h_{mL}, h_{mH} – максимальные значения амплитуд сигналов GW, регистрируемых детекторами LD, HD; $h_{\xi L}$, $h_{\xi H}$ – уровень шума после прохождения GW. Сигнал GW на детекторе HD появляется позже на время задержки τ_0, чем на детекторе LD. С учетом (10), (11) запишем связи для амплитуд сигналов GW, возникающих при слиянии черных дыр

$$2h_{mH}/h_{mL}=(1+a_m/a_0)[1+(a_0-a_m)]; \quad h_{mH}h_{\xi L}=h_{mL}h_{\xi H};$$

$$2h_{\xi H}/(2h_{mH}+h_{\xi H})=2h_{\xi L}/(2h_{mL}+h_{\xi L})=|\xi_{0H}|^2. \tag{20}$$

На основе (20), получим численные значения $h_{mL}=0.91689357\cdot10^{-21}$, $h_{mH}=1.146586961\cdot10^{-21}$, $h_{\xi L}=0.183358678\cdot10^{-21}$, $h_{\xi H}=0.229292337\cdot10^{-21}$.

Регистрируемое детектором LD максимальное h'_{mL} значение амплитуды сигнала GW, уровень шума GW до и после слияния нейтронных звезд $h^*_{\xi L}$ и $h'_{\xi L}$ определяются по формулам

$$h'_{mL}=2a_0/n_{\Omega 2}=2a_0h_{mH}; \quad h^*_{\xi L}=2a_m/n_{J0}=2a_mh_{\xi H}; \quad 1/n_{J0}=h_{\xi H};$$

$$h'_{\xi L}=2h'_{mL}|\xi_{0H}|^2/(2-|\xi_{0H}|^2); \quad 1/n_{\Omega 2}=h_{mH}=|\xi_q|^2E_G/(4|\lambda|^2N_{ra}E_{H0}N'_{02}). \tag{21}$$

Численные значения равны $h'_{mL}=7.43287146\cdot10^{-20}$, $h^*_{\xi L}=1.474696865\cdot10^{-20}$, $h'_{\xi L}=1.486411868\cdot10^{-20}$, $E_G=12.11753067$ мкэВ; $h'_{mL}/h^*_{\xi L}=5.040270741$. Полученные оценки из (20) и (21) согласуются с данными из [2, 3].

Описание отдельного слоя с переменными параметрами. Гипотеза иерархического строения Вселенной позволяет использовать модели фрактальных наносистем (дислокаций, квантовых точек) для описания отдельных элементов крупномасштабных фрактальных структур.

При моделировании нелинейных эффективных смещений $u_\mu = \mathrm{F}(\varphi_\mu;k_\mu)$ из (6) основным параметром является $b_0=1-2\mathrm{sn}^2(u_\mu;k_\mu)$. Выражения для четырех ветвей эффективных смещений $u_{\mu i}$ ($i=1,2,3,4$) имеют вид [11]

$$2u_{\mu 1}(z,\alpha)=g_1-g_2+g_4; \quad 2u_{\mu 2}(z,\alpha)=g_1-g_2-g_4; \tag{22}$$

$$2u_{\mu 3}(z,\alpha)=-g_1-g_2+g_5; \quad 2u_{\mu 4}(z,\alpha)=-g_1-g_2-g_5. \tag{23}$$

Функции g_1, g_2, g_3, g_4, g_5 зависят от координаты z, фрактального индекса α вдоль оси Oz и моделируются выражениями

$$g_2(z,\alpha)=g_{20}|z-z_c|^{-\alpha}; \quad g_3(z,\alpha)=g_{30}|z-z_c|^{-2\alpha}; \tag{24}$$

$$g_{20}(\alpha)=2^{-2\alpha}3^{3\alpha-1/2}\Gamma(\alpha+1/3)\Gamma(\alpha+2/3)/\sqrt{\pi}\,\Gamma(\alpha+1/2)\,; \tag{25}$$

$$g_{30}(\alpha)=2\cdot 3^{3\alpha-1/2}\ \Gamma(\alpha+1/3)\Gamma(\alpha+2/3)/\pi\,;\quad g'_{30}(\alpha)=1/g_{30}(\alpha)\,; \tag{26}$$

$$g_4(z,\alpha)=[(g_1+g_2)^2-g_3]^{1/2};\quad g_5(z,\alpha)=[(-g_1+g_2)^2-g_3]^{1/2}. \tag{27}$$

Здесь Γ – гамма-функция; g_{20}, g_{30}, g'_{30} – нелинейные разрывные функции от фрактального индекса α (рис. 1). Функции g_2, g_3 из (24) также становятся нелинейными на фоне степенных зависимостей.

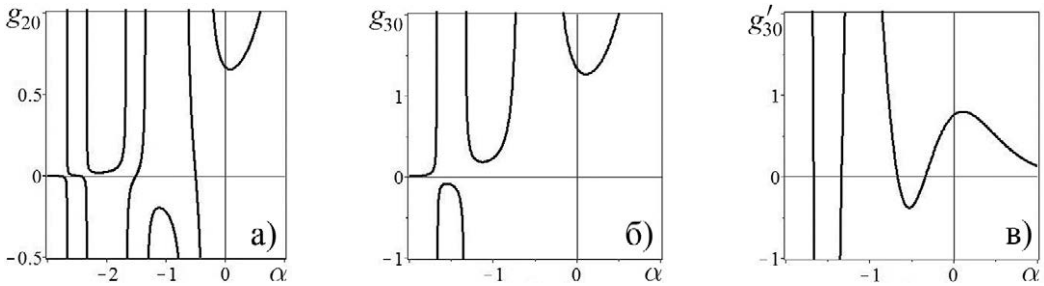


Рис. 1. Поведение функций g_{20}, g_{30}, g'_{30} от α.

Функция $g_{20}(\alpha)$ имеет нули при $\alpha=-(n_\alpha+1/2)$, где $n_\alpha=0,1,2...$ (рис. 1 а). Функция $g'_{30}(\alpha)$ имеет нули при $\alpha=-(n_\alpha+1/3)$, $\alpha=-(n_\alpha+2/3)$ (рис. 1 в). Нелинейная функция g_1 зависит от u_μ, α и индексов n, m, j узлов решетки

$$g_1(u_\mu,\alpha;n,m,j)=k_\alpha^2(1-2\,\mathrm{sn}^2(u_\mu-u_0;k_\mu))\,;\quad k_\alpha^2=(1-\alpha)/Q\,; \tag{28}$$

$$Q=p_{0\alpha}-b_1(n-n_0)^2/n_c^2-b_2(m-m_0)^2/m_c^2\,;\quad p_{0\alpha}=p_0-b_3(j-j_0)^2/j_c^2. \tag{29}$$

Здесь u_0 – постоянное смещение; p_0, b_1, b_2, b_3, n_0, n_c, m_0, m_c, j_0, j_c – характерные параметры. Функция k_α зависит от α, индексов n, m, j узлов решетки $N_1\times N_2\times N_3$. В нашей модели эта функция определяет поведение модуля $k_\mu=\mathrm{sn}(u_{0\alpha},k_\alpha)$, где $u_{0\alpha}=\mathrm{F}(\varphi_{0\alpha},k_\alpha)$; $\varphi_{0\alpha}$ – полярный угол. В результате k_μ (неявно зависит от n, m, j) и четыре ветви $u_{\mu i}$ из (22), (23) становятся случайными функциями.

При численном моделировании для прямой $z=z_1$ и обратной $z=z_2$ волн полагалось, что $z_1=0.053+h_z(j_z+33)$; $z_2=6.653-h_z(j_z+33)$, $h_z=0.1$; $j_z=5$; $n=\overline{1,30}$; $m=\overline{1,40}$; $u_0=29.537$; $u_{0\alpha}=\pi/5.2$; $p_0=1.0123$. Решение уравнений (22), (23) для ветвей $u=u_{\mu i}$ выполнено методом итераций по переменной m.

Сначала рассмотрим состояние слоя без квантовой точки. В этом случае параметры $b_1=b_2=b_3=0$, а функция $Q=p_0$. Исследуем поведение отдельных ветвей функции смещения прямой (рис. 2 а) и обратной (рис. 2 б-е) волн от фрактального индекса α. Для прямой волны (рис. 2 а) поведение функции смещения для всех ветвей является регулярным: вдоль оси Om для 3, 4 ветвей наблюдаются осцилляции с постоянными амплитудами; для 1, 2 ветвей характерны затухающие осцилляции с выходом на постоянные значения при увеличении m.

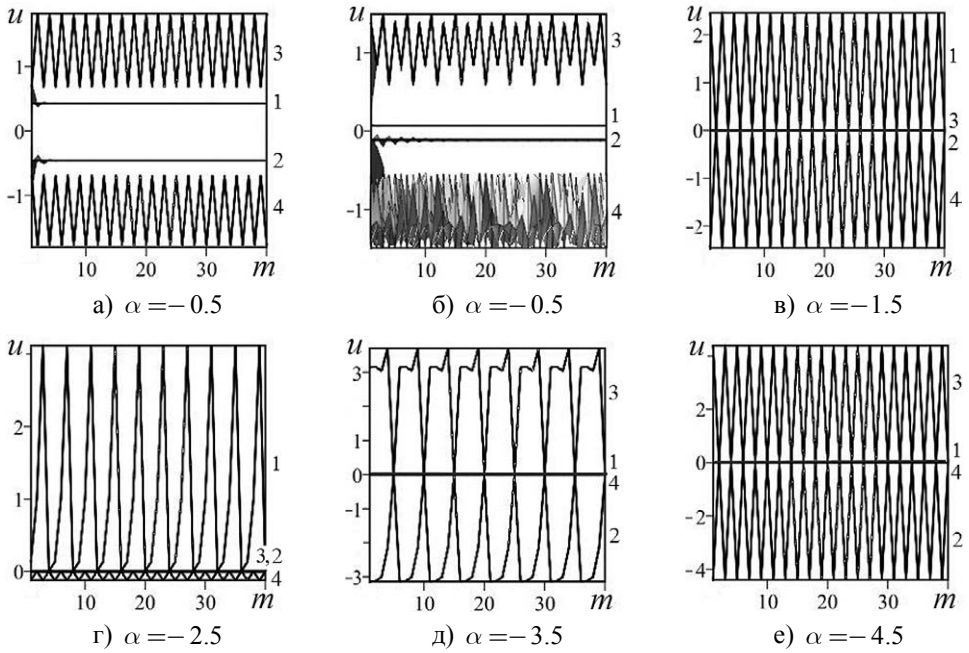


Рис. 2. Зависимости проекций u на плоскость mOu для прямой (а) и обратной (б-е) волн от m для различных α : 1 - $u_{\mu 1}$, 2 - $u_{\mu 2}$, 3 - $u_{\mu 3}$, 4 - $u_{\mu 4}$.

Для обратной волны (рис. 2 б) кроме регулярного поведения 1, 2, 3 ветвей наблюдается ярко выраженное стохастическое поведение 4 ветви, для 3 ветви характерно наличие второй гармоники.

При $\alpha = -1.5$ для ветвей 1, 4 (рис. 2 в) наблюдаются осцилляции с увеличенными амплитудами, а для ветвей 3, 2 (рис. 2 в) – затухающие осцилляции с амплитудами порядка $\pm 6.6 \cdot 10^{-7}$. При $\alpha = -2.5$ для ветвей 1, 4 (рис. 2 г) характерно появление особенностей по сравнению с рис. 2 в: для ветви 1 – изменение формы, амплитуды осцилляций; для ветви 4 – удвоение периода осцилляций. Для ветвей 3, 2 (рис. 2 г) характерны затухающие осцилляции с уменьшенными амплитудами порядка $\pm 2 \cdot 10^{-10}$.

При $\alpha = -3.5$ ветви 3, 2 демонстрируют ярко выраженные нелинейные осцилляции (рис. 2 д). Для отдельных пиков 3 ветви характерно появление особенностей типа локального минимума между двумя горбами. Ветви 1, 4 принимают нулевые значения.

При $\alpha = -4.5$ (рис. 2 е) ветви 3, 2 демонстрируют осцилляции с увеличенными амплитудами, ветви 1, 4 остаются с нулевыми значениями. При дальнейшем изменении $\alpha < -4.5$ характер поведения всех четырех ветвей практически не изменяется, что свидетельствует о наличии критического значения фрактального индекса вблизи $\alpha = \alpha_c = -4.5$ для рассматриваемого состояния слоя. Это связано с нелинейным поведением разрывных функций g_{20}, g_{30} из (25), (26) от α. Характер поведения ветвей прямой волны при изменении α качественно совпадает с таковым для обратной волны.

Далее рассмотрим состояние слоя с квантовой точкой (рис. 3, 4). Это состояние описывается основными параметрами $b_1 = b_2 = b_3 = 1$; $n_0 = 14.3267$; $n_c = 9.4793$; $m_0 = 19.1471$; $m_c = 14.7295$; $j_0 = 31.5279$; $j_c = 11.8247$. Из выражения (29) по заданному $p_{0\alpha} = -3.457 \cdot 10^{-11}$ находим усредненные значения для номера слоя j: $j_1 = 19.63070035$, $j_2 = 43.42509965$. При организации итерационного процесса

полагалось $j = j_1$. В этом случае модуль k неявно зависит от n, m и становится случайной функцией. Все четыре ветви для прямой (рис. 3) и обратной (рис. 4) волн демонстрируют существенно различные поведения функции смещения.

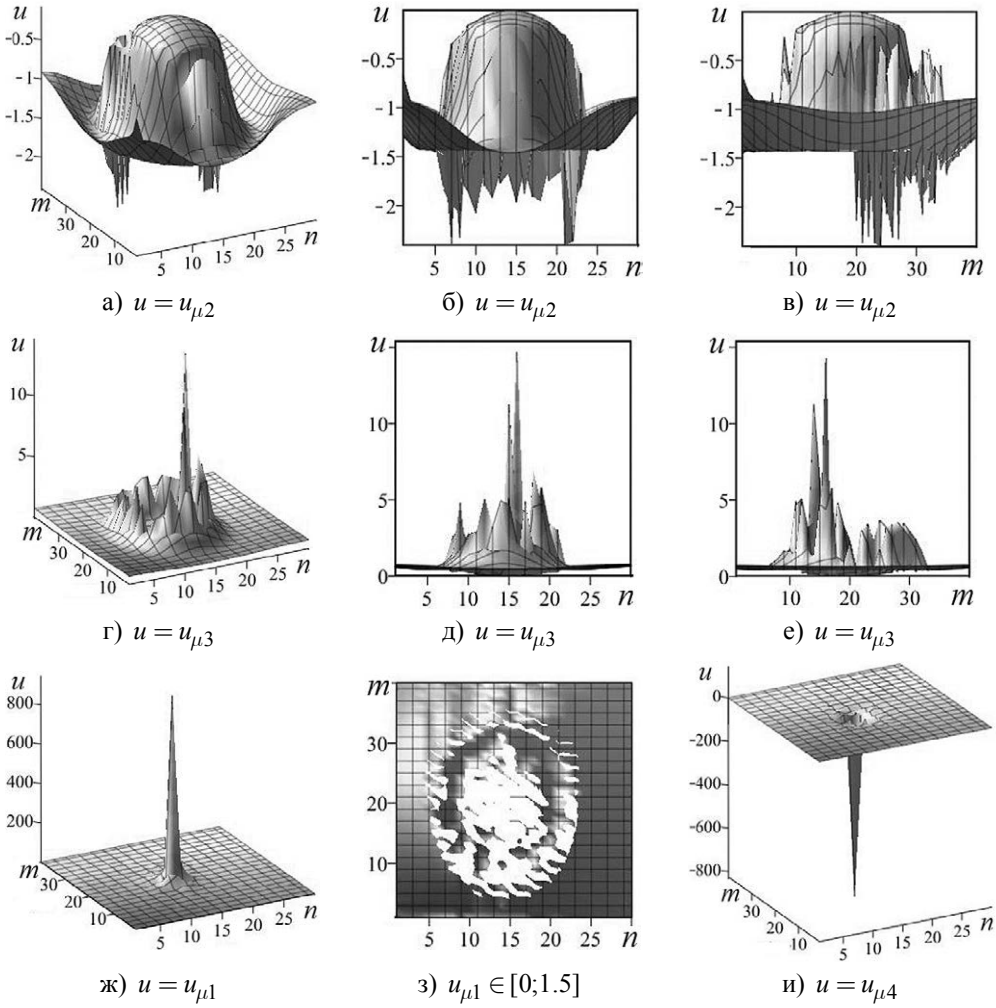
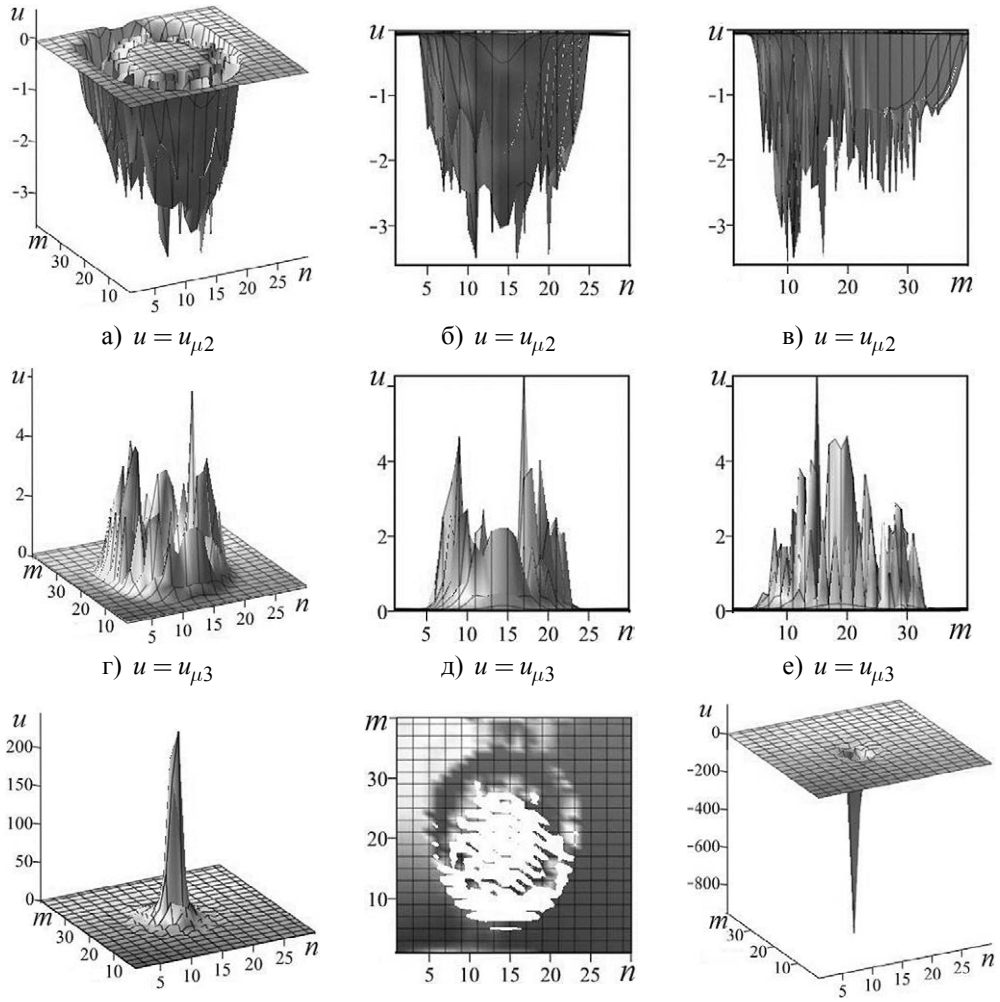


Рис. 3. Зависимости u от n, m при $\alpha = -0.5$ для различных (а, г, ж, и) ветвей прямой волны: проекции на nOu (б, д), mOu (в, е), сечение (з) – вид сверху.

Для ветвей 1, 4 прямой (рис. 3 ж, рис. 3 и) и обратной (рис. 4 ж, рис. 4 и) волн характерно наличие пиков противоположной ориентации с большими амплитудами, что свидетельствует о состоянии слоя с квантовой точкой. Поведение ядра такой квантовой точки существенно отличается от поведения ядер квантовых точек из [13]. Вместо регулярного волнового поведения [13] границы ядер становятся стохастическими. Внутри ядер (рис. 3 з, рис. 4 з) наблюдаются особенности типа островков, перемычек, сужений, ям. Для 2 ветви прямой волны ядро имеет выпуклую форму (рис. 3 а-в), а для обратной волны ядро приближается к плоской форме (рис. 4 а-в). Для 3 ветви прямой волны ядро имеет вогнутую форму типа ямы (рис. 3 г-е), а для обратной волны (рис. 4 г-е) ядро имеет плоское дно. Для границ этих ядер характерно наличие пиков с малыми амплитудами (образуются особенности типа дополнительных ям, перевалов, долин). Эти особенности поведения поля деформации указывают на возникновение эффективного многоямного потенциала в слое с квантовой точкой.



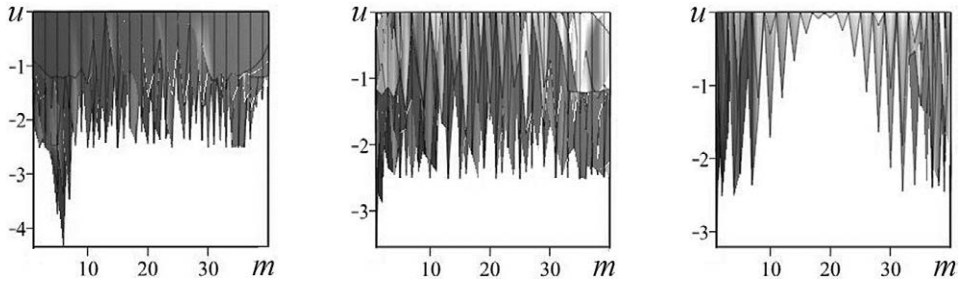
а) $u = u_{\mu 2}$ б) $u = u_{\mu 2}$ в) $u = u_{\mu 2}$

г) $u = u_{\mu 3}$ д) $u = u_{\mu 3}$ е) $u = u_{\mu 3}$

ж) $u = u_{\mu 1}$ з) $u_{\mu 1} \in [0;1.5]$ и) $u = u_{\mu 4}$

Рис. 4. Зависимости u от n, m при $\alpha = -0.5$ для различных (а, г, ж, и) ветвей обратной волны: проекции на nOu (б, д), mOu (в, е), сечение (з) – вид сверху.

Изменение фрактального индекса α приводит к существенному изменению стохастического поведения границ ядер (рис. 5). Так для 2 ветви обратной волны (рис. 4 в) при $\alpha = -2.5$ (рис. 5 а) наблюдается появление стохастического пика вниз на стохастическом фоне с практически постоянной амплитудой. При $\alpha = -4.5$ стохастический

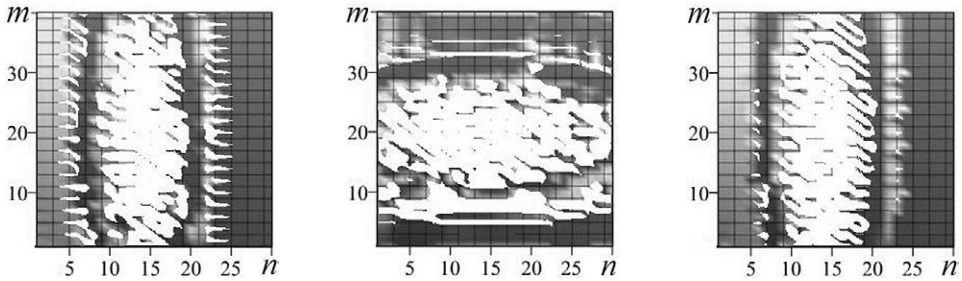


а) $\alpha = -2.5$ б) $\alpha = -4.5$ в) $\alpha = -8.5$

Рис. 5. Зависимости проекций $u = u_{\mu 2}$ на плоскость mOu для обратной волны от m для различных α.

пик исчезает, а стохастический фон остается (рис. 5 б). При дальнейшем изменении α (рис. 5 в) у стохастического фона наблюдается образование провала вблизи $m = m_0$.

При изменении значений полуосей n_c, m_c квантовой точки поведение поля деформации ядра и его границы существенно изменяется. При этом для первой ветви $u_{\varepsilon 1}$ наблюдается эффект ярко выраженной анизотропии (рис. 6 а, б, в). На границах для прямой волны возникает практически периодическая тонкая структура (рис. 6 а), а для обратной волны – структура с мелкими ямами (рис. 6 в).



а) n_c, $3m_c$ б) $3n_c$, m_c в) n_c, $3m_c$

Рис. 6. Сечения $u_{\varepsilon 1} \in [0;1.5]$ (вид сверху) для прямой (а, б) и обратной (в) волн для различных полуосей n_c, m_c при $\alpha = -0.5$.

Выводы. Предложена анизотропная модель для описания основных параметров бинарных черных дыр, бинарных нейтронных звезд, природа источника спина которых носит тензорный характер.

С учетом поля Хиггса выполнены оценки энергий бозона Хиггса, реликтовых фотонов, отклонения температуры реликтового фона. Показано, что природа супервойда или “Холодного реликтового пятна” связана с наличием черной дыры и ее влиянием на реликтовые фотоны.

Для описания переходных сигналов (гравитационных волн, реликтового излучения) предложено использовать модель сверхизлучения Р. Дикке и квантовую статистическую теорию сверхизлучения.

На основе гипотезы о иерархическом строении Вселенной при моделировании поля деформации отдельных структур предложено использовать квантовые модельные системы с переменными параметрами. Наличие переменных параметров в многослойной фрактальной наносистеме приводит к появлению неявной зависимости модуля k от узлов объемной решетки. В результате все четыре ветви функции смещения $u_{\mu i}$ становятся случайными функциями.

Показано, что для слоя без квантовой точки характерно наличие нелинейных осцилляций, которые зависят от фрактального индекса α. Показано, что для слоя с квантовой точкой особенности поведения поля деформации указывают на возникновение эффективного многоямного потенциала. Структура ядер квантовых точек в слое имеет выпуклую, вогнутую и плоскую формы со стохастической границей. Возможно образование стохастического пика и появление провала на стохастическом фоне. Изменение полуосей квантовой точки приводит к эффекту анизотропии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Punturo M. Opening a new window on the Universe: the future Gravitational Wave detectors / M. Punturo // Europhysics news. – 2013. – No 44/2. – P. 17-20.

2. Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger / B.P. Abbott et al. // Phys. Rev. Lett. – 2016. – No 116 (061102). – P. 1-16.
3. Observation of Gravitational Waves from a Binary Neutron Star Inspiral / B.P. Abbott et al. // Phys. Rev. Lett. – 2017. – No 119 (161101). – P. 1-18.
4. Новосядлый Б. Войды – «Пустыни» Вселенной / Б. Новосядлый // Международный научно-популярный журнал по астрономии и космонавтике. Вселенная, пространство, время. – 2016. – № 6 (143). – С. 4-11.
5. Mackenzie R. Evidence against a supervoid causing the CMB Cold Spot / R. Mackenzie // arXiv:1704.03814v1 [astro-ph.CO] 12 p. Apr. 2017.
6. Hawking S. Black Holes and Baby Universes / S. Hawking. – Transworld Publishers, 1994. – 192 p.
8. Skiadas C.H. Chaotic Modeling and Simulation: Analysis of Chaotic Models, Attractors and Forms / C.H. Skiadas and C. Skiadas. – Taylor and Francis/CRC, London, 2009. – 364 p.
9. Abramova O.P. Attractors and Deformation Field in the Coupled Fractal Multilayer Nanosystem / O.P. Abramova, A.V. Abramov // CMSIM Journal. – 2017. – No 2. – P. 169-179.
10. Абрамова О.П. Взаимовлияние аттракторов и отдельных стохастических процессов в связанных фрактальных структурах / О.П. Абрамова // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2017. – № 1. – С. 50-60.
11. Abramov V. S. Model of Nonlinear Fractal Oscillator in Nanosystem // In book Applied Non-Linear Dynamical Systems. Springer Proceedings in Mathematics & Statistics. – 2014. – Vol. 93. – P. 337-350.
12. Abramov V.S. Transient Processes in a Model Multilayer Nanosystem with Nonlinear Fractal Oscillator / V.S. Abramov // CMSIM Journal. – 2015. – N 1. – P. 3-15.
13. Abramov V.S. Cosmological Parameters and Higgs Boson in a Fractal Quantum System / V.S. Abramov // Proceedings. CHAOS-2017 (Barcelona, Spain: 30 May-2 June, 2017). ISAST: Ed. Christos H Skiadas. – 2017. – P. 15-28.
14. Абрамов В.С. Связи Космологических параметров и Бозона Хиггса во фрактальной модели вселенной / В.С. Абрамов // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2017. – № 1. – С. 36-49.
15. Кэрролл Ш. Частица на краю вселенной. Как охота на бозон Хиггса ведет нас к границам нового мира. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. – 352 с.
16. Dicke R.H. Coherent in spontaneous radiation processes / R.H. Dicke // Phys. Rev. – 1954. – V. 93. No 1. – P. 99-110.
17. Bonifacio R., Schwendimann P., Haake F. Quantum statistical theory of superradiance. I. / R. Bonifacio, P. Schwendimann, F. Haake // Phys. Rev. – 1971. – V. A4. No 1. – P. 302-313.
18. Bonifacio R., Schwendimann P., Haake F. Quantum statistical theory of superradiance. II. / R. Bonifacio, P. Schwendimann, F. Haake // Phys. Rev. – 1971. – V. A4. No 3. – P. 854-864.

Поступила в редакцию 27.02.2018 г.

ANISOTROPIC MODEL AND TRANSIENT SIGNALS FROM BINARY COSMOLOGICAL OBJECTS: BLACK HOLES, NEUTRON STARS

V.S. Abramov

Anisotropic model for describing separate binary structures of the Universe are proposed. The relationships between the parameters of gravitational waves, relic photons, the Higgs boson are established, and estimates of these parameters are given on examples of: merging binary black holes, binary neutron stars; “Cold relict spot” (supervoid). Based on the hypothesis of the hierarchical structure of the Universe for describing separate structures, it is proposed to use models of fractal nanosystems (dislocations, quantum dots). The behavior of deformation fields on the fractal index for a number of quantum model systems with variable parameters is investigated. It is shown that the presence of nonlinear oscillations is characteristic for a fractal layer without a quantum dot. Stochastic behavior for the boundaries of the quantum dots cores is observed, an anisotropy effect is possible.

Keywords: fractal structures of the Universe, Higgs boson, gravitational waves, relic photons, binary black holes and neutron stars, anisotropic model, numerical simulation.

Абрамов Валерий Сергеевич
канд. фи.-мат. наук, ст. науч. сотр.,
ГУ «Донецкий физико-технический институт имени А.А. Галкина»,
ул. Р. Люксембург 72, Донецк, 83114
vsabramov@mail.ru

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

УДК 532.57:681.121:502.175:

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ИСТОЧНИКОВ ВОЗБУЖДЕНИЯ ИМПУЛЬСНО-МОДУЛИРОВАННОГО ФЛУОРИМЕТРА

© 2018. ***С.В. Беспалова, С.М. Романчук, Б.А. Готин, В.В. Перебейнос, О.Н. Саакян***

Рассматривается использование флуориметрии хлорофилла фитопланктона в качестве биологического метода оценки состояния окружающей среды. Представлена методика моделирования оптических параметров источников возбуждения импульсно-модулированного флуориметра. Получены результаты моделирования разработанных источников возбуждения с применением представленной методики.

Ключевые слова: биоиндикация, флуоресценция, флуориметр, светоизлучающий диод.

Введение. При всей важности проведения оценки качества окружающей среды на всех уровнях с применением различных подходов (включая физические, химические, социальные и другие аспекты) приоритетной представляется биологическая оценка. Наиболее простым объяснением этому может быть то, что именно состояние различных видов живых существ и самого человека является конечной целью всех природоохранных мероприятий. Традиционно используемые методы физико-химического и аналитического контроля качества окружающей среды не всегда могут дать адекватную картину действия того или иного вещества на целостный организм. Кроме того, многие вещества как природного, так и синтетического происхождения, являются многокомпонентными, что затрудняет их физико-химическую стандартизацию. Преимущество физико-химического контроля – прочная нормативная (документы стандартизации) и организационная (сети химико-аналитических лабораторий) базы. Их недостаток – высокая трудоемкость, низкая оперативность. Биологические методы контроля в ряде ситуаций, позволяют быстро оценивать качество окружающей среды и наличие некоторых загрязнений, не обнаруживаемых химическими методами.

Разнообразие неблагоприятных экологических факторов по номенклатуре, уровням, дозам, сочетаниям, взаимодействиям между собой и биотой столь велико, что только организм, популяция, биоценоз способны объективно отразить силу комплексного воздействия факторов стресса [1, 2]. Именно живой организм представляет собой наиболее чувствительный и интегральный индикатор состояния среды. Поэтому наиболее актуальным в данное время является разработка технологий биомониторинга [3, 4], которые предполагают анализ показателей жизнедеятельности, выбранных по определенным признакам тестовых организмов или их групп (биоиндикаторов) для оценки состояния среды. Помимо интегрирования «слабых» воздействий такой подход потенциально позволяет диагностировать на ранних стадиях появление новых факторов влияния на экосистему (например, новых видов поллютантов), которые не имели места ранее, и, следовательно, не контролировались традиционными методами.

Развитие технологий биомониторинга, в частности поверхностных вод, в первую очередь важно для регионов с высокой концентрацией предприятий тяжелой промышленности, таких как Донбасс. Повышенные объемы сброса неочищенных сточных вод города и промышленных предприятий, большая вероятность

возникновения техногенных аварий с масштабными негативными воздействиями на окружающую среду указывает на необходимость разработки методов и средств оперативного обнаружения загрязнений. Современная система экологического мониторинга состояния поверхностных вод предполагает непрерывное измерение комплекса параметров с максимальным быстродействием для быстрого обнаружения антропогенных воздействий на биоценоз водоема по исследованиям суточной динамики.

Эта задача решается путем создания системы автоматизированного биомониторинга на основе автоматических станций.

Измерение параметров флуоресценции хлорофилла. В настоящее время разработано множество методов биоиндикации изменения состояния экосистем под воздействием антропогенных факторов. Самым чувствительным индикатором состояния растений является фотосинтетический аппарат. Из существующих методов по определению функциональных характеристик растений наиболее перспективный – оценка степени трансформации экосистем по флуоресценции хлорофилла. Изменение флуоресценции при варьировании интенсивности возбуждения могут служить показателем фотосинтетической активности и физиологического состояния фотосинтезирующих организмов. Анализ флуоресценции водорослей и высших растений используется в целом ряде биологических тест-систем, применяемых в экотоксикологии.

Учитывая важность данного направления исследований, в Донецком национальном университете был разработан и сконструирован опытный образец автономного измерительного комплекса, обеспечивающего контроль появления в воде токсических веществ, существенно влияющих на фотосинтетические процессы в клетках водорослей на основе регистрации параметров флуоресценции хлорофилла. Создана аппаратура, позволяющая в режиме реального времени определять параметры флуоресценции хлорофилла в природных условиях в целях получения необходимой информации для слежения за состоянием и прогнозирования численности микроводорослей [5, 6].

Опытная эксплуатация измерительного комплекса выявила ряд недостатков:

- недостаточная чувствительность прибора;
- не обеспечены требуемые параметры источника возбуждения;
- отсутствует возможность работы при наличии фонового света.

Целью настоящей работы является разработка флуориметра с учетом выявленных недостатков, с возможностью оперативного изменения функциональной структуры, с более полным набором предоставляемой информации в том числе разработка и апробация методики расчета источников возбуждения флуориметра.

Источник света возбуждения флуориметра. В современных флуориметрах в качестве источников света возбуждения применяются светоизлучающие диоды (СИД). Свое распространение в данной сфере применения они получили благодаря ряду преимуществ: узкая полоса излучения, большой выбор длин волн, малые габариты, высокая эффективность, низкая стоимость и простота управления.

Для увеличения соотношения сигнал/шум и повышения чувствительности флуориметра необходимо обеспечить однородную освещенность исследуемого образца светом возбуждения с заданной плотностью фотосинтетического фотонного потока. Поэтому при разработке источников света возбуждения флуоресценции необходимо произвести расчеты распределения освещенности исследуемого образца исходя из реальных технических характеристик, производимых СИД. Расчет необходимо начать с определения освещенности в точке на плоскости параллельной плоскости источника света возбуждения с одним СИД.

На рис. 1 представлена плоскость источника света возбуждения с некоторым светодиодом $S\left(x_{s,}x_{s,}0\right)$ и целевой плоскостью с точкой $T\left(x_t,x_t,z\right)$, в которой производится расчет освещенности. $S^{'}\left(x_{s,}x_{s,}0\right)$ – проекция светодиода на освещаемую плоскость.

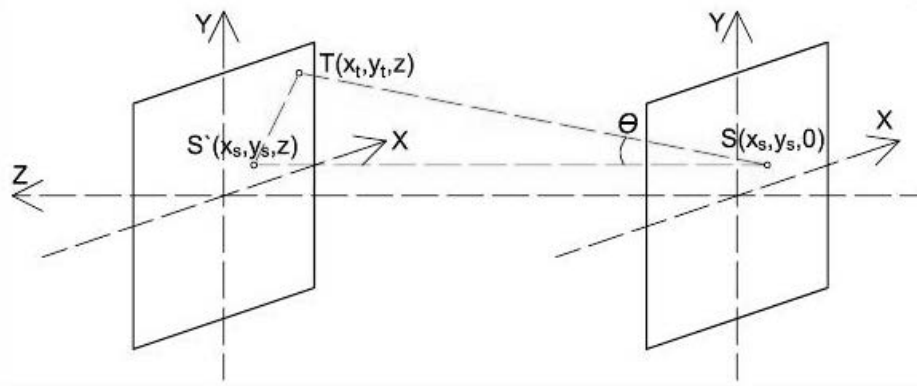


Рис. 1. Упрощенное геометрическое представление задачи

СИД можно считать неидеальным Ламбертовым излучателем с угловым распределением сил света [7]:

$$I\left(\theta\right)=I_0\cos^m\theta, \tag{1}$$

где I_0 – сила света по нормали к излучающей поверхности СИД; θ – угол обзора.

Число m определяется из θ_1 – угла излучения по уровню половины максимальной силы света:

$$m=-\frac{\ln 2}{\ln\left(\cos\theta_1\right)}.$$

Как правило, в документации СИД указываются нормализованные по I_0 данные углового распределения сил света. В таком случае необходимо вычислить I_0, используя взаимосвязь углового распределения сил света с полным световым потоком.

Полный световой поток Ф можно определить интегрированием углового распределения сил света СИД по азимутальным и полярным координатам. Задав систему координат (рис. 2), получим:

$$\Phi=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}I\left(\theta,\varphi\right)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi. \tag{2}$$

Учитывая симметрию углового распределения сил света СИД по азимутальным углам, упрощаем уравнение (2):

$$\Phi=2\pi\int_0^{\pi}I\left(\theta\right)\sin\theta\,d\theta. \tag{3}$$

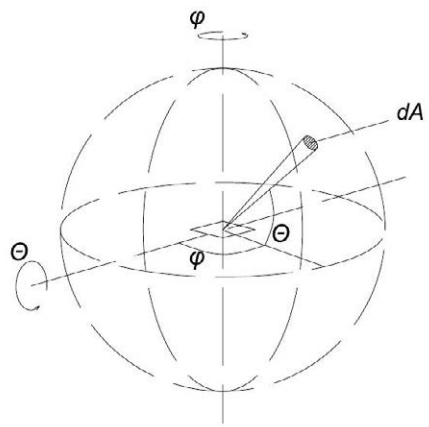


Рис. 2. Светодиод в сферической системе координат: φ – азимутальный угол, θ – полярный угол, dA – элементарная площадь

Подставляя выражение (1) в формулу (3) и решая полученное уравнение относительно I_0, получаем:

$$I_0 = \frac{\Phi}{2\pi \int_0^{\pi} \cos^m \theta \sin\theta \, d\theta}.$$

Если расстояние между СИД и освещаемой поверхностью в 5 и более раз больше его габаритов, то СИД может считаться точечным источником света [8]. Следовательно, к расчету освещенности применим закон обратных квадратов. Таким образом, с учетом угла падения света на поверхность (косинус коррекция) можно рассчитать освещенность в точке:

$$E(\theta, r) = r^{-2} I(\theta) \cos\theta.$$

Согласно заданной системе координат (рис. 1), расстояние от СИД до точки на плоскости вычисляется как

$$r = (x_t - x_s)^2 + (y_t - y_s)^2 + z^2.$$

Угол падения луча в точку освещаемой плоскости вычисляется согласно формуле:

$$\theta = \operatorname{arctg}\left(\frac{\sqrt{(x_t - x_s)^2 + (y_t - y_s)^2}}{z} \right).$$

В документации к СИД, как правило, приводятся фотометрические оптические параметры, учитывающие восприятие света человеком. Однако для данной задачи интерес представляют квантовые величины.

Для перехода от фотометрических параметров освещенности к энергетическим воспользуемся выражением [9]:

$$\Phi_r(\lambda) = \frac{W_{rel}(\lambda)}{683 \int_{400}^{700} V(\lambda) W_{rel}(\lambda) \, d\lambda},$$

где $\Phi_r(\lambda)$ – спектральный поток излучения; $W_{rel}(\lambda)$ – относительная спектральная плотность мощности; $V(\lambda)$ – кривая относительной спектральной световой эффективности.

Энергия фотона с длинной волны λ согласно формуле Планка:

$$E = \frac{hc}{\lambda}.$$

Тогда фотосинтетически активную радиацию можно посчитать как:

$$PPF = \frac{10^{-3}}{N_a hc} \int_{400}^{700} \lambda \Phi_r(\lambda) \, d\lambda.$$

С учетом вышеизложенной методики были разработаны источники света возбуждения флуориметра.

Источники света возбуждения представляют собой матрицы сверхмощных светодиодов, по 16 светодиодов в каждой. Совмещают в себе 4 источника измерительного света и источник света насыщающей вспышки/действующего света.

На рис. 3 представлено расположение светодиодов на разработанных источниках с белыми 3 500 K (W), синими 450 нм (RB), синими 470 нм (B), оранжевыми 590 нм (A), красно-оранжевыми 620 нм (R) светодиодами.

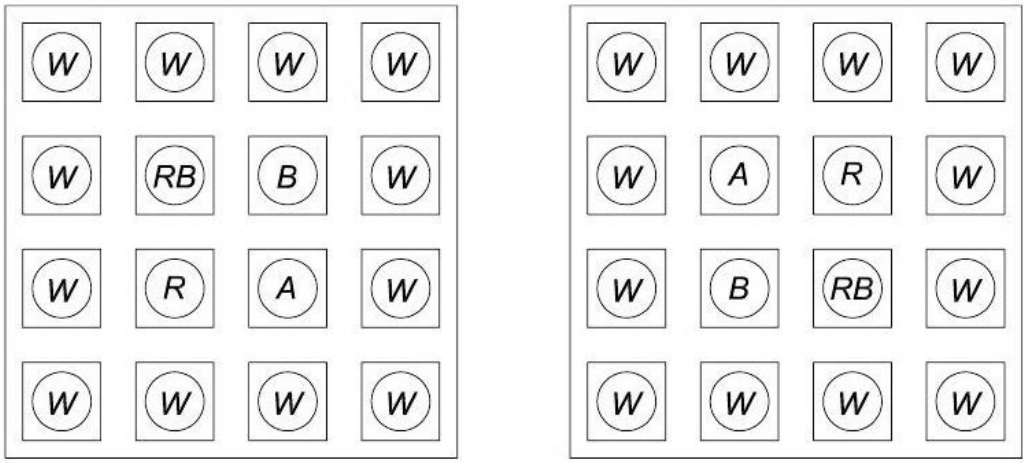


Рис. 3. Топология источников света возбуждения

Для реализации данной топологии были выбраны сверхмощные светодиоды CREE XP-E. Данные светодиоды обладают достаточной мощностью для обеспечения необходимой освещенности пробы и широким углом излучения.

Ниже представлены диаграммы распределения интегральной освещенности от измерительного света каждой длины волны на плоскости расположенной на расстоянии 30 мм от источников света возбуждения (рис. 4–7). Диаграммы представлены для номинального тока светодиодов 350 мА, и скважности модулированного света 0.001.

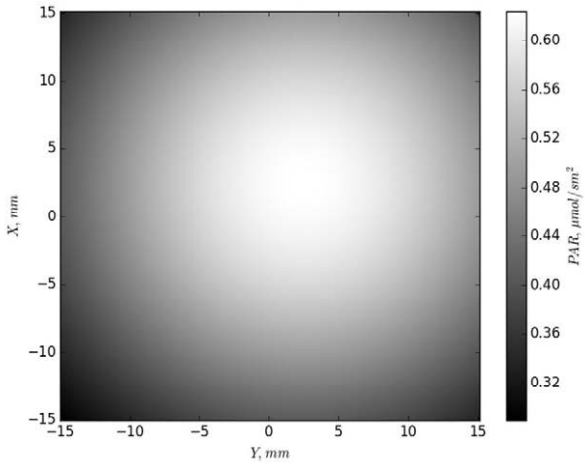


Рис. 4. Диаграмма распределения освещенности, синий 450 нм. max = 0.62 , min = 0.29

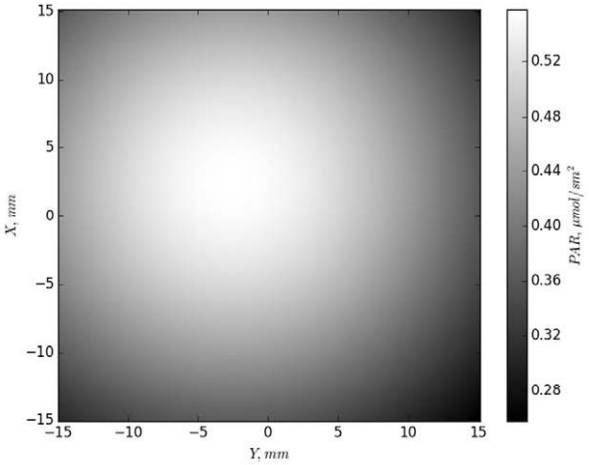


Рис. 5. Диаграмма распределения освещенности, 470 нм. max = 0.56 , min = 0.26

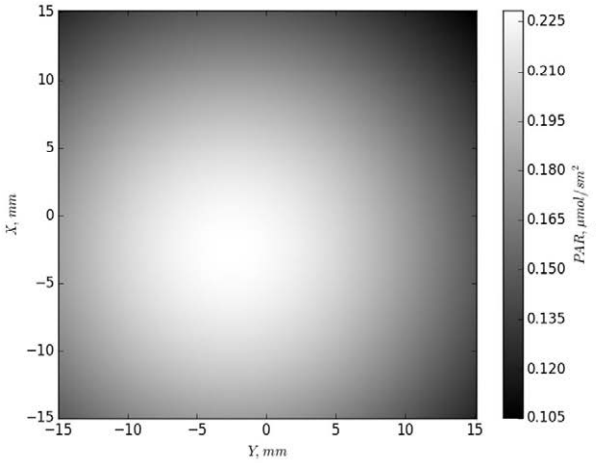


Рис. 6. Диаграмма распределения освещенности, оранжевый 590 нм. max = 0.23 , min = 0.11

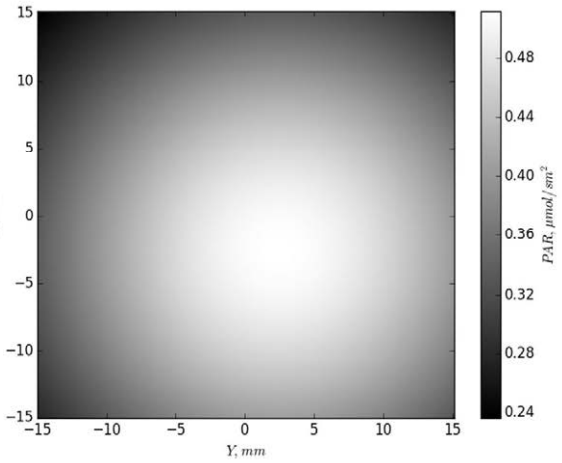


Рис. 7. Диаграмма распределения освещенности, красно-оранжевый 620 нм. max = 0.51 , min = 0.24

На рис. 8 представлена диаграмма распределения освещенности на плоскости расположенной на расстоянии 30 мм от источников света возбуждения от насыщающей вспышки при максимальном токе светодиодов (1 А).

В флуориметрах для исследования флуоресценции фитопланктона образец в кювете распределен по объему. Освещенность убывает обратно пропорционально квадрату расстояния от источника света возбуждения. Для обеспечения равномерности распределения освещенности кюветы в «плоскости видимости» фотоэлектронного умножителя, источники света возбуждения сделаны симметричными и расположены друг напротив друга.

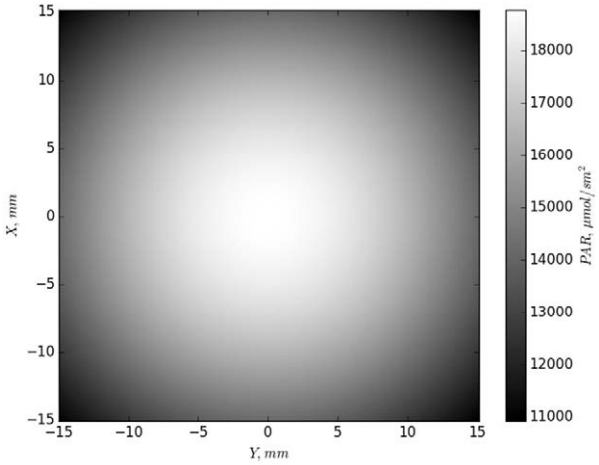


Рис. 8. Диаграмма распределения освещенности, белый 3500 К. max = 18776 , min = 10933

На рис. 9 представлено распределение освещенности кюветы в «плоскости видимости» фотоэлектронного умножителя от каждого источника в отдельности (кривые 2, 3) и суммарное от двух источников (кривая 1).

Из рис. 9 видно, что освещенность от одного источника света возбуждения у противоположных стенок кюветы отличается практически вдвое. Симметричное исполнение частично компенсирует данный эффект и суммарное распределение освещенности (кривая 1) отличается не более чем на 7%.

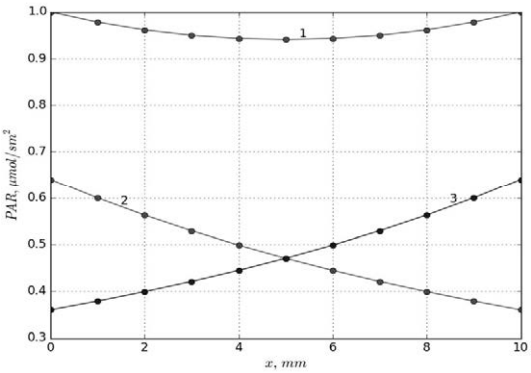


Рис. 9. Относительное распределение освещенности в кювете в «плоскости видимости» фотоэлектронного умножителя

Выводы. В данной работе были рассчитаны характеристики источников света возбуждения флуориметра. При практической реализации флуориметра с заданными характеристиками экспериментально подтверждена эффективность использования

представленной методики для предварительных расчетов оптической системы. Данная методика позволила оптимизировать выбор геометрии оптических каналов с целью увеличения соотношения сигнал/шум и повышения чувствительности флуориметра, а также взвешенно подойти к выбору оптических компонентов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Beek B. Bioaccumulation new aspects and developments / B. Beek. – Springer, 2010. – 298 p.
2. Neff J. M. Bioaccumulation in marine organisms: effect of contaminants from oil well produced water / J. M. Neff. – Elsevier Science, 2002. – 472 p.
3. Мелехова О. П. Биологический контроль окружающей среды. Биоиндикация и биотестирование / О. П. Мелехова, Е. И. Егорова, Т. И. Евсеева и др. – Москва : Академия, 2007. – 288 с.
4. Гончарова Н. В. Биомониторинг / Н. В. Гончарова. – Минск : Междунар. гос. экологич. ун-т им. А.Д. Сахарова, 2011. – 60 с..
5. Использование флуоресценции хлорофилла «а» для биотестирования водной среды / В.А.Осипов, Г.М. Абдурахманов, А.А. Гаджиев [и др]. // Юг России: экология, развитие. – 2012. – № 2. –С. 93-100.
6. Основы технологии автоматизированного биомониторинга водных ресурсов с использованием флуорометрии хлорофилла фитопланктона / С. В. Беспалова, С. М. Романчук, Н. М. Лялюк [и др]. // Вестник Донецкого нац. ун-та. Серия А. Естественные науки. – 2012. – Вып. 2. – С. 157-166.
7. P. Lei. Designing LED array for uniform illumination based on local search algorithm / P. Lei, Q. Wang, H. Zou // Journal of the European Optical Society - Rapid publications – 2014 – Vol. 9, № 14014 – P. 14.
8. Moreno I. LED array: where does far-field begin? / Moreno I, Ching-Cherng Sun // Proc. Of SPIE – 2008 – Vol. 7058 – LED II.
9. Photometry and Photosynthesis: From Photometry to PPFD [Электронный ресурс] : / Ian Ashdown // All Things Lighting blog – Режим доступа: http://agi32.com/blog/2014/12/10/photometry-and-photosynthesis/

Поступила в редакцию 20.02.2018 г.

SIMULATION OF FIELD SOURCE`S OPTICAL CHARACTERISTICS OF PULSE-MODULATED FLUOROMETER

S. Bespalova, S. Romanchuk, B. Gotin, V. Perebeinos, O. Saakyan

The consumption of chlorophyll fluorometer of phytoplankton in the capacity of biological method of environment state value is considered. The method of simulation of field source`s optical characteristics of pulse-modulated fluorometer is presented. The results of worked out field sources simulation with involving the use of present method are obtained.

Key words: bioindication, fluorescence, fluorometer, light-emitting diode.

Беспалова Светлана Владимировна
доктор физико-математических наук, профессор;
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
г. Донецк, ректор.
E-mail: donnu.rector@mail.ru

Романчук Сергей Михайлович
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
г. Донецк, старший научный сотрудник.
E-mail: s.romanchuk@donnu.ru

Готин Богдан Александрович
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
г. Донецк, инженер.
E-mail: prometey256@gmail.com

Перебейнос Валерий Валериевич
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
г. Донецк, инженер 2 категории.
E-mail: v.perebeinis@gmail.com

Саакян Ольга Николаевна
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
г. Донецк, научный сотрудник.
E-mail: Saakyan_olya@mail.ru

Bespalova Svetlana
Doctor off Physico-Mathematical Sciences,
Full Professor;
Donetsk National University, Donetsk;
Rektor

Romanchuk Serhii
Donetsk National University, Donetsk;
Senior research associate.

Bogdan Gotin
Donetsk National University, Donetsk;
Engineer.

Perebeinos Valeriy
Donetsk National University, Donetsk;
Engineer.

Saakyan Olga
Donetsk National University, Donetsk;
Research associate.

Х И М И Ч Е С К И Е Н А У К И

УДК 541.67+547.288.4+547.781

ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ОКСИМОВ ИМИДАЗОЛИЕВОГО РЯДА В РАСТВОРАХ. I. ДИХЛОРИД 1,3-БИС[(3`-МЕТИЛИМИДАЗОЛ-1`-ИЛ)-2-ОКСИМИНОПРОПАНА В УКСУСНОЙ КИСЛОТЕ

© 2018. ***С.А. Гребенюк, С.Л. Хилько, Т.М. Прокопьева, В.А. Михайлов***

Методами ЯМР 1H, 13C, HSQC, HMBC изучены строение дихлорида 1,3-бис(3`-метилимидазолий-1`-ил)-2-оксиминопропана и состояние в растворе уксусной кислоты. Выявлена магнитная неэквивалентность ядер водорода и углерода в формально идентичных син- и анти- имидазолий-содержащих фрагментах. Предложена модель преимущественной конформации дикатиона, объясняющая наблюдаемые характеристики спектров.

Ключевые слова: оксим; имидазолий; строение дикатиона; состояние в растворе; 1H, 13C, 2D ЯМР.

Введение. В последние десятилетия изучение физико-химических характеристик ионных жидкостей, в том числе, на основе гетероциклических соединений с кватернизованным атомом азота (так называемые «близнецы» или Gemini [1]) находится в центре внимания исследователей. Это связано как с необычностью свойств ионных жидкостей, так и с возможностью применения на практике [2, 3], включая переработку углеводородов [4, 5] и углеводов [6], создание устройств для хранения и преобразования электроэнергии [7–9].

Особое место в этом ряду занимают дикатионные производные имидазола [10–13]. Соединения этого класса проявляют уникальную способность катализировать в аэробных условиях столь разнородные процессы, как реакции С-С-сочетания [14] и процессы деструкции экотоксикантов [15], и др. Поверхностно-активные вещества на основе дикатионных производных имидазола характеризуются очень низкими значениями критических концентраций мицеллообразования [1, 16], в отличие от многих других болаамфифильных соединений [17].

Существенное влияние на свойства соединений этого класса оказывает природа спейсера – цепочки атомов, связывающей два имидазольных фрагмента. Влияние спейсера на свойства диимидазольных ионных жидкостей изучено преимущественно на примере углеводородных полиметиленовых цепочек [18–20]. Основное внимание уделялось термодинамическим и спектральным свойствам самих ионных жидкостей, а также мицеллообразованию в растворах [19, 21–23] и различным проявлениям этого процесса. При этом было отмечено, что сравнительно небольшие изменения в строении имидазолиевых солей на молекулярном уровне могут оказывать существенное влияние как на пространственную организацию в кристалле [24], так и на свойства надмолекулярных агрегатов [25–27] в растворе. Таким фактором может быть замена конформационно подвижного метиленового звена (включающего sp^3-гибридный атом углерода) на более жесткий фрагмент, включающий sp^2-гибридный атом углерода. К настоящему времени число исследований по влиянию гибридизации атома углерода в составе спейсера на строение и свойство дикатионных имидазолиевых солей крайне ограничено [1, 11].

В настоящей работе предпринята попытка изучить влияние спейсера, содержащего sp^2-гибридный атом углерода, на строение и свойства бис-имидазолиевого катиона. Весьма плодотворным подходом при изучении подобных явлений оказывается применение метода ядерного магнитного резонанса [25, 26, 28–31].

В качестве модельной системы выбран дихлорид 1,3-бис(3`-метилимидазолий-1`-ил)-2-оксиминопропана (оксим 1, рис.1) в уксусной кислоте.

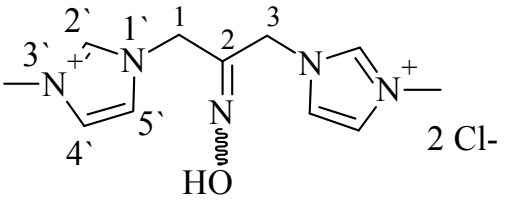


Рис. 1. Дихлорид 1,3-бис(3`-метилимидазолий-1`-ил)-2-оксиминопропана (оксим 1) со схемой нумерации атомов в имидазолиевом цикле в левой части

Это соединение проявляет выраженную реакционную способность в процессах гидролитического расщепления сложных эфиров-экотоксикантов и служит родоначальником целой гаммы высокоактивных реагентов, совмещающих в водных растворах свойства нуклеофила и мицеллообразователя [15]. Уксусная кислота в качестве растворителя выбрана из соображений высокой растворимости в ней оксима 1 и высокой химической устойчивости его растворов.

Химическая устойчивость индивидуальных диимидазолиевых солей и растворов оксимов зачастую оказывается неочевидной [12] и требует специальной оценки в каждом отдельном случае [32]. Природа растворителя оказывает заметное влияние на ЯМР-свойства имидазолиевых соединений, судя по известным примерам [30, 33], и это является предметом изучения.

Экспериментальная часть. Дейтерированная уксусная кислота CD_3COOD Aldrich использовалась без дополнительной очистки. Рутинные спектры 1H и 13C записаны на спектрометре Bruker Avance II (9.4 Тл) с использованием стандартного набора параметров, при температуре 24 ^oC. Результаты приведены в обычной шкале δ, в миллионных долях, внутренний стандарт – тетраметилсилан. Двумерные эксперименты HSQC и HMBC проведены с использованием стандартных процедур «hsqcgpph» и «hmbcgplpndqf» из библиотеки программ TopSpin 2.1, обработка сигналов спада свободной индукции – в TopSpin 3.5pl7. Образец для исследования приготовлен растворением навески оксима 1 во взвешенном количестве растворителя; его моляльность составляет 0.3550 моль/кг, что соответствует молярности ~0.37 моль/л (без учета увеличения объема при растворении, принимая, что плотность CD_3COOD равна плотности уксусной кислоты) и весовой концентрации 9.8 мас. %.

Для замены хлорид-иона на ацетат-ион поступали следующим образом. Навеску свежепрокаленного карбоната натрия (0.01510 г; 1.42×10^{-5} моля) растворяли в CD_3COOD (1.00 г). По окончании выделения пузырьков углекислого газа к этому раствору добавляли навеску (0.04905 г; 1.60×10^{-5} моля) оксима 1 и растворяли при легком нагревании и перемешивании. Образующаяся взвесь расслаивается в течение примерно часа. Надосадочную жидкость осторожно переносили в ампулу для ЯМР и выдерживали еще около часа до полного осветления раствора. Образующийся плотный осадок занимает очень малую часть объема (едва заметен), находится вне зоны регистрации сигнала и не препятствует записи спектра.

Дихлорид 1,3-бис(3`-метилимидазолий-1`-ил)-2-оксиминопропана получен ранее, все его характеристики приведены в предыдущей публикации [15].

Результаты и обсуждение. Высокая концентрация растворов, использованных в работе, не способствует получению хорошо разрешенных спектров, однако обеспечивает возможность проведения времязатратных двумерных экспериментов. Раствор в уксусной кислоте устойчив во времени, спектр ПМР хорошо воспроизводится в течение как минимум двух недель (рис. 2). Это свойство оказалось очень важным, поскольку позволило подобрать параметры записи двумерных спектров на одном и том же образце в течение приемлемого временного интервала.

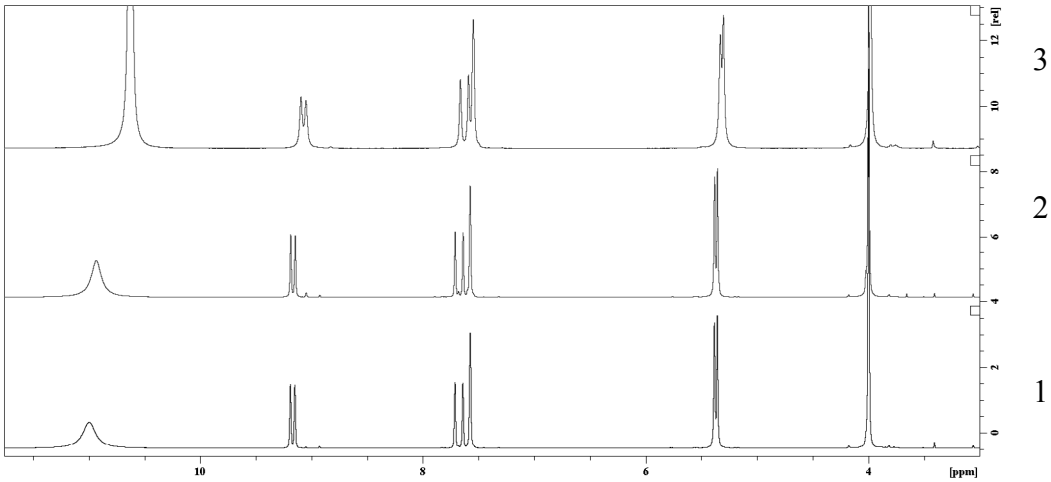


Рис. 2. Спектр ЯМР 1Н раствора оксима в CD_3COOD (1); спектр этого же образца через 2 недели (2); спектр ЯМР 1Н раствора диацетата оксима в CD_3COOD (3)

Сопоставление спектров ЯМР 1Н и 13С (рис. 2 и 3) позволяет сделать предварительный вывод: в молекуле дикатионного оксима эквивалентны только протоны метильных групп, все остальные атомы магнитно неэквивалентны (сигналы растворителя регистрируются в более слабом и более сильном поле). Собственно величины химических сдвигов протонов и углеродов в спектрах оксима достаточно типичны для имидазолиевых солей [25, 26, 28–31]. Положение сигналов в спектрах ЯМР 1Н солей имидазолия зачастую зависит от противоаниона [31]. В случае раствора

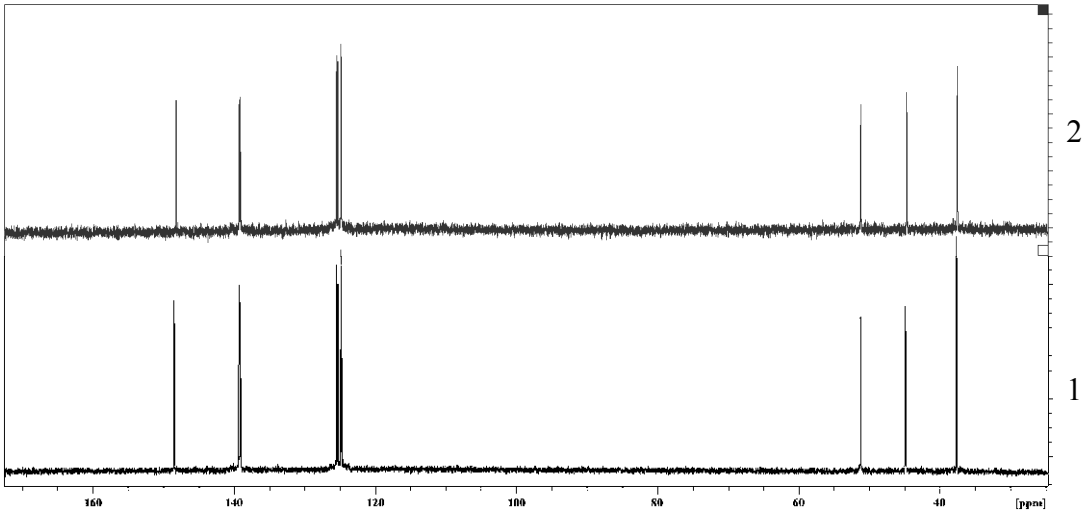


Рис. 3. Спектр ЯМР 13С дихлорида оксима 1 (1) и диацетата оксима 1 (2)

оксима в уксусной кислоте замена хлорид-иона на ацетат не приводит к существенным изменениям в спектре (рис. 2 и 3). Структуру дикатионного оксима правильнее представить в виде сольватноразделенной ионной пары, и неэквивалентность атомов в катионе не связана с влиянием противоаниона.

Следует иметь в виду, что атомы углерода C(4) и C(5) неразличимы только в симметричном катионе 1,3-диметилимидазолия. Уже в катионе 1-этил-3-метилимидазолия сигналы этих атомов различны [34], как и сигналы соответствующих атомов водорода. В бис-имидазолиевых катионах с полиметиленовым спейсером химические сдвиги всех атомов в циклах попарно идентичны (т.е. одинаковы для атомов C(2) двух разных циклов, для атомов C(5) двух разных циклов, и т.д.) [13, 16]. Для выяснения причин неэквивалентности атомов в структуре дикатионного оксима были проведены двумерные эксперименты.

Двумерные спектры HSQC и HMBC приведены на рис. 4. Спектры записаны для всего диапазона изменения химических сдвигов водорода и углерода. Они подтверждают предварительные отнесения, которые можно было бы сделать на основании одних лишь рутинных спектров. Сигналы в спектрах 1H ЯМР 3.9 м.д. (и 37.66 и 37.60 м.д. в спектрах 13C) относятся к метильным группам; сигналы 5.38 и 5.35 м.д. (а также 44.9 и 51.24 в спектрах 13C) – к метиленовым группам; сигналы в области 7.5 – 7.8 м.д. (124.6 – 125.5 м.д. в спектре 13C) – к имидазолиевым атомам водорода в положениях 4 и 5; сигналы в области 9.2-9.3 м.д. (139.11 и 139.33 м.д. в спектрах 13C) - к имидазолиевым атомам водорода в положениях 2; уширенный сигнал 12 м.д. – обменный сигнал гидроксила и остаточной воды; сигнал 148.5 м.д. – к оксимному атому углерода.

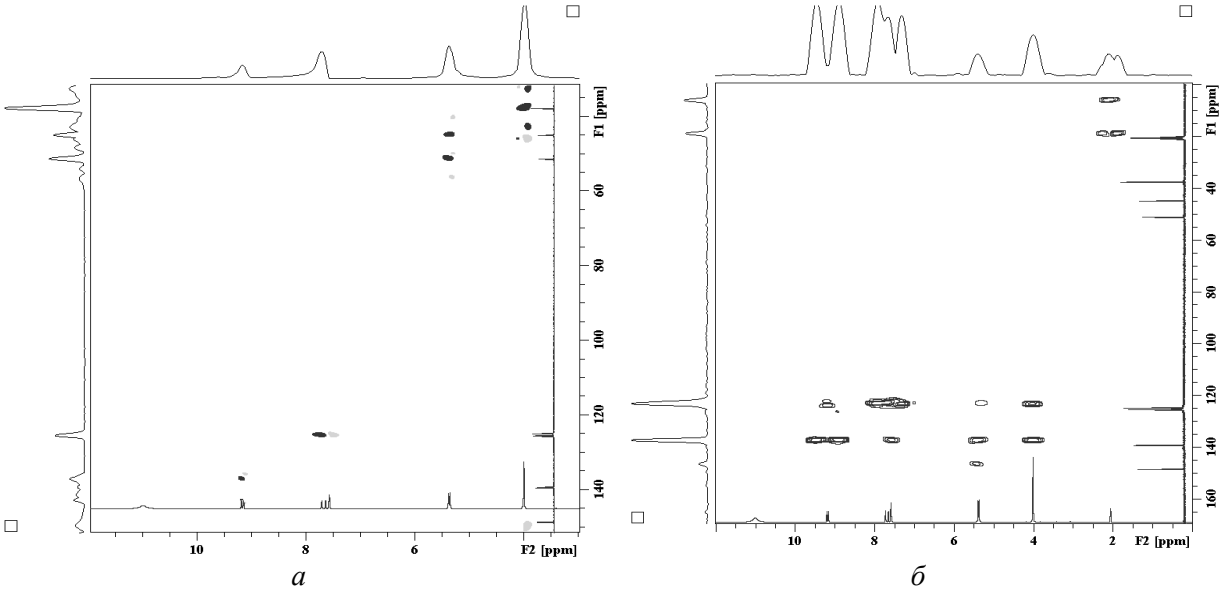


Рис. 4. Двумерные спектры HSQC (а) и HMBC (б) оксима 1

При проведении двумерных экспериментов встретились как хорошо известные проблемы методологии HSQC и HMBC [34], так и не встречавшиеся ранее. В молекуле дикатионного оксима присутствуют sp^2- и sp^3-гибридизованные атомы углерода, из-за этого диапазон изменения химических сдвигов очень велик. В спектрах HMBC появляются «химерные» утроенные сигналы, боковые составляющие которых отсутствуют в одномерных спектрах. Разрешение в обзорном спектре даже при максимальных размерах спада свободной индукции (> 4 K) оказывается меньше разницы химических сдвигов некоторых сигналов.

Визуально синглетные (в одномерном спектре 1H) сигналы имидазолиевых протонов на самом деле являются мультиплетами, с очень близкими значениями химических сдвигов, и попытки улучшить разрешение путем увеличения параметра TD (число прохождений цикла возбуждения-записи) приводят к распаду мультиплета на составляющие и катастрофическому падению интенсивности кросс-пика. Кроме того, интенсивности кросс-пиков различных участков спектра различаются в такой степени, что их совместное детектирование становится затруднительным даже при большом числе сканирований и повторений цикла.

Более детальное отнесение становится возможным при записи отдельных участков спектра [35]. Ограничения при этом связаны с появлением сигналов-«чужаков», что требует тщательного подбора параметров в каждом окне. На рис. 5 представлены спектры HSQC для метиленовых групп и имидазолиевых колец.

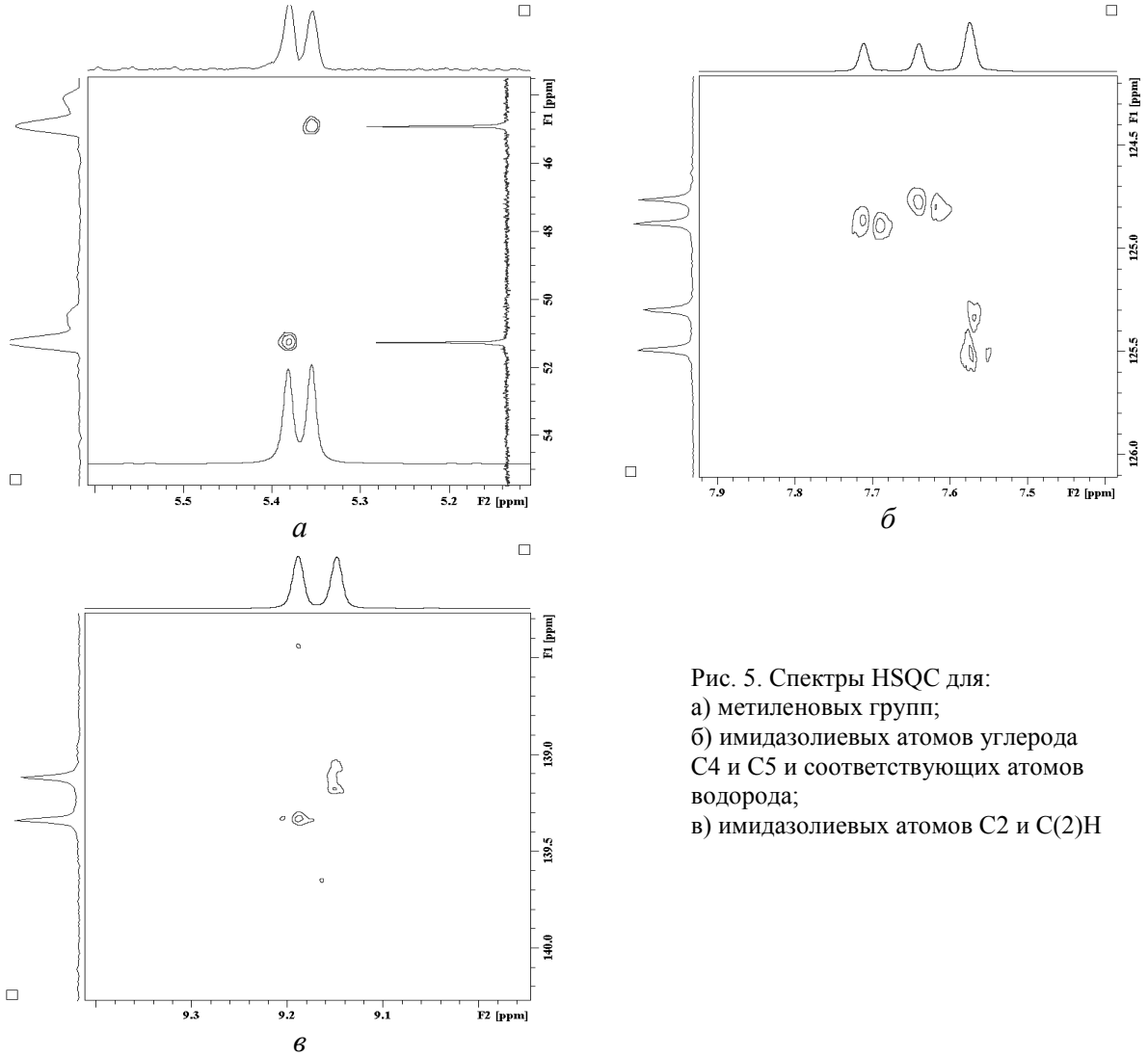
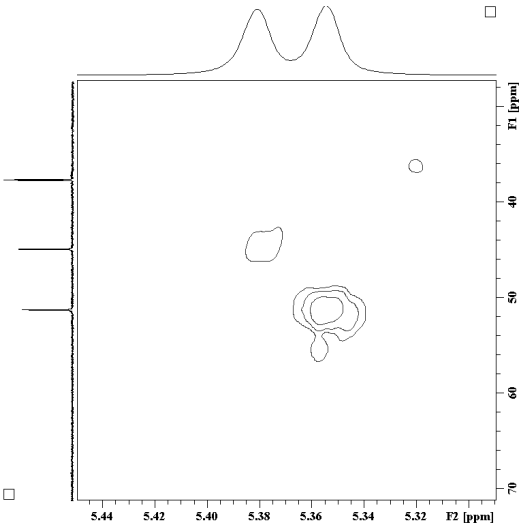


Рис. 5. Спектры HSQC для:
а) метиленовых групп;
б) имидазолиевых атомов углерода C4 и C5 и соответствующих атомов водорода;
в) имидазолиевых атомов C2 и C(2)H

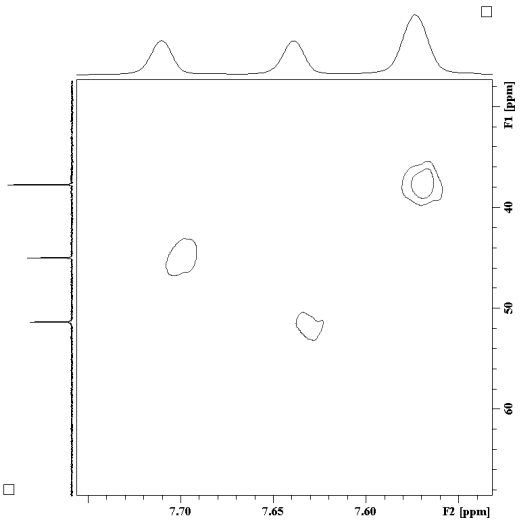
На двумерные спектры наложены соответствующие фрагменты одномерных спектров 1H (по оси X) и 13C (по оси Y). Из-за того, что сигналы расположены очень тесно, разрешенные спектры возможны только в весьма узких окнах (< 2 м.д. по частотному каналу F2 и 2–15 м.д. по каналу F1).

Сигнал 7.57 м.д. выходит синглетом в рутинном спектре 1H ЯМР, однако в двумерном спектре HSQC дает два кросс-пика с разными атомами углерода и относится к протонам в положении 5 двух разных имидазолиевых циклов. Для записи спектров HMBC пришлось выбирать еще более узкие окна по частотному каналу F2 (по протону), чтобы уложиться в приемлемые диапазоны по времени эксперимента и по размеру сигнала спада свободной индукции.

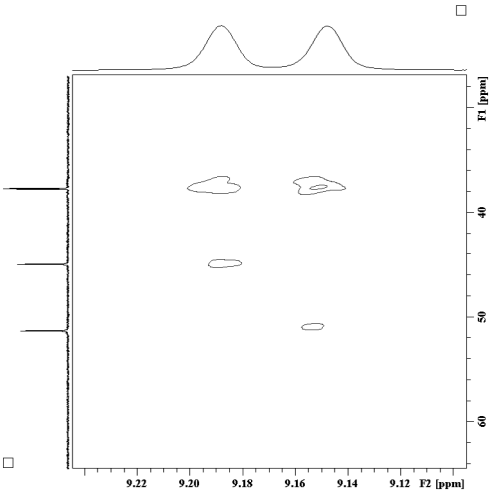
Процедура оказалась требовательна к выбору параметра cnst13 (ожидаемой константы спин-спинового взаимодействия более чем через одну связь). Этот параметр задавали в диапазоне от 3-х до 20-ти герц с шагом в 3–5 герц. При этом не удалось выявить дальние взаимодействия (с малыми константами). Для кросс-пиков через три связи оптимальными оказались значения 10 Гц (для протонов в положении 2), 15 Гц (для протонов в положении 4 и 5) и 20 Гц (для метиленовых протонов). Хорошо разрешенные кросс-пики выявлены только для метиленовых углеродов, значительно различающихся по химическому сдвигу (44.88 и 51.24 м.д.). Для всех имидазолиевых атомов углерода C4 и C5 регистрируется единый кросс-пик, как и для всех углеродов C2. Поэтому на рис. 6 представлены лишь сильнопольные части спектров HMBC как наиболее информативные. Составить представление о слабопольной части можно по обзорному спектру (рис. 2).



а



б



в

Рис. 6. Спектры HMBC для:
а) метиленовых групп CH_2;
б) имидазолиевых атомов водорода C(4)H и C(5)H;
в) имидазолиевых атомов C(2)H

В целом эти результаты позволяют надежно соотнести почти все сигналы в спектрах 1H и 13C дихлорида 1,3-бис(3`-метилимидазолий-1`-ил)-2-оксиминопропана в уксусной кислоте (таблица). Для простоты восприятия в графе молекулы выделены две магнитно неэквивалентные субъединицы А и Б; каждая субъединица включает метиленовую группу, имидазольное кольцо и метильную группу (рис. 7). Обозначение «А» произвольно присвоено субъединице с меньшим значением химического сдвига метиленового углерода (44.88 м.д.).

Таблица

Сигналы в спектрах 1H и 13C и кросс-пики в спектрах HSQC и HMBC дихлорида 1,3-бис(3`-метилимидазолий-1`-ил)-2-оксиминопропана

1H	13C	HSQC	HMBC	Отсутствует в HMBC	Отнесение
3.9958	**37.60; 37.66**	37.6	–		
5.3541	44.8833	44.9	52, 125, 139, 149	37.6	A-CH_2
5.3806	51.2374	51.2	45, 124, 139, 149	37.6	B-CH_2
7.5732 (7.5697)	125.2912	125.33	37, 125, 139		B-C(4)H
7.5732 (7.5756)	125.4845	125.5	37, 125, 139		A-C(4)H
7.6386	**124.7562**,	124.76	52, 125, 139,		**B-C(5)H**
7.7100	**124.8717**	124.87	45, 125, 139		**A-C(5)H**
9.1475	139.1118	139.1	37, **51**, 125,	44.9,139, 148	B-C(2)H
9.1878	139.3336	139.35	37, **45**, 125,	51.2, 139, 148	A-C(2)H
–	148.1020	–			>C=NOH
0.9950					NOH

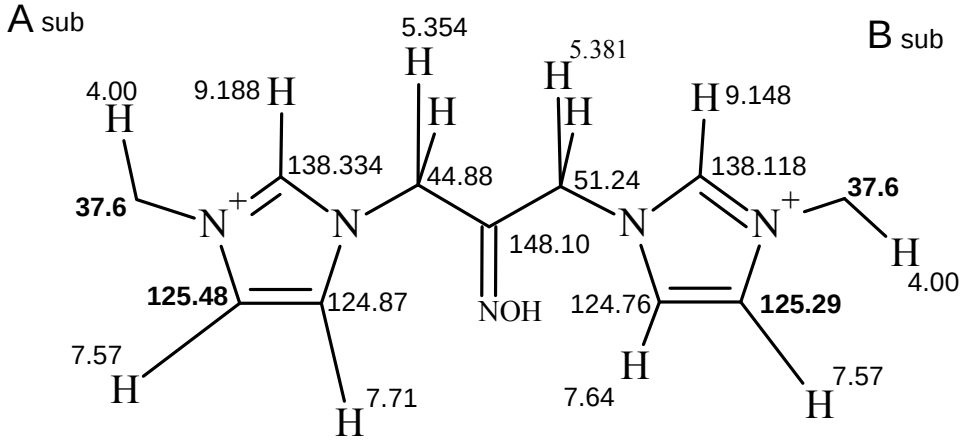


Рис. 7. Отнесение сигналов в спектрах дихлорида 1,3-бис(3`-метилимидазолий-1`-ил)-2-оксиминопропана в уксусной кислоте

Разрешение в доступных на сегодняшний день двумерных экспериментах не позволяет надежно отнести очень близкие по химическому сдвигу сигналы атомов углерода метильных групп (37.60 и 37.66 м.д.) и в положениях 4 имидазолиевых колец (125.29 и 125.48 м.д.). Отнесение для имидазолиевых углеродов С4 сделано на основании вида спектра (рис. 8) в предположении, что соотношение интенсивностей для углеродов С4 в субъединицах А и В такое же, как для сигналов углеродов С5; его следует рассматривать как предварительную оценку. Химические сдвиги для метильных атомов углерода округлены до десятых, эти величины и химсдвиги для атомов С4 приведены на рис. 6 и жирным шрифтом в таблице.

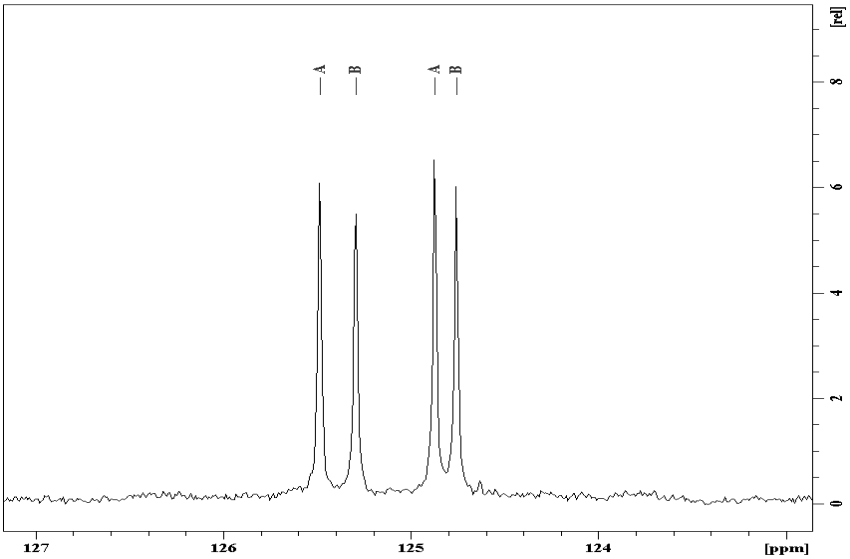


Рис. 8. Фрагмент спектра ЯМР 13С для С(4) и С(5) атомов

Наибольшие различия в экранировании магнитноактивных ядер в субъединицах А и В проявляются вблизи центрального sp^2-гибридного атома углерода, и с удалением от него уменьшаются вплоть до невозможности выявить в обычных условиях. Интересно, что атомы углерода в положениях 4 имидазольных циклов дезэкранированы в большей степени, чем атомы углерода в положениях 5 (их химические сдвиги больше).

Это обстоятельство можно интерпретировать как преимущественную локализацию положительного заряда в области атома N(3), нежели N(1) имидазольных циклов. В то же время атомы водорода в положениях 5 резонируют в более слабом поле (дезэкранированы в большей степени), нежели атомы водорода в положениях 4.

Одним из объяснений такому положению сигналов может быть влияние противоиона, в частности, его преимущественная локализация вблизи определенных положений имидазолиевого цикла [36]. Вполне вероятно, что в таком малополярном растворителе, как уксусная кислота, дикатионный оксим 1 существует в виде ионных пар.

Известно, что положение сигналов в спектрах ЯМР имидазолиевых солей сильно зависит от противоиона [31]. Однако замена противоиона – хлорид-иона на ацетат-ион – не приводит к существенным изменениям в спектрах 1Н и 13С (рис. 2 и 3), и это противоречит версии о решающем влиянии противоиона. С большей вероятностью следует отнести эти особенности в спектрах к внутренним свойствам дикатиона оксима 1.

Очевидно, эти различия в первую очередь связаны с различной ориентацией субъединиц относительно несимметричного оксимного фрагмента. В спектроскопии ЯМР оксимов накоплен значительный, хотя и разнородный экспериментальный материал. Неоднократно указывалось, что при прочих равных условиях атом углерода в син-положении относительно кислорода и C=N-связи резонирует в более сильном поле, нежели атом углерода в анти-положении [37, 38]. Известен пример подтверждения такого отнесения выявлением эффекта Оверхаузера для син-конфигурации гидроксильного водорода с альфа-углеродным атомом [39]. Если это наблюдение носит общий характер, то в дикатионе оксима 1 субъединица А находится в син-положении относительно C=N-связи оксимной группы, а субъединица В – в анти-положении. Обращает на себя внимание то обстоятельство, что кросс-пик протонов метиленовой группы субъединицы А в HMBC спектре намного менее интенсивен, чем кросс-пик таких же протонов субъединицы В (рис. 9).

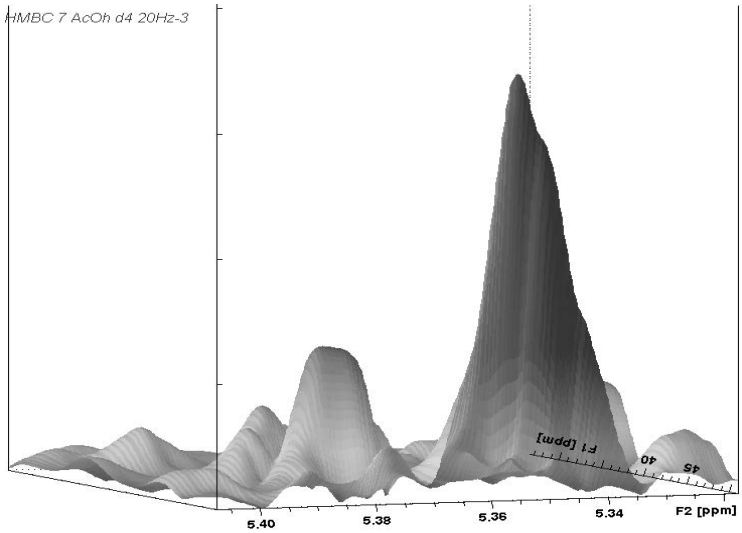
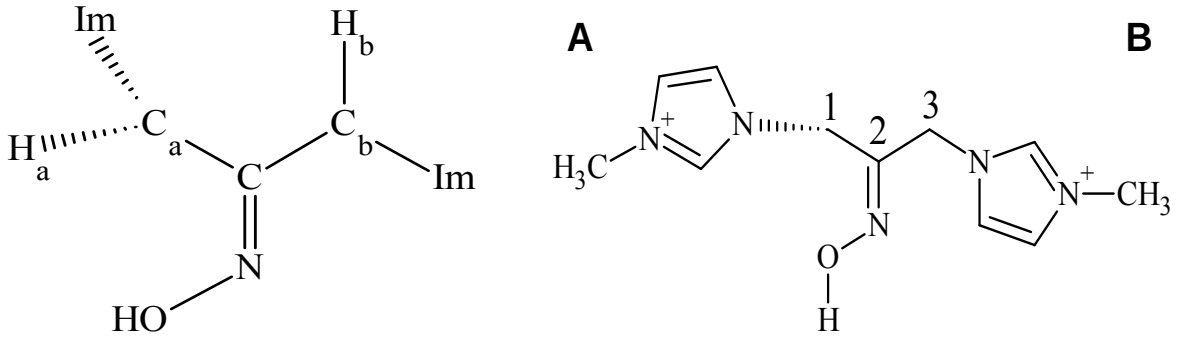


Рис. 9. Кросс-пики в HMBC спектре метиленовых протонов субъединицы А (слева) и субъединицы В (справа)

Проявления спин-спинового взаимодействия водород-углерод нагляднее рассмотреть на примере упрощенной структуры на рис. 10, а. На этом рисунке символами C_a и C_b обозначены метиленовые атомы углерода субъединиц А и В, символом С – центральный sp^2-гибридный атом углерода оксимной группировки, символами H_a и H_b обозначены усредненные по времени позиции атомов водорода в метиленовых группах А и В соответственно. Логично предположить, что эти усредненные положения находятся на биссектрисе угла между реальными связями С-Н в метиленовых звеньях. В силу особенностей геометрии sp^2-гибридного состояния атома углерода, атомы C_a, С, C_b и N располагаются в одной плоскости. Биссектриса угла между С-Н связями в метилене, из тех же геометрических соображений, находится в одной плоскости с центральным атомом углерода и атомом N1 имидазольного цикла. Наилучшие условия для спин-спинового взаимодействия через три связи реализуются для диэдрального (двугранного) угла, близкого к 0 или 180 градусам; наихудшие – для угла в 90 градусов. Наиболее мощный кросс-пик будет наблюдаться для протонов, усредненная позиция которых ориентирована перипланарно к соответствующему атому углерода по связи С – C_b (С – C_a) (как H_b по отношению к C_a на рис. 10, а; оба атома в плоскости рисунка). Наименьший кросс-пик будет наблюдаться для протонов, усредненная позиция которых ориентирована гош по отношению к соответствующему атому углерода (как H_a по отношению к C_b на рис .7; атом H_a находится **за** плоскостью рисунка или перед нею). Если принять такое объяснение соотношения кросс-пиков в HMBC-спектре, то с необходимостью надо принять, что в субъединице В имидазольный цикл ориентирован перипланарно относительно связи С – C_b , тогда как в субъединице А имидазольный цикл ориентирован гош относительно связи С – C_a .

В совокупности это позволяет предложить структуру для дикатиона оксима, схематически изображенную на рис. 10, б.

В этой предполагаемой структуре метиленовый атом С(1) углерода субъединицы А находится в син-положении относительно С=N-связи оксимной группы, метиленовый атом углерода С(3) субъединицы В – в анти-положении. Атом азота N(1`) имидазольного кольца субъединицы В (и весь имидазольный фрагмент В) находится в



а *б*

Рис. 10. Схема спин-спинового взаимодействия (а); предполагаемая конфигурация дикатиона оксима в растворе уксусной кислоты (б)

синперипланарной конфигурации по отношению к связи C(2)-C(3) и оксимному атому азота, атом азота N(1`) имидазольного кольца субъединицы А (и весь имидазольный фрагмент А) находится в гош-конфигурации по отношению к связи C(2)–C(3) и оксимному атому азота. Поскольку энантиотопные протоны метиленовых групп дают единый синглет, вращение вокруг ординарных связей С-С не сопровождается существенным барьером и происходит быстро в шкале времени ЯМР, поэтому можно говорить только о неких преимущественных конформациях.

Не исключено, что больший химический сдвиг протонов в положении 5 (по сравнению с положением 4) обусловлен слабой внутримолекулярной водородной связью с одним из гетероатомов оксимной группировки. Такая связь возможна и для атомов водорода в положении 2. Известно, что для незаряженных акцепторов образование водородной связи приводит к сдвигу сигнала в слабое поле [40]. Для имидазолиевых солей описано множество примеров межмолекулярной водородной связи С-Н…О и С-Н…N [41] в твердом теле. Реализуема ли подобная связь внутримолекулярно, тем более в такой конкурентной среде, как уксусная кислота, - вопрос, требующий специального исследования.

Такие особенности строения бис-имидазолиевых оксимов могут иметь очень существенное значение для реакционной способности дикатионных оксимов и их производных в катализе и молекулярном распознавании.

Одна из центральных идей в объяснении высокой поверхностной активности ПАВ-«близнецов» заключается в предположении о специфической ориентации гидрофобных и гидрофильных фрагментов, а именно, в растворе молекула «складывается» таким образом, что длинноцепочечные алкильные «хвосты» оказываются вытянуты параллельно друг другу, а заряженные фрагменты образуют квази-единую головную группу [17, 21]. Для коротких трехатомных спейсеров такая ситуация возможна только в случае антиперипланарной конформации обоих терминальных фрагментов (заместителей в положениях 1 и 3 спейсера) по отношению к заместителю у центрального атома углерода (атом азота в случае дикатионного оксима). Такая конфигурация несовместима с предполагаемой структурой, приведенной на рис. 10.

Имеющиеся в литературе единичные примеры структурных исследований надмолекулярных агрегатов дикатионных солей имидазолия указывают на возможность принципиально иной организации [18, 42–44].

Выводы. Две субъединицы в молекуле дикатионного оксима – дихлорида 1,3-бис(3`-метилимидазолий-1`-ил)-2-оксиминопропана – структурно неэквивалентны и, в силу этого, не являются «близнецами». Метильные заместители в дикатионе 1,3-бис(3`-

метилимидазолий-1`-ил)-2- оксиминопропана находятся на значительном удалении друг от друга, и угол между связями C-N близок к развернутому. Вследствие этих особенностей строения становится маловероятным параллельное расположение длинноцепочечных алкильных заместителей в положениях 3` имидазольных циклов, как это предполагается для других геминальных ПАВ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Menger F.M. Gemini surfactants / Menger F.M., Keiper J.S. // Ang. Chem. Int. Ed. – 2000. – Vol. 39. – P. 1906-1920.
2. Wasserscheid P.. Ionic liquids in synthesis / P. Wasserscheid, T. Welton – N.Y.: Wiley & Sons, 2002. – 364 p.
3. Wenjing Q. Frontiers in poly(ionic liquid)s: syntheses and applications / Q. Wenjing, J. Texter, Y. Feng // Chem. Soc. Rev. – 2017. – Vol. 6, № 4. – P. 1124-1159.
4. Sulemana N.T. Application of Ionic Liquids in the Upstream oil Industry-A Review / N.T. Sulemana, B. Ghosh // Int. J. Pet. Res. – 2017. – Vol. 1. – P. 50-60.
5. Andreani L. Use of ionic liquids in biodiesel production: a review / L. Andreani, J. D. Rocha // Brazilian Journal of Chemical Engineering. – 2012. – Vol. 29, № 1. – P. 1-13.
6. Application of ionic liquids for dissolving cellulose and fabricating cellulose-based materials: State of the art and future trends / J. Zhang, J. Wu, J. Yu, at al. // Mater. Chem. Front. – 2017. – Vol. 1. – P. 1273-1290.
7. Kitazawa Y.. Advanced Materials Based on Polymers and Ionic Liquids / Y. Kitazawa, K. Ueno, M. Watanabe // Chem. Rev. – 2017. – Vol.17. – P. 1-20.
8. Salanne M. Ionic Liquids for Supercapacitor Applications / M. Salanne // Top. Curr. Chem. (Cham). – 2017. – Vol. 375. – P. 63-88.
9. Enhancing capacitance of supercapacitor with both organic electrolyte and ionic liquid electrolyte on a biomass-derived carbon / W. Xuehang, Y. Li, F. Lou, at al. // RSC Adv. – 2017. – Vol. 7. – P. 23859-23865.
10. Iodine-Pseudohalogen Ionic Liquid-Based Electrolytes for Quasi-Solid-State Dye-Sensitized Solar Cells / A. Lennert, M. Sternberg, K. Meyer, at al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. – 2017. – Vol. 9, № 9. – P. 33437–33445.
11. Multiscale Studies on Ionic Liquids / K. Dong, X. Liu, H. Dong, at al. // Chem. Rev. – 2017. – Vol. 117. – P. 6636-6695.
12. Masri A.N. A Review on Dicationic Ionic Liquids: Classification and Application / A.N. Masri, A.M. Mi, J.M. Leveque // Industrial Engineering & Management. – 2016. – Vol. 5. – P. 197-104.
13. Dicationic Imidazolium-Based Ionic Liquids: A New Strategy for Non-toxic and Antimicrobial Materials / I.M. Gindri, D.A. Siddiqui, P. Bhardwaj, at al. // RSC Adv. – 2014. – Vol. 4. – P. 62594-62602.
14. Milton M.D. Flexible, dicationic imidazolium salts for in situ application in palladium-catalysed Mizoroki–Heck coupling of acrylates under aerobic conditions / M.D. Milton, P. Garg // Appl. Organomet. Chem. – 2016. – Vol. 30. – P. 727-805.
15. Функциональные детергенты, содержащие имидазолиевое ядро и типичные фрагменты α-нуклеофилов – основа высокоэффективных мицеллярных систем для расщепления эфиров кислот фосфора / Т.М. Прокопьева, И.В. Капитанов, И.А. Белоусова и др. // Журн. орган. химии. – 2015. – Т. 51. – С. 1105-1112.
16. Ionic-Liquid-Type Imidazolium Gemini Surfactant Based Water-in-Oil Microemulsion for Extraction of Gold from Hydrochloric Acid Medium / W. Shubin, Y. Zheng, H. Zhang, at al. // Ind. Eng. Chem. Res. – 2016. – Vol. 55, № 10. – P. 2790–2797.
17. Fuhrhop J-H. Bolaamphiphiles / J-H. Fuhrhop, T. Wang // Chem. Rev. – 2004. – Vol. 104, № 2 (6). – P. 2901-2937.
18. Structure and properties of high stability geminal dicationic ionic liquids / J.L. Anderson, R.F. Ding, A. Ellern, at al. // J. Am. Chem. Soc. – 2005. – Vol. 127, № 2. – P. 593-604.
19. Effect on aggregation behavior of long-chain spacers of dicationic imidazolium-based ionic liquids in aqueous solution / C. Frizzo, I.M. Gindri, C. R. Bender, at al. // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2015. – Vol. 468. – P. 285-294.
20. The effects of temperature and alkyl chain length on the density and surface tension of the imidazolium-based geminal dicationic ionic liquids / M. Moosavi, F. Khashei, A. Sharifi, M. Mirzaei // The Journal of Chemical Thermodynamics. – 2017. – Vol. 107. – P. 1-7.
21. Small-Angle Neutron-Scattering Studies of Mixed Micellar Structures Made of Dimeric Surfactants Having Imidazolium and Ammonium Headgroups / A. Pal, S. Datta, V.K. Aswal, S. Bhattacharya // J. Phys. Chem. B. – 2012. – Vol. 116. – P. 13239-13247.

22. Synthesis, characterization and properties of geminal imidazolium ionic liquids / Y.S. Ding, M. Zha, J. Zhang, S.S. Wang // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2007. – Vol. 298. – P. 201-205.
23. Models for understanding the structural effects on the cation-anion interaction strength of dicationic ionic liquids / B.L. Hennemann, C.R. Bender, P.R.S. Salbego, at al. // Journal of Molecular Liquids. – 2018. – Vol. 252. – P. 184-193.
24. Rotational Isomerism and Structure of the 1-Butyl-3-methylimidazolium Cation in the Ionic Liquid State / R. Ozawa, S. Hayashi, S. Saha, at al. // Chemistry Letters – 2003. – Vol. 32, № 10. – P. 948-949.
25. Singh T. Aggregation behavior of ionic liquids in aqueous solutions: effect of alkyl chain length, cations, and anions / T. Singh, A. Kumar // J. Phys. Chem. B. – 2007. – Vol. 12. – P. 7843-7851.
26. Shi L. Aggregation behavior of surface active imidazolium ionic liquids in ethylammonium nitrate: effect of alkyl chain length, cations, and counterions / L. Shi, L. Zheng // J. Phys. Chem. B. – 2012. – Vol. 116, № 7. – P. 2162-2172.
27. Elucidating Anion Effect on Nanostructural Organization of Dicationic Imidazolium-Based Ionic Liquids / C.P. Frizzo, C.R. Bender, I.M. Gindri, at al. // J. Phys. Chem. C. – 2016. – Vol. 120, № 26. – P. 14402–14409.
28. Bankmann D. Magnetic resonance spectroscopy in ionic liquids / D. Bankmann, R. Giernoth // Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. – 2007. – Vol. 51. – P. 63-90.
29. Chen Su. Prediction of 1H NMR chemical shifts for clusters of imidazolium-based ionic liquid / Su Chen, E.I. Izgorodina // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2017. – Vol. 19. – P. 17411-17425.
30. 1H, 13C NMR and DFT Study of Hydrogen Bonding in Imidazolium-based Ionic Liquids / V. Balevicius, Z. Gdaniec, L. Dziaugys, at al. // Acta Chim. Slov. – 2011. – Vol. 58, № 3. – P. 458–464.
31. Feder-Kubis J.. NMR Spectroscopy in studies of new chiral ionic liquids / J. Feder-Kubis // Polimery – 2011. – Vol. 56, № 9. – P. 676-681.
32. Are Ionic Liquids Chemically Stable? / Binshen Wang, Li Qin, Tiancheng Mu, at al. // Chem. Rev. – 2017. – Vol. 117, № 10. – P. 7113–7131.
33. Solvent Effects on the NMR Chemical Shifts of Imidazolium-Based Ionic Liquids and Cellulose / S. Hesse-Ertelt, T. Heinze, B. Kosan, at al. // Therein Macromol. Symp. – 2010. – Vol. 294-II. – P. 75–89.
34. Novel pre-treatment and fractionation method for lignocellulosic biomass using ionic liquids / Da Silva S.P.M., da Costa Lopes A.M., Roseiro L.B., Bogel-Lukasik R. // RSC Advances. – 2013. – Vol. 3. – P. 16040-16050.
35. Furrer J. A robust, sensitive, and versatile HMBC experiment for rapid structure elucidation by NMR / J. Furrer // Chem. Comm. – 2010. – Vol. 46. – P. 3396-3398.
36. Structural studies of the ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate in dichloromethane using a combined DFT-NMR spectroscopic approach / S.A. Katsyuba, T.P. Griaznova, A. Vidis, P.J. Dyson // J. Phys. Chem. B. – 2009. – Vol. 113, № 15. – P. 5046-5051.
37. High-precision heteronuclear 2D NMR experiments using 10-ppm spectral window to resolve carbon overlap / B. Vitorge, S. Bieri M., Humam, at al. // Chem. Comm. – 2009. – Vol. 9. – P. 950-952.
38. *O*-Alkylation of Menthone Oxime: Synthesis and ^{13}C NMR Studies of a Series of Novel Oxime Ethers / S. Faisal., A.F. Basha, H. Siddiqui, F.Z. Basha // Synth. Comm. – 2010. – Vol. 40. – P. 3101-3108.
39. Conformational analysis of fluoroacetoxime and of its O-methyl ether by 1H, 13C and 15N NMR and theoretical calculations / C. F. Tormena, R. Rittner, R. J. Abraham, at al. // J. Phys. Org. Chem. – 2004. – Vol. 17. – P. 42-48.
40. Synthesis and Antifungal Activity of Novel 3-Caren-5-One Oxime Esters / Min Huang, Wen-Gui Duan, Gui-Shan Lin, at al. // Molecules. – 2017. – Vol. 22. – P. 1538-1547.
41. Scheiner S. Interpretation of Spectroscopic Markers of Hydrogen Bonds / S. Scheiner // Chem. Phys. Chem. – 2016. – Vol. 17. – P. 2263–2271.
42. Molecular Structure and Interactions in the Ionic Liquid 1-Ethyl-3-methylimidazolium Bis(Trifluoromethylsulfonyl)Imide / N.R. Dhumal, K. Noack, J. Kiefer, H.J. Kim // J. Phys. Chem. A. – 2014. – Vol. 118. – P. 2547-2557.
43. Bhargava B. L.. Nanoscale Organization in Aqueous Dicationic Ionic Liquid Solutions / B. L. Bhargava, M.L. Klein // J. Phys. Chem. B. – 2011. – Vol. 115, № 35. – P. 10439-10446.
44. Bolaamphiphilic liquid crystals based on bis-imidazolium cations / A.Al. Abbas, B. Heinrich, M. L'Her, et al. // New Journal of Chemistry. – 2017. – Vol. 41, № 7. – P. 2604-2613.

Поступила в редакцию 06.02.2018 г.

STRUCTURE PECULIARITIES OF IMIDAZOLIUM OXIMES IN SOLUTIONS.
I. 1,3-BIS(3`-METHYLI MIDAZOLIUM-1`-YL)-2-HYDROXIMINOPROPANE DICHLORIDE

S.A. Grebeniuk, S.L. Khil'ko, T.M. Prokop'eva, V.A. Mikhailov

1,3-bis(3`-methylimidazolium-1`-yl)-2-hydroxyiminopropane dichloride structure and conformational state in acetic acid solution were studied by 1H, 13C, HSQC, HMBC NMR methods. All magnetically active nuclei (hydrogen and carbon) are non-equivalent in formally identical sin- and anti- imidazolium parts. The model for preferable conformation of dication that is responsible for these features or has been proposed.

Keywords: oxime; imidazolium salt; dication structure; solution state; 1H, 13C, 2D NMR.

Гребенюк Сергей Анатольевич
Научный сотрудник, кандидат химических наук.
ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко»,
83114, г. Донецк-114, ул. Р. Люксембург, 70
Тел.: 071 386 05 40.

Grebeniuk Sergei Anatolievych,
Candidate of Chemical Sciences, Researcher
State institution "L.M. Litvinenko's Institute of Physical Organic and Coal Chemistry", Donetsk
83114, Donetsk, R. Luksemburg, 70

Хилько Светлана Леонидовна
Ведущий научный сотрудник, кандидат химических наук, старший научный сотрудник.
ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко»,
83114, г. Донецк-114, ул. Р. Люксембург, 70
Тел.: 071 331 38 03,
e-mail: sv-hilko@yandex.ru.

Khil'ko Svetlana Leonidovna
Candidate of Chemical Sciences, Leading Researcher, Senior Researcher.
State institution "L.M. Litvinenko's Institute of Physical Organic and Coal Chemistry", Donetsk
83114, Donetsk, R. Luksemburg, 70

Прокопьева Татьяна Мефодиевна
Старший научный сотрудник, кандидат химических наук, старший научный сотрудник.
ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко», 83114, г. Донецк-114, ул. Р. Люксембург, 70

Prokop'eva Tatiana Mefodievna,
Candidate of Chemical Sciences, Senior Researcher, Senior Researcher.
State institution "L.M. Litvinenko's Institute of Physical Organic and Coal Chemistry", Donetsk
83114, Donetsk, R. Luksemburg, 70

Михайлов Василий Александрович
Заведующий отделом исследований нуклеофильных реакций, кандидат химических наук, старший научный сотрудник.
ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко», 83114, г. Донецк-114, ул. Р. Люксембург, 70.
E-mail: v_mikhailov@yahoo.com

Mikhailov Vasilii Alexandrovych
Candidate of Chemical Sciences, head of department, Senior Researcher.
State institution "L.M. Litvinenko's Institute of Physical Organic and Coal Chemistry", Donetsk
83114, Donetsk, R. Luksemburg, 70

УДК 546.185’817’43’32:548.32

ИЗОМОРФНОЕ ЗАМЕЩЕНИЕ СВИНЦА БАРИЕМ В ДВОЙНОМ ФОСФАТЕ КАЛИЯ СВИНЦА СО СТРУКТУРОЙ АПАТИТА

© 2017. ***А.В. Игнатов, А.О. Жегайло, Н.В. Яблочкова, Т.С. Сурмач***

Полукерамическим методом при 800ºС получены твердые растворы $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ ($0 \le x \le 1$). Исследование полученных образцов методами рентгенофазового анализа и сканирующей электронной микроскопии показало, что замещение свинца барием в двойном фосфате калия свинца со структурой апатита протекает в области до x = 0,3. Методом рентгеноструктурного анализа порошка с использованием алгоритма Ритвельда установлено, что вхождение ионов бария в кристаллическую структуру приводит к увеличению средних расстояний в полиэдре M(1) и тетраэдре PO_4.

***Ключевые слова**:* структура апатита, изоморфизм, твердый раствор, фосфат калия свинца

Введение. Важнейшим научным направлением современного материаловедения является теоретическая и экспериментальная разработка основ создания веществ и материалов с заданными свойствами. С целью поиска новых функциональных материалов в последние годы уделяется большое внимание соединениям со структурой апатита. С кристаллохимической точки зрения состав апатитов описывается общей формулой $[^{IX}M(1)]_4[^{VII}M(2)]_6(^{IV}XO_4)_6Y_2$, где верхний левый индекс – координационное число. Кристаллическая структура апатита характеризуется гексагональной элементарной ячейкой (пространственная группа $P6_3/m$), в которой существуют два катионных положения M(1) и M(2). Положение M(1) кратностью четыре имеет координационное окружение из девяти атомов кислорода, входящих в состав тетраэдров XO_4. Положение M(2) кратностью шесть располагается в центре искаженной пентагональной бипирамиды, образованной шестью атомами кислорода, входящими в состав вышеуказанных тетраэдров и одним, заселяющим положение Y структуры, анионом. Катионные позиции M(1) и M(2) могут занимать одно-, двух- и трехзарядные ионы, например, Ca^{2+}, Ba^{2+}, Na^{+}, K^{+}, La^{3+}, и т.д. Позиция X заполняется атомами P^{+5}, As^{+5}, V^{+5}, Si^{+4}, S^{+6}, B^{+3} и т.д., а позиция Y - ионами F^-, Cl^-, OH^-, O^{2-}, CO_3^{2-} и т.д. Кристаллографическая позиция Y располагается в центре канала, образованного многократным повторением вдоль оси *c* повернутых друг относительно друга на 60º треугольников, которые формируют ионы, располагающиеся в положении M(2). Отрицательные заряды ионов, находящихся в позиции Y, являются необходимым условием для стабилизации структуры апатита [1, 2].

Особое место среди всех апатитов занимают соединения и твердые растворы на их основе, в структуре которых в позиции Y не содержатся ионы. Такие соединения, называемые лакунарными (или соединения с лакунарной структурой), должны содержать в катионной позиции M(2) ионы с $6s^2$-электронными парами (Tl^+, Pb^{2+}, Bi^{3+}). Эти пары электронов служат источником отрицательного заряда, стабилизирующего структуру апатита [2, 3]. Индивидуальные апатиты с лакунарной структурой известны только для свинца, например, $Pb_8M_2(PO_4)_6$, где M = Na, K, Rb, Cs, Ag [4-6]; $Pb_8M_2(VO_4)_6$, где M = Na, K [7]; $Pb_{10}(XO_4)_2(VO_4)_4$, где X = Si, Ge [8, 9]. Замещение одних структурных единиц другими в лакунарных апатитах позволяет не только изменять размер канала, но и заполнять его различными ионами, что может приводить к существенному изменению свойств. Например, твердые растворы $Pb_{8-x}Gd_xNa_2(PO_4)_6O_{x/2}$, обладают анионной проводимостью по кислороду [10], в то время

как незамещенный двойной фосфат натрия свинца характеризуется катионной проводимостью [11]; кальций- и кадмий-содержащие твердые растворы на основе лакунарного фосфата свинца калия используются в качестве электродов при определении ионов Hg^{2+} методом инверсионной вольтамперометрии [12-14].

Целью данной работы является изучение изоморфного замещения свинца на барий в соединении $Pb_8K_2(PO_4)_6$ и исследование кристаллической структуры образующихся твердых растворов $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$.

Экспериментальная часть. Для получения твердых растворов $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ ($0 \leq x \leq 1$) исходные вещества PbO, $BaCO_3$, K_2CO_3, $(NH_4)_2HPO_4$ квалификации «х.ч.» взвешивали на электронных аналитических весах с точностью ±0,2 мг. Смеси навесок растворяли в разбавленной азотной кислоте. К полученным растворам добавляли 2 мл глицерина, затем медленно выпаривали воду. Твердые остатки гомогенизировали в агатовой ступке в течение 10 минут, помещали в алундовые тигли и прокаливали при температурах 300 и 600 °С в течение 2 ч для удаления летучих веществ. Синтезировали твердые растворы при температуре 800 °С до достижения постоянства фазового состава образцов. Протекание реакции контролировали методом рентгенофазового анализа после каждых четырех-пяти часов прокаливания. Суммарное время синтеза при температуре 800 °С составило 26 ч.

Рентгенографические исследования выполняли на дифрактометре ДРОН-3М (CuK_α-излучение, Ni – фильтр). Идентификацию фазового состава образцов проводили с помощью программы Match и рентгеновской базы данных pdf-2 (ICDD – International Centre for Diffraction Data). Параметры элементарных ячеек твердых растворов рассчитывали с помощью программы DICVOL из пакета FullProf Suite Program (3.0). Для уточнения методом Ритвельда особенностей кристаллической структуры некоторых твердых растворов использовали массив данных, полученный из рентгенограммы порошка, снятой в интервале углов 15 – 140 (2θ). Шаг сканирования и время экспозиции в каждой точке составляли соответственно 0,05° и 3 с. Уточнение проводили с помощью программы FULLPROF.2k с графическим интерфейсом WinPLOTR, входящих в указанный выше пакет программ.

Образцы исследовали на сканирующем электронном микроскопе JSM-6490LV (JEOL, Япония), оснащенном рентгеновским энергодисперсионным спектрометром INCA Penta FETx3 (OXFORD Instruments, Англия).

Результаты и их обсуждение. Согласно данным рентгенофазового анализа образцов $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ на дифрактограммах (рис.1) в интервале составов $0 \leq x \leq 0{,}3$ присутствуют только рефлексы фазы двойного фосфата калия свинца $Pb_8K_2(PO_4)_6$. В области с большим содержанием бария ($x > 0{,}3$), помимо указанной фазы структуры апатита, наблюдаются рефлексы фазы фосфата бария $Ba_3(PO_4)_2$.

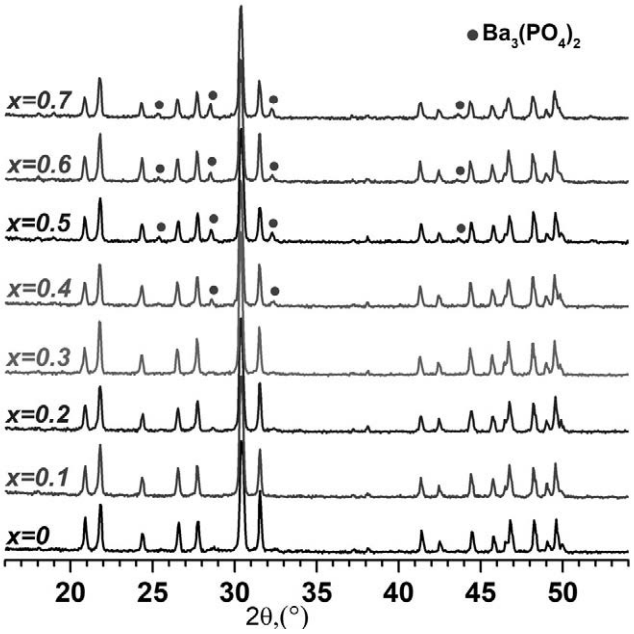


Рис. 1. Дифрактограммы образцов состава $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$

Обращает на себя внимание тот факт, что рефлексы фазы фосфата бария $Ba_3(PO_4)_2$ на дифрактограммах (рис. 2) смещены в сторону больших углов относительно их положения по данным базы pdf-2 (ICDD). Это свидетельствует об уменьшении параметров элементарной ячейки фосфата бария, которое, по видимому, обусловлено частичным замещением в его структуре ионов Ba^{2+} меньшими по размеру ионами Pb^{2+}. Следует отметить, что повышение температуры синтеза до 850°C не привело к изменению качественного и количественного состава фаз на дифрактограммах.

Зависимость параметров элементарных ячеек твердых растворов $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ от содержания бария представлена на рис. 3.

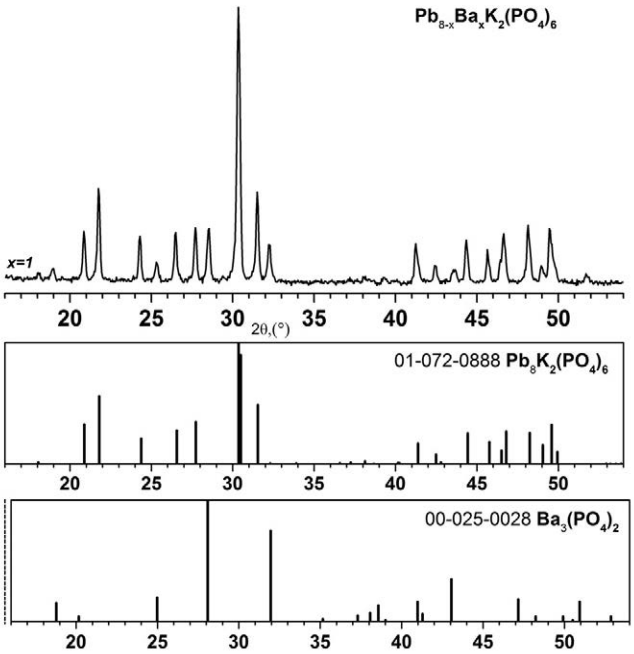


Рис. 2. Дифрактограмма образца $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ состава $x = 1$, а также штрих-дифрактограммы из базы pdf-2 (ICDD)

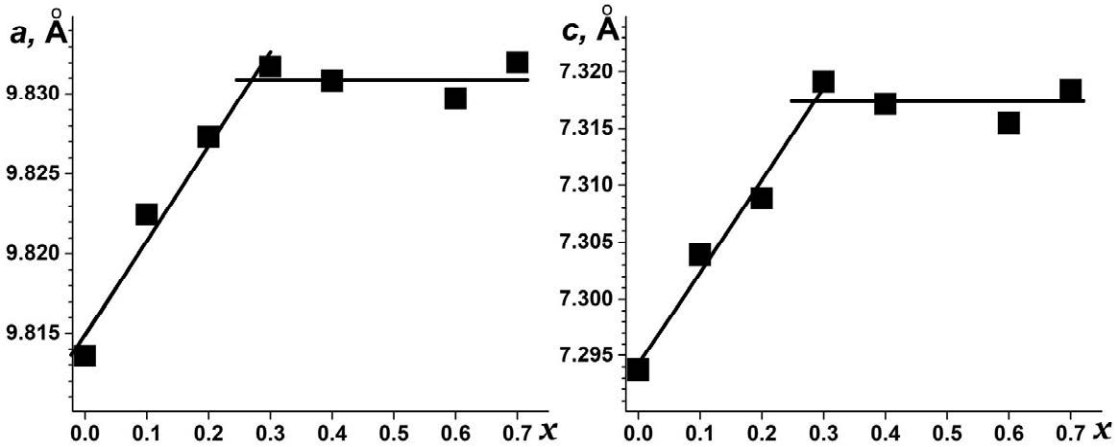


Рис. 3. Зависимость параметров элементарной гексагональной ячейки образцов $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ от состава x.

Как видно из рис. 3 в однофазной области ($0 \le x \le 0{,}3$) параметры элементарной гексагональной ячейки твердого раствора структуры апатита возрастают, что обусловлено вхождением в кристаллическую структуру больших по размеру ионов Ba^{2+} (1,47 Å) вместо Pb^{2+} (1,35 Å) (ионные радиусы приведены для координационного числа 9) [15]. В многофазной области ($x > 3$) параметры ячейки не изменяются в пределах точности определения данных величин.

Образование однофазных твердых растворов $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ в интервале $0 \le x \le 0{,}3$ подтверждается результатами исследования образца состава $x = 0{,}3$ методом сканирующей электронной микроскопии. Полученные порошки являются мелкодисперсными с размерами отдельных зерен около 1 мкм и агрегатов от 2 до 5 мкм (рис. 4). Химические элементы равномерно распределены по поверхности зерен, а их

содержание, определенное методом безэталонного рентгеноспектрального микроанализа, удовлетворительным образом, для данного метода анализа, согласуется с рассчитанными величинами (табл. 1). Зерен с иным содержанием основных компонентов не обнаружено.

Уточнение кристаллической структуры образцов $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ состава $x = 0$ и $x = 0,3$ методом рентгеноструктурного анализа порошка с использованием алгоритма Ритвельда показало (табл. 2 и табл. 3), что в незамещенном образце $Pb_8K_2(PO_4)_6$ катионное положение

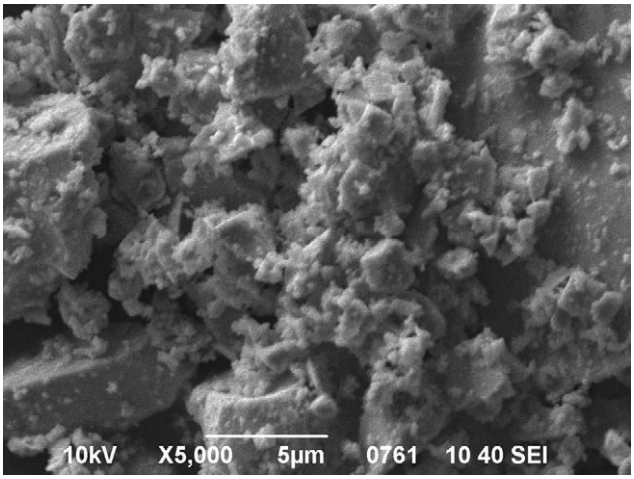


Рис. 4. Микрофотография образца $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ состава $x = 0,3$ (увеличение 5000 раз)

Таблица 1

Результаты элементного анализа образца состава $Pb_{7,7}Ba_{0,3}K_2(PO_4)_6$ (масс. %)

Pb		Ba		K		P		O	
эксп.	теор.	эксп.	теор.	эксп.	теор.	эксп.	теор.	эксп.	теор.
70	69,8	2	1,8	4	3,4	7	8,2	17	16,8

M(1) практически наполовину заполнено ионами K^+ и Pb^{2+}, а положение M(2) почти полностью заселено ионами Pb^{2+}. Полученные данные согласуются с ранее проведенным исследованием по изучению кристаллической структуры монокристалла $Pb_8K_2(PO_4)_6$ [7], в котором катионное положение M(2) (6h) структуры апатита практически заполнено ионами свинца (97,1 % Pb^{2+} и 2,9 % K^+), в то время как положение M(1) (4f) приблизительно в равной степени заполнено ионами свинца и калия (54,3 % Pb^{2+} и 45,7 % K^+). Согласуется с данными [7] и большинство величин межатомных расстояний (табл. 3).

Таблица 2

Заселенность катионных позиций в структуре $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ и факторы достоверности

Состав	$x = 0$	$x = 0.3$
Pb(1) (4f)	2,08(2)	1,85(2)
K(1) (4f)	1,92(2)	1,85(2)
Ba(1) (4f)	–	0,3
Pb(2) (6h)	5,92(2)	5,85
K(2) (6h)	0,08(2)	0,15(2)
Ba(2) (6h)	–	–
R_B	7,94	7,45
R_F	6,85	6,39
R_P	6,99	4,64
R_{WP}	8,94	6,21
χ^2	1,43	2,84

Таблица 3

Некоторые межатомные расстояния (Å) в структуре $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$

Состав	x=0 [7]	$x = 0$	$x = 0,3$
Me(1)–O(1)×3	2,533(11)	2,55(3)	2,516(18)
Me(1)–O(2)×3	2,836(10)	2,798(19)	2,848(20)
Me(1)–O(3)×3	2,924(9)	2,89(3)	2,934(16)
<Me(1)–O(1–3)>	2,764	2,746	2,766
Me(2)–O(1)	2,673(12)	2,64(4)	2,69(3)
Me(2)–O(2)	2,238(13)	2,197(17)	2,115(15)
Me(2)–O(3)×2	2,661(11)	2,57(3)	2,390(14)
Me(2)–O(3)×2	2,558(9)	2,58(2)	2,698(6)
<Me(2)–O(1–3)>	2,558	2,523	2,497
P–O(1)	1,525(15)	1,56(5)	1,60(4)
P–O(2)	1,531(12)	1,562(17)	1,621(15)
P–O(3)×2	1,538(10)	1,59(3)	1,616(13)
<P–O(1–3)>	1,533	1,576	1,613

Уточнение кристаллической структуры барий-содержащего твердого раствора проводилось на основании следующих положений: 1) все элементы, входящие в состав образца, находятся в ионной форме; 2) соблюдается принцип электронейтральности; 3) катионные позиции M(1) и M(2) полностью заполнены и не содержат вакансий; 4) химический состав твердого раствора соответствует формульному. Кроме того, принималось во внимание, что в кристаллической структуре соединения $Pb_8K_2(PO_4)_6$ связи Me – O в полиэдре M(1) имеют более ионный характер, чем в полиэдре M(2) [7]. Поскольку химические связи K – O, Ba – O обладают значительной долей ионности, а связь Pb – O имеет ковалентный характер, то наиболее вероятной представляется ситуация, когда ионы K^+ и Ba^{2+} локализуются в катионной позиции M1, а ионы Pb^{2+} – в катионной позиции M(2). Поэтому при проведении уточнения ионы Ba^{2+} фиксировались в позиции M(1) и рассчитывалось распределение ионов Pb^{2+} и K^+ между двумя катионными позициями.

В результате уточнения кристаллической структуры образца $Pb_{7,7}Ba_{0,3}K_2(PO_4)_6$ установлено (табл. 2), что ионы K^+ практически полностью располагаются в позиции M(1) и лишь небольшая часть (7,5 % от общего содержания калия в твердом растворе) заселяет кристаллографическое положение M(2). Последнее на 97,5 % заполнено ионами Pb^{2+}.

Вхождение в кристаллическую структуру соединения $Pb_8K_2(PO_4)_6$ ионов бария приводит к изменению межатомных расстояний (табл. 3).

В структуре твердого раствора величина среднего межатомного расстояния Me(1)–O(1–3) возрастает вследствие локализации в позиции Me(1) большего по размерам иона Ba^{2+}. Величина среднего межатомного расстояния Me(2)–O(1–3) в координационном полиэдре Me(2) незначительно уменьшается, однако ее изменение лежит в пределах точности определения. Также обращает на себя внимание незначительное возрастание средних межатомных расстояний в тетраэдре PO_4. Последний факт можно объяснить следующим образом: вхождение в кристаллическую структуру апатита более электроположительного по сравнению со свинцом бария приводит к усилению электростатического взаимодействия между ионами Ba^{2+} и O^{2-}, что, в свою очередь, ослабляет взаимодействия между атомами фосфора и кислорода, и расстояние между ними возрастает.

Выводы. Методами рентгенофазового анализа и сканирующей электронной микроскопии установлено, что замещение свинца барием в двойном фосфате калия свинца протекает в интервале $0 \le x \le 0{,}3$ и сопровождается увеличением параметров элементарной ячейки твердых растворов $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$. В структуре твердого раствора катионное положение M(2) практически полностью заселено ионами Pb^{2+}. Локализация ионов Ba^{2+} в катионном положении M(1) приводит к увеличению средних величин межатомных расстояний Me(1)–O(1–3) и P–O(1–3) в кристаллической структуре апатита.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Apatite – An Adaptive Framework Structure / T. White, C. Ferraris, J. Kim, S. Madhavi // Reviews in Mineralogy & Geochemistry. – 2005. – Vol. 57. – P. 307–401.
2. The crystal structure of lacunar apatite $NaPb_4(PO_4)_3$ / M. El Koumiri, S. Oishi, S. Sato et al. // Mat. Res. Bull. – 2000. – Vol. 35. – P. 503–513.
3. Synthesis, Rietveld refinements and Raman spectroscopic studies of tricationic lacunar apatites $Na_{1-x}K_xPb_4(AsO_4)_3$ ($0 \le x \le 1$) / B. Manoun, M. Azdouz, M. Azrour et al. // Journal of Molecular Structure. – 2011. – Vol. 986. – P. 1 – 9.
4. Toumi M. Crystal structure and spectroscopic studies of $Na_2Pb_8(PO_4)_6$ / M. Toumi, T Mhiri // J. Ceramic Soc. Japan. – 2008. – Vol. 116. – P. 904 – 908.
5. Syntheses, Characterization and Theoretical Studies of Three Apatite-type Phosphates $MPb_4(PO_4)_3$ (M = K, Rb, Cs) / M. Abudoureheman, S. Han, X. Dong et al. // Journal of alloys and compounds. – 2017. – Vol. 690. – P. 330 – 336.

6. Solution solide d'apatites de plomb, d'argent et de sodium : synthese, caracterisation structurale et proprietes electriques / M. Mehnaoui, R. Ternane, A. Madani, et al. // J. Phys. IV France. – 2004. – Vol. 122. – P. 135 – 140.
7. Lead Alkali Apatites without Hexad Anion: The Crystal Structure of $Pb_8K_2(PO_4)_6$ / M. Mathew, W.E. Brown, M. Austin et al. // J. Solid State Chem. – 1980. – Vol. 35. – P. 69–76.
8. Krivovichev S.V. One-dimensional lone electron pair micelles in the crystal structure of $Pb_5(SiO_4)(VO_4)_2$ / S.V. Krivovichev, T. Armbruster, W. Depmeier // Mat. Res. Bull. – 2004. – Vol. 39. – P. 1717–1722.
9. Dudnik E.F. Protonic conductivity and ferroelasticity in materials with apatite like structure / E.F. Dudnik, V.M. Duda // Ferrolectrics. – 1999. – Vol. 233. – P. 121–127.
10. Isomorphous Substitution of Rare-Earth Elements in Lacunary Apatite $Pb_8Na_2(PO_4)_6$ / E.I. Get'man, S.N. Loboda, A.V. Ignatov et al. // Inorg. Chem. – 2016. – Vol. 55. – P. 2165−2173.
11. Structure and ionic conductivity of the lacunary apatite $Pb_6Ca_2Na_2(PO_4)_6$ / T. Naddari, H. El Feki, J.-M. Savariault et al. // Solid State Ionics. – 2003. – Vol. 158. – P. 157–166.
12. Lahrich S. Voltammetric determination of Hg(II) using apatite anion-deficient apatite/graphite composite// S. Lahrich, B. Manoun, M.A. El Mhammedi / Ionics. – 2015. – Vol. 21. – P. 2051–2060.
13. Lahrich S. Structural study and electrochemical behavior of $KPb_{4-x}Cd_x(PO_4)_3$ ($0 \le x \le 2$) in capturing mercury (II) at graphite electrode / S. Lahrich, B. Manoun, M.A. El Mhammedi // Journal of Applied Surfaces and Interfaces. – 2017. – Vol. 1, № 1-3. – P. 7–17
14. Lahrich S. Catalytic effect of potassium in $Na_{1-x}K_xCdPb_3(PO_4)_3$ to detect mercury (II) in fish and seawater using a carbon paste electrode / S. Lahrich, B. Manoun, M.A. El Mhammedi // Talanta. – 2016. – Vol. 149. – P. 158–167.
15. Shannon R.D. Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides / R.D. Shannon // Acta Cryst. – 1976. – Vol. 32.– P. 751–767.

Поступила в редакцию 09.01.2018 г.

ISOMORPHOUS SUBSTITUTION OF LEAD FOR BARIUM IN POTASSIUM AND LEAD DOUBLE PHOSPHATE WITH STRUCTURE OF APATITE

A.V. Ignatov, A.O. Zhegailo, N.V. Yablochkova, T.S. Surmach

Synthesized at 800 °C solid solutions $Pb_{8-x}Ba_xK_2(PO_4)_6$ ($0 \le x \le 1$) have investigated by SEM and XRD with Rietveld refinement methods. It was established that barium substitution for lead in the structure of potassium and lead double phosphate occurs up to $x = 0{,}3$. The incorporation of Ba^{2+} ions in the crystal structure of apatite gives rise to increasing of unit cell parameters as well as average interatomic distances Me(1)–O(1–3) and P–O(1–3). The M(2) site is almost fully (on 97.5 %) occupied by Pb^{2+} ions in the crystal structure of barium-containing solid solution.

Keywords: apatite structure, isomorphism, solid solution, potassium and lead double phosphate, barium.

Игнатов Алексей Владимирович
канд. хим. наук, доцент,
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
ул. Университетская, 24, Донецк, 83001, ДНР.
E-mail: 8051978@gmail.com
Тел.: +38 095 318 22 38

Ignatov Aleksey Vladimirovich
Candidate of Chemical Sciences, Docent
Donetsk National University
E-mail: 8051978@gmail.com
Tel.: +38 095 318 22 38

Жегайло Алиса Олеговна
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
E-mail: zhegailoalisa@mail.ru
Тел.: +38 066 555 96 23

Zhegailo Alisa Olegovna
Assistant of the Department of Inorganic Chemistry
E-mail: zhegailoalisa@mail.ru
Тел.: +38 066 555 96 23

Яблочкова Наталья Васильевна
канд. хим. наук, доцент,
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
E-mail:: natasha05072008@rambler.ru
Тел.: +38 050 141 00 09

Yablochkova Natalya Vasil'evna
Candidate of Chemical Sciences, Docent,
Donetsk National University
E-mail: natasha05072008@rambler.ru
Тел.: +38 050 141 00 09

Сурмач Татьяна Сергеевна
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»

Surmach Tatyana Sergeevna
Donetsk National University

УДК 544.016.2 + 546.7

О НЕКОТОРЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЯХ ТЕРМОЛИЗА ГЕТЕРОПОЛИОКСОМЕТАЛЛАТОВ С 3D-ЭЛЕМЕНТАМИ

© 2018. *Я.А. Мороз, Л.А. Чередниченко*

Исследованы процессы термического разложения гетерополивольфраматов щелочных и щелочноземельных металлов, содержащих в координационной сфере 3d-элементы. Идентифицированы продукты их термолиза – фазы со структурой типа пирохлора и гексагональных вольфрамовых бронз. Установлены некоторые закономерности изменения их термических свойств в зависимости от природы внешнесферных катионов и 3d-элементов, входящих в их состав. Исследованные гетерополивольфраматы и продукты их термолиза – фазы со структурой типа пирохлора и гексагональных вольфрамовых бронз – являются перспективными соединениями для приготовления катализаторов реакций органического синтеза. Результаты исследований будут полезны при прогнозировании термических свойств и фазового состава продуктов термолиза аналогичных гетерополисоединений, в том числе, при создании новых каталитических систем на их основе.

***Ключевые слова**:* гетерополисоединения; вольфрам; 3d-элементы; термический анализ; продукты термолиза; состав; структура.

Введение. Гетерополисоединения и продукты их термолиза входят в состав многокомпонентных катализаторов переработки и гидроочистки углеводородного сырья [1–6], реакций органического синтеза [7–16], каталитических электродов для водородных и метанольных топливных элементов и т.д. [17, 18]. Гетерополикислоты и их соли используются как катализаторы различных промышленно важных кислотно-основных, окислительно-восстановительных и других типов реакций. Число публикаций по этой теме быстро возрастает, увеличивается количество патентов по применению гетерополисоединений в катализе.

Перспективным направлением применения гетерополисоединений в гетерогенном катализе является их использование для приготовления катализаторов заданного состава. При этом компоненты катализатора могут быть включены в состав гетерополикомплекса в виде лигандов, центральных атомов или внешнесферных катионов. Данный метод имеет существенные преимущества перед последовательным нанесением компонентов на основу катализатора – носитель с высокоразвитой поверхностью. Он уменьшает число стадий в процессе приготовления катализатора и обеспечивает смешение компонентов на уровне наноразмерных частиц (вплоть до смесей на молекулярном уровне), начиная с гетерополикомплекса, что сделать другими методами намного сложнее или вовсе невозможно [9].

Большинство этих каталитических процессов протекает при высоких температурах, поэтому важно знать, что происходит с гетерополисоединениями при температурах формирования катализаторов на их основе и условиях протекания каталитических реакций.

Целью данной работы является исследование процессов термического разложения солей щелочных и щелочноземельных металлов гетерополивольфраматов (ГПВ) со структурой анионов Кеггина и Андерсона, содержащих в своем составе 3d-элементы, идентификация продуктов термолиза и установление закономерностей их изменения в зависимости от природы внешнесферных катионов и 3d-элементов, входящих в их состав.

Экспериментальная часть. Синтез ГПВ проводили по методикам, приведенным в работах [7, 19]. Идентификацию гетерополивольфраматов проводили по результатам химического анализа, электронным спектрам пропускания в ультрафиолетовой и видимой области спектра, ИК-спектрам поглощения и данным их рентгенофазового анализа. Использовали спектрофотометр Specord UVViS, инфракрасный спектрометр Perkin Elmer и рентгеновский дифрактометр ДРОН-3 (Cu-катод, Ni-фильтр).

Термогравитограммы записывали на дериватографе системы Ф. Паулик, И. Паулик, Л. Эрдей со скоростью нагрева 5 градусов в минуту, масса образцов 0,7–0,8 г.

Химический анализ воздушно-сухих гетерополисоединений и продуктов их термолиза проводили по методикам [20–24]: вольфрам в виде WO_3,барий в виде $BaSO_4$, рубидий, цезий в виде перхлоратов и воду – гравиметрически (ошибка методов составляет 0,04%) [20, 21, 23], 3d-элементы, таллий, кальций и стронций – объемными методами (ошибка методов – 0,3%) [22, 23], натрий и калий – методом атомно-адсорбционного анализа (ошибка метода – 5 %) [24].

Результаты и их обсуждение. По результатам химического анализа вольфрамометаллатов, аналогии формы электронных спектров и ИК-спектров в области валентных колебаний металлокислородного каркаса (рис. 1) и изоструктурности солей с другими известными вольфрамометаллатами со структурой анионов Кеггина и Андерсона установлены формулы синтезированных соединений.

Такого типа соединения со структурой аниона Кеггина образуются в результате замены одного из атомов вольфрама в координационной сфере комплекса $[XW_{12}O_{40}]^{n-}$ на 3d-элемент Z^{m+} с образованием анионов состава $[XW_{11}ZLO_{39}]^{n-}$ [7, 19]. В данном случае L = H_2O, X = Z, то есть, X и Z – катионы одного и того же 3d-элемента. Катионы, занимающие позицию центрального атома в комплексе, имеют тетраэдрическое окружение XO_4, а замещающие атомы вольфрама – октаэдрическое XO_6.

Гетерополиоксометаллаты термически не устойчивы и при нагревании разлагаются. Исследование их термолиза методом комплексного термического анализа, рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии образцов этих соединений, прокаленных при различных температурах, указывает на протекание процессов ступенчатой дегидратации и деаммонизации в случае аммонийных солей, распада (деструкции) гетерополиоксоанионов, кристаллизации промежуточных и конечных продуктов их термического разложения.

Кристаллизационная вода удаляется в одну или две стадии и этот процесс не приводит к разрушению

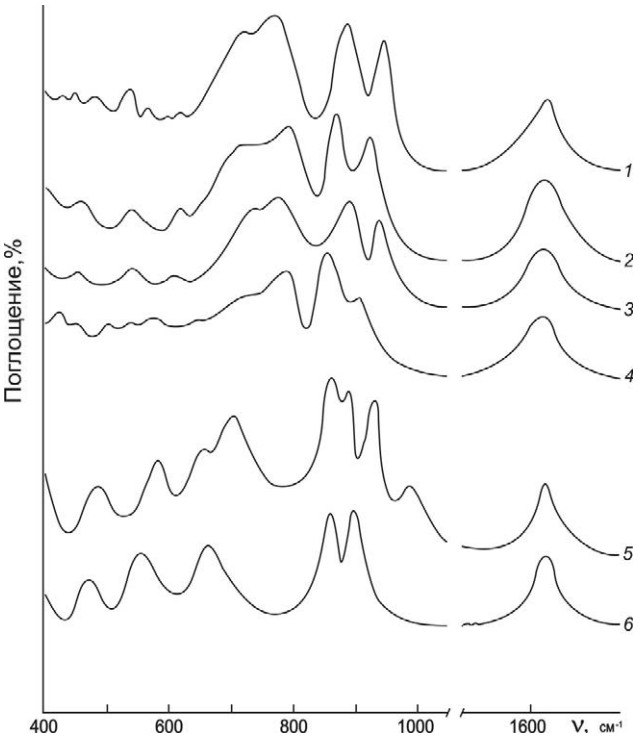


Рис. 1. ИК-спектры вольфрамометаллатов:
1 – $Rb_8[CoW_{11}Co(H_2O)O_{39}] \cdot 32H_2O$;
2 – $Rb_8[ZnW_{11}Zn(H_2O)O_{39}] \cdot 22H_2O$;
3 – $Rb_5H[FeW_{11}Fe(H_2O)O_{39}] \cdot 13H_2O$;
4 – $Cs_5[H_2W_{11}Cr(H_2O)_2O_{38}] \cdot 5H_2O$;
5 – $Rb_4[NiW_6(OH)_6O_{18}] \cdot 5H_2O$;
6 – $Rb_8[MnW_6O_{24}] \cdot 13H_2O$

гетерополианионов. Дальнейшее нагревание приводит к удалению (в случае их наличия) внутрисферных протонов, находящихся в структуре анионов в виде гидроксильных групп или молекул воды. Потеря внутрисферных протонсодержащих групп приводит к разрушению гетерополианионов и кристаллизации продуктов термолиза. Процессы термолиза вольфрамометаллатов зависят от природы щелочного металла во внешней сфере комплекса и для ГПВ со структурой аниона Кеггина протекают по следующим схемам:

$$Na_m[XW_{11}O_{39}X(H_2O)]\cdot nH_2O \xrightarrow[-\,nH_2O]{200\ ^oC} Na_m[XW_{11}O_{39}X(H_2O)] \xrightarrow[-\,H_2O]{400\ ^oC} \text{фаза } \varphi \xrightarrow{550\ ^oC}$$

$$\longrightarrow XWO_4 + WO_3 + Na_2WO_4 \text{ (или поливольфраматы натрия)}$$

$$K_m[XW_{11}O_{39}X(H_2O)]\cdot nH_2O \xrightarrow[-\,nH_2O]{200\ ^oC} K_m[XW_{11}O_{39}X(H_2O)] \xrightarrow[-\,H_2O]{400\ ^oC} K_{NX}X_XW_{2-X}O_6$$

фазы со структурой пирохлора или ГВБ

$$(NH_4)_m[(XW_{11}O_{39}X(H_2O)]\cdot nH_2O \xrightarrow[-\,nH_2O]{200\ ^oC} (NH_4)_m[XW_{11}O_{39}X(H_2O)] \xrightarrow[-\,NH_3\,-\,H_2O]{350\ ^oC}$$

$$\longrightarrow (NH_4)_{NX}X_XW_{1-X}O_3 \xrightarrow[-\,NH_3\,-\,H_2O]{500\ ^oC} XWO_4 + WO_3$$

фазы со структурой ГВБ

Гетерополивольфраматы с 3d-элементами во внутренней сфере комплексов, с общими формулами: $Kt_n[XW_{12}O_{40}]$, Kt – K, Rb, Cs, Tl(I), X – Fe, Co, Cu, Zn, Cr и $Kt_m[XW_{11}O_{40-n}Z(H_2O)_n]$, Kt – K, Rb, Cs, Tl(I), X – Fe, Co, Cu, Zn, H_2; Z – Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Cr со структурой аниона Кеггина при термолизе образуют фазы со структурой типа пирохлора и гексагональных вольфрамовых бронз (ГВБ).

Гетерополивольфраматы с общими формулами $Kt_8[MnW_6O_{24}]$, и $Kt_4[Ni(OH)_6W_6O_{18}]$, Kt – K, Rb, Cs, Tl(I) со структурой аниона Андерсона при термолизе также образуют фазы со структурой типа пирохлора и ГВБ.

Рентгенограммы продуктов термолиза ГПВ – соединений переменного состава со структурой типа пирохлора – проиндицированы в предположении кубической сингонии, типичная форма их рентгенограмм приведена, например, в ICDD PDF № 00-033-1029. При термолизе аммонийных, таллиевых(I), кальциевых, стронциевых и бариевых солей ГПВ образуются промежуточные продукты со структурой типа ГВБ, их рентгенограммы проиндицированы в предположении гексагональной сингонии. Промежуточные продукты термолиза натриевых солей (фаза φ) идентифицировать не удалось. Результаты термического анализа некоторых вольфрамометаллатов, фазовый состав и параметры решетки продуктов их термолиза представлены в таблице.

Установлено, что состав и структура продуктов термолиза гетерополивольфрамометаллатов зависят от соотношения ионных радиусов внешнесферного катиона (r_1) и 3d-элемента (r_2), входящего в координационную сферу комплекса [25]. На рис. 2 представлена область существования фаз со структурой пирохлора и ГВБ, образующихся при термолизе гетерополивольфрамометаллов.

Таблица

Результаты термического и рентгенофазового анализов некоторых вольфрамометаллатов

Соединения	Дегидратация		Кристаллизация продуктов термолиза			
	t, °C	число молей H_2O	t, °C	продукты термолиза	значения X	параметры решетки, Å
$Rb_5H[FeW_{11}FeO_{39}(H_2O)]\cdot 13H_2O$	130	13	470	фаза со структурой пирохлора $Rb_{3X}Fe_XW_{2-X}O_6$	X=0,32	a=10,25
	470	1,5				
$Rb_8[CoW_{11}CoO_{39}(H_2O)]\cdot 32H_2O$	160	32	380	фаза со структурой пирохлора $Rb_{4X}Co_XW_{2-X}O_6$	X=0,31	a=10,26
	380	1				
$Rb_8[ZnW_{11}ZnO_{39}(H_2O)]\cdot 22H_2O$	190	22	390	фаза со структурой пирохлора $Rb_{4X}Zn_XW_{2-X}O_6$	X=0,31	a=10,25
	390	1				
$Cs_5[H_2W_{11}CrO_{38}(H_2O)_2]\cdot 5H_2O$	150	5	390	фаза со структурой ГВБ $Cs_{1,5X}Cr_XW_{1-X}O_3$	X=0,16	a=7,40 c=7,67
	390	3				
$Rb_4[Ni(OH)_6W_6O_{18}]\cdot 5H_2O$	190	5	380	фаза со структурой пирохлора $Rb_{4X}Ni_XW_{2-X}O_6$	X=0,29	a=10,26
	310	3				
$Rb_8[MnW_6O_{24}]\cdot 13H_2O$	160	13	410	фаза со структурой пирохлора	–	–

Для солей щелочноземельных металлов кальция, стронция и бария с этими гетерополианионами соотношение ионных радиусов внешнесферных катионов и 3d-элементов в ряде случаев также находится в области 1,6–2,9 и в этих случаях при их термолизе образуются фазы со структурой типа ГВБ, а в ряде случаев – нет, и тогда продуктами их термолиза являются вольфраматы соответствующих внешнесферных катионов и вольфраматы 3d-элементов, входящих в координационную сферу комплексов. Преимущественное образование фаз со структурой типа пирохлора и ГВБ при термолизе гетерополивольфраматов с 3d-элементами во внутренней сфере комплексов происходит, по-видимому, по ряду причин, среди которых следует указать на близкий химический состав этих

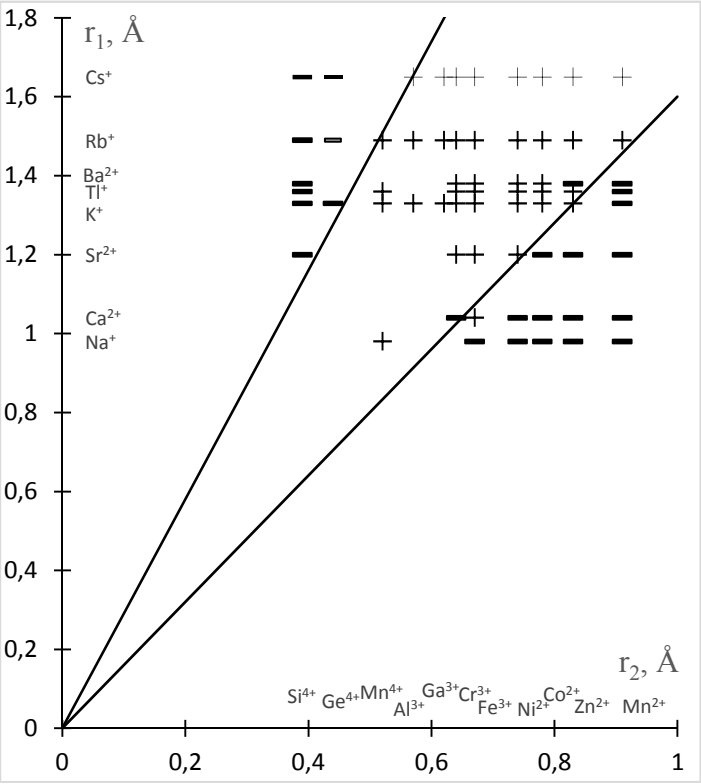


Рис. 2. Область существования фаз со структурой типа пирохлора и ГВБ, образующихся при термолизе вольфрамометаллатов

соединений. Поэтому при нагревании после разрушения гетерополианионов при благоприятном соотношении ионных радиусов (1,6–2,9) в случае внешнесферных катионов щелочных металлов формируются преимущественно фазы с кубической гранецентрированной структурой типа пирохлора, а для внешнесферных катионов щелочноземельных металлов, аммония и таллия(I) – фазы типа гексагональных вольфрамовых бронз

При термолизе гетерополимолибдометаллатов с 3d-элементами во внутренней сфере комплексов образуются молибдаты 3d-элементов, молибдаты внешнесферных катионов и оксид молибдена(VI).

Изучена термическая устойчивость гетерополивольфрамометаллатов в зависимости от природы внешнесферного катиона и 3d-элемента, входящего в координационную сферу комплексов. В качестве критерия термической стабильности взята температура первого экзоэффекта, который свидетельствует о распаде гетерополианиона и кристаллизации продуктов термолиза [26, 27].

Для катионов щелочных металлов, входящих во внешнюю сферу комплексов, температура первого экзоэффекта ($t_{экз.}$) снижается при увеличении радиуса катиона (r_1), т.е. наиболее термически стабильны натриевые соли, наименее – цезиевые (рис. 3, рис. 4). Для солей щелочноземельных металлов термическая стабильность возрастает с увеличением радиуса катиона, т.е. наиболее термически стабильны бариевые соли. Характерно, что эта закономерность сохраняется и для анионов Кеггина и для анионов Андерсона и, по-видимому, объясняется особенностями взаимодействия внешнесферных катионов с гетерополианионом.

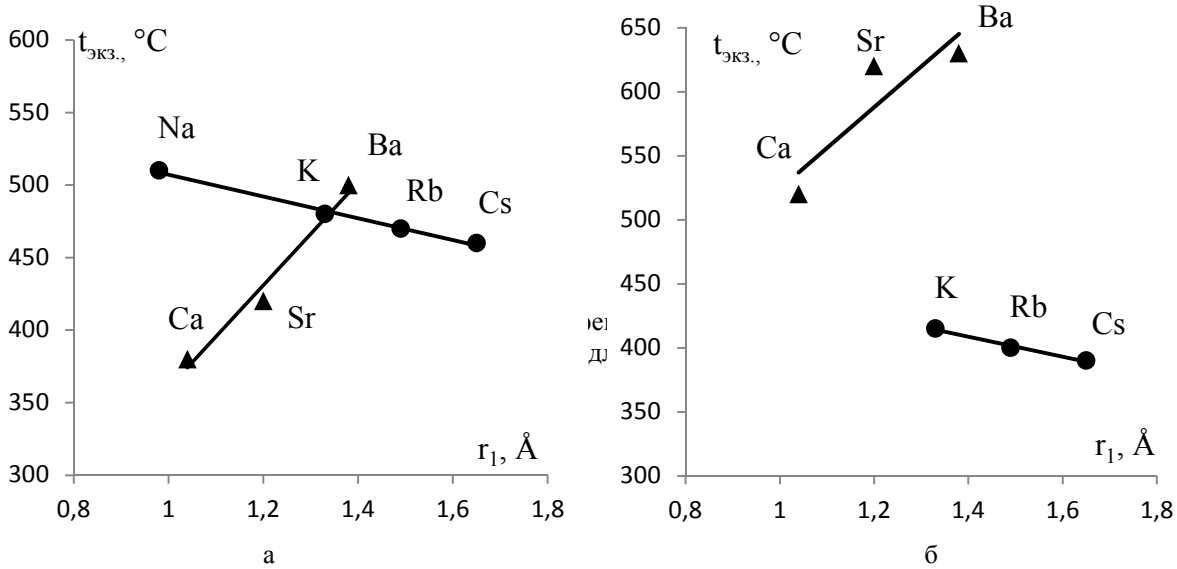


Рис. 3. Зависимость температуры первого экзоэффекта от радиуса внешнесферного катиона: а – для вольфрамоферратов(III); б – для вольфрамохроматов(III)

Радиус ионов 3d-элементов (r_2), входящих в координационную сферу, также влияет на температуру первого экзоэффекта (рис. 5, рис. 6) и, например, для солей с внешнесферным катионом таллия(I) с увеличением их радиуса термическая стабильность гетерополианионов снижается (рис. 6).

Установленные закономерности позволяют прогнозировать термическую стабильность и фазовый состав продуктов термолиза других гетерополиоксо-

металлатов, содержащих в своем составе 3d-элементы. Так, например, хорошо изучены каталитические свойства и продукты термического разложения гетерополивольфраматов с общими формулами: $Kt_n[XW_{12}O_{40}]\cdot mH_2O$, Kt–H, Na, K, Rb, Cs, NH_4^+, X – P, As, Si, B и др. со структурой аниона Кеггина.

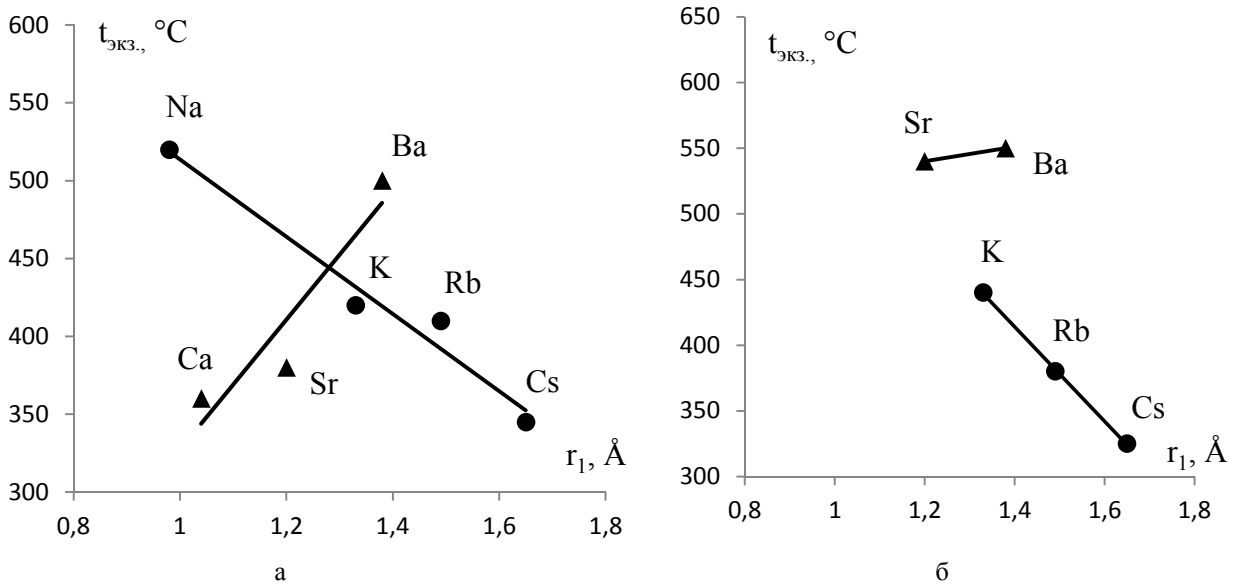


Рис. 4. Зависимость температуры первого экзоэффекта от радиуса внешнесферного катиона: а – для вольфрамоманганатов(IV); б – для вольфрамоникелатов(II)

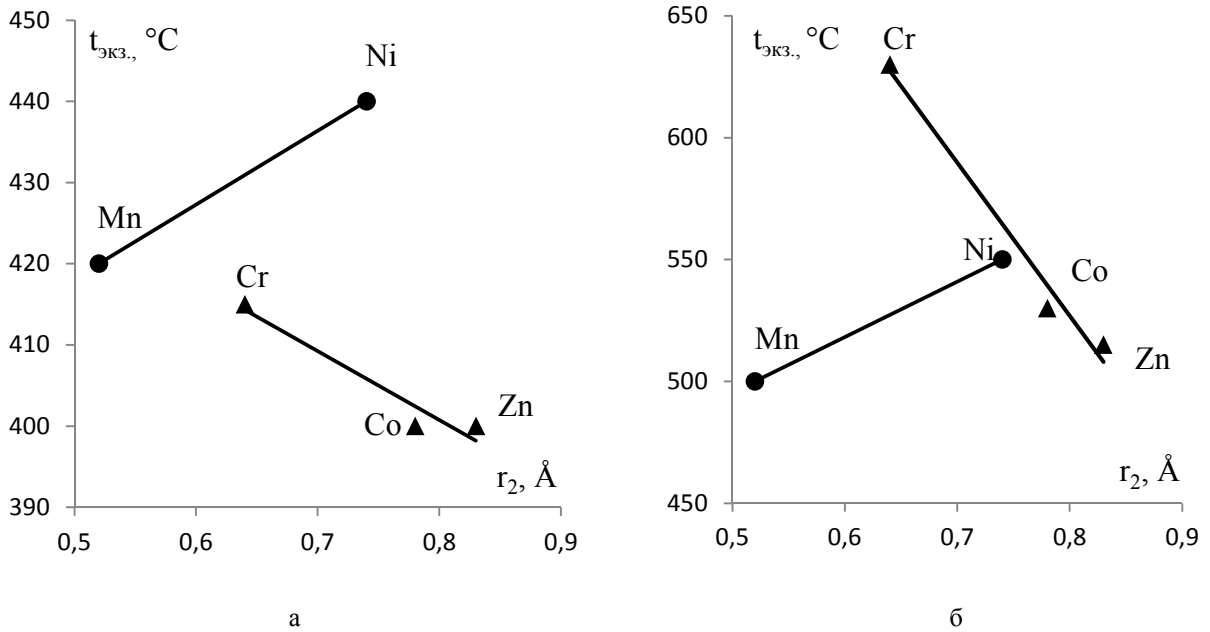


Рис. 5. Зависимость температуры первого экзоэффекта от радиуса 3d-элемента, входящего в координационную сферу гетерополианионов: а – для калийных солей; б – для бариевых солей

В тоже время, синтезированы, но менее изучены, соединения состава $Kt_m[XW_{11}ZLO_{39}]\cdot nH_2O$, Kt–K, Rb, Cs и др., X – P, As, Si, B, H_2; Z – Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Cr, L – H_2O, NH_3, NO_2^-, CN^-, NCS^- и др. со структурой аниона Кеггина.

Такого типа соединения образуются в результате замены одного из атомов вольфрама в координационной сфере комп-лексов $[XW_{12}O_{40}]^{n-}$ на 3d-элемент (Z) с образованием анионов состава $[XW_{11}ZLO_{39}]^{m-}$ [7]. Сведения об их термическом поведении и продуктах термолиза ограничены или отсутствуют. На основании установленных закономерностей можно предположить, что при нагревании этих соединений до температур 400–600 °С среди продуктов их термолиза будут присутствовать фазы со структурой типа пирохлора и ГВБ. Будут ли продукты термолиза однофазными покажут их дальнейшие экспериментальные исследования.

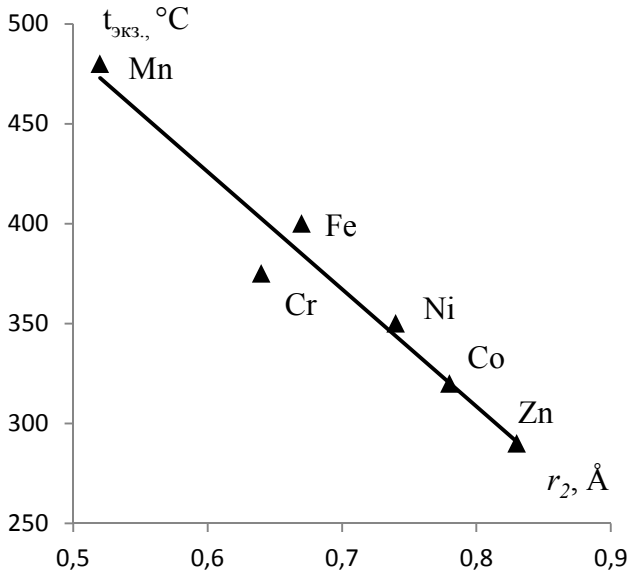


Рис. 6. Зависимость температуры первого экзоэффекта от радиуса 3d-элемента, входящего в координационную сферу гетерополианионов, для талиевых (I) солей

Исследованные гетерополивольфраматы с 3d-элементами в координационной сфере и продукты их термолиза – фазы со структурой типа пирохлора и гексагональных вольфрамовых бронз – являются перспективными соединениями для приготовления катализаторов реакций органического синтеза [28].

Выводы. Исследованы процессы термического разложения гетерополивольфраматов щелочных и щелочноземельных металлов со структурой анионов Кеггина и Андерсона, содержащих в координационной сфере 3d-элементы и установлены некоторые закономерности изменения их термических свойств в зависимости от природы внешнесферных катионов и 3d-элементов, входящих в их состав Термическая устойчивость гетерополивольфрамометаллатов в зависимости от природы внешнесферного катиона для солей щелочных металлов увеличивается с уменьшением радиуса катиона в ряду Cs^+–Rb^+–K^+–Na^+, а для солей щелочноземельных металлов – увеличивается с ростом радиуса катиона в ряду Ca^{2+}–Sr^{2+}–Ba^{2+}. Фазовый состав продуктов термолиза вольфрамометаллатов зависит от соотношения ионных радиусов внешнесферного катиона и 3d-элемента, входящего в координационную сферу комплекса, и при их соотношении 1,6–2,9 продуктами их термолиза являются фазы со структурой типа пирохлора и гексагональных вольфрамовых бронз.

Результаты исследований будут полезны при прогнозировании термических свойств и фазового состава продуктов термолиза аналогичных гетерополисоединений, в том числе, при создании новых каталитических систем на их основе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пат. № 2493910 Российская Федерация МПК(2006.01) B 01 J 29/40, B 01 J 23/31, B 01 J 23/75, B 01 J 23/84, B 01 J 27/185, B 01 J 27/186, B 01 J 37/02, C 10 G 35/095. Цеолитный катализатор, способ его получения и способ переработки прямогонного бензина в высокооктановый компонент бензина с пониженным содержанием бензола [Текст] / В.И. Ерофеев, Л.А. Егорова, М.В. Ерофеев; заявитель и патентообладатель Национальный исследовательский Томский политехнический университет (RU). – №2012130514/04; заявл. 29.07.09; опубл. 20.03.14. Бюл. № 27.
2. Пат. № 2509729. Российская Федерация. МПК(2006.01) 10 G 49/04, C 10 G 45/08, C 01 G 53/00, C 01 G 41/00, B 01 J 37/30, B 01 J 23/888, B 01 J 23/755. Лакунарный гетерополианион структуры

Кеггина на основе вольфрама для гидрокрекинга [Текст] / О. Бондюэлль (FR), Ф. Бертонсини (FR), К. Ламонье (FR) Э. Пейен (FR), М. Фурнье (FR), К. Бен Тейб (FR); заявитель и патентообладатель ИФП ЭНЕРЖИ НУВЕЛЛЬ (FR). – № 2011110473/05; заявл. 29.07.09; опубл. 20.03.14. Бюл. № 8.
3. Пат.№ 2573561. Российская Федерация. МПК(2006.01) B 01 J 23/882, B 01 J 23/883, B 01 J 27/19, B 01 J 37/02, C 10 G 45/08. Катализатор гидрообессеривания, способ его приготовления и процесс глубокой гидроочистки углеводородного сырья [Текст] / А.А. Пимерзин, О.В. Левин, А.А. Ламберов, Н.Н. Томина, П.А. Никульшин, И.И. Иванова, П.Г. Шабанов, С.Р. Егорова; заявитель и патентообладатель Самарский государственный технический университет (RU). – № 2014103126/04; заявл. 29.01.14; опубл. 20.01.16. Бюл. № 2.
4. Влияние состава и морфологии наноразмерных сульфидов переходных металлов, приготовленных с использованием гетерополисоединений со структурой Андерсона $[X(OH)_6Mo_6O_{18}]^{n-}$ (X = Co, Ni, Mn, Zn) и $[Co_2Mo_{10}O_{38}H_4]^{6-}$, на их каталитические свойства [Текст] / П.А. Никульшин, А.В. Можаев, И.Д. Ишутенко и др. // Кинетика и катализ – 2012. – Т. 53, № 5. – С. 660–672.
5. Томина Н.Н. Сульфидные катализаторы гидроочистки нефтяных газов / Н.Н. Томина, А.А. Пимерзин, И.К. Моисеев // Рос. хим. журн. – 2008. – Т. 52, № 4. – С. 41-52.
6. Томина Н.Н. Методы очистки нефтяных фракций [Текст] / Н.Н. Томина, Н.М. Максимов, А.А. Пимерзин – Самара: Самарский государственный технический университет. 2014. – 292 с.
7. Поп М.С. Гетерополи- и изополиоксометаллаты [Текст] / М.С Поп; перевод с англ. под ред Э.Н. Юрченко; – Новосибирск: Наука, 1990. – 232 с.
8. Юрченко Э.Н. Методы молекулярной спектроскопии в химии координационных соединений и катализаторов [Текст] / Э.Н. Юрченко, Новосибирск: Наука, 1986. – 256 с.
9. Кожевников И.В. Гетерополикислоты в катализе [Текст] / И.В. Кожевников, К.И. Матвеев // Успехи химии. – 1982. – Т. 51, № 11. – С.1875–1836.
10. Матвеев К.И. Новые гомогенные катализаторы на основе гетерополикислот [Текст] / К.И. Матвеев, И.В. Кожевников // Кинетика и катализ. – 1980. – Т. 21, № 5. – С. 1189–1198.
11. Hydroprocessing catalysts based on transition metal sulfides prepared from Anderson and dimeric Co_2Mo_{10}-heteropolyanions. A review Catalyseurs d'hydrotraitement à base de sulfures de métaux de transition préparés à partir des hétéropolyanions d'Anderson et du dimère Co_2Mo_{10}. Une revue [Text] / P. Nikulshin, A. Mozhaev, C. Lancelotb et al // C. R. Chimie. – 2016. – Vol. 19, №10. – P. 1276 – 1285.
12. Kozhevnikov I.V. Catalysis by Polyoxometalates [Text] / I.V. Kozhevnikov; Chichester: John Wiley, 2002. – 202 p.
13. Okuhara T. Catalysis by heteropoly compounnds – recent developments [Text] / T. Okuhara, N. Mizuno, M. Misono // Appl. Catal. A: General. – 2001. – Vol. 222, № 1-2. – P. 63–67.
14. Okuhara T. Catalytic chemistry of heteropoly compounds [Text] / T. Okuhara, N. Mizuno, M. Misono // Adv. Catal. – 1996. – Vol. 41, № 1-3. – P. 113–252.
15. Kozhevnikov I.V. Catalysis by heteropolyacids and multicomponent polyoxometalates in liquid-phase reactions [Text] / I.V. Kozhevnikov // Chem. Rev. – 1998. – Vol. 98, № 1-2. – P. 171–198.
16. Cavani F. Heteropolycompound-based catalysts: a blend of acid and oxidizing properties [Text] / F. Cavani // Catalysis Today. – 1998. – Vol. 41, № 1. – P. 73–86.
17. Пат.№ 2561711 Российская Федерация. МКП (2006.01) H 01 M 4/88, H 01 M 8/10 B 01 J 23/40 Способ изготовления каталитического электрода на основе гетерополисоединений для водородных и метанольных топливных элементов [Текст] / Л.А. Фролова, Ю.А. Доровольский; заявитель и патентообладатель Институт проблем химической физики РАН (ИПХФ РАН) (RU) – № 2012148409/07; заявл. 14.11.12; опубл.10.09.15. Бюл. № 25.
18. Асимметрия ионного переноса в мембранах nafion с градиентным распределением кислых солей гетерополикислот [Текст] / А.К. Осипов, О.В. Волков, Е.Ю. Сафронова, А.Б. Ярославцев // Журн. неорган. химии. – 2017. – Т. 62, № 6. – С. 737–742.
19. Мороз Я.А. Закономерности синтеза гетерополисоединений с 3d-элементами [Текст] / Я.А. Мороз // Вестник ДонНУ. Серия А: Естественные науки. – 2017. – № 1. – С. 92–110.
20. Бусев А.И. Аналитическая химия вольфрама [Текст] / А.И. Бусев, В.М. Иванов, Т.А. Соколова; М.: Наука, 1976. – 240 с.
21. Практическое руководство по неорганическому анализу / В.С. Гиллебранд, Г.Э. Лендаль, Г.А. Брайт, Д.И. Гофман; – М.: Химия, 1966. – 1112 с.
22. Пршибил Р. Комплексоны в химическом анализе [Текст] / Р. Пршибил; – М.: Иностранная литература, 1960. – 580 с.
23. Шарло Г. Методы аналитической химии [Текст] / Г. Шарло; – М.: Химия, 1978. – 320 с.
24. Пупышев А.А. Атомно-адсорбционный спектральный анализ [Текст] / А.А. Пупышев; – М.: Техносфера, 2009. – 784 с.

25. Мороз Я.А. Закономерности термического разложения гетерополивольфраматов некоторых 3d-элементов [Текст] / Я.А. Мороз, Л.А. Данилейко, А.И. Груба // Журн. неорган. химии. – 1991. – Т. 36, № 1. – С. 108–113.
26. Лунк Х.И. Новый критерий оценки термической стабильности гетеро- и аквополисоединений [Текст] / Х.И. Лунк, В.Ф. Чуваев, В.И. Спицын // Докл. АН СССР. – 1979. – Т. 247, № 1. – С. 121–125
27. Чуваев В.Ф. Относительно термической стабильности ГПС 12-ряда [Текст] / В.Ф. Чуваев, В.И. Спицын // Докл. АН СССР. – 1977. – Т. 232, № 5. – С. 1124–1127.
28. Moroz Y.A. Investigation of the catalytic properties of heteropolytungstates and the products of their thermolysis [Text] / Y.A. Moroz, M.V. Savos'kin, L.A. Cherednichenko // Book of abstracts 27th International Chugaev Conference on Coordination Chemistry, Nizhny Novgorod, October 2–6, 2017. – Nizhny Novgorod, 2017. – P. 348.

Поступила в редакцию 20.03.2018 г.

SOME REGULARITIES OF THE THERMAL DECOMPOSITION OF HETEROPOLYOXOMETALLATES WITH 3D–ELEMENTS

Y.A. Moroz, L.A. Cherednichenko

The processes of thermal decomposition of heteropolyoxometalates alkaline and alkaline-earth metals containing 3d-elements in the coordination sphere have been studied. The products of their thermolysis (phases with pyrochlore-type structure and hexagonal tungsten bronzes) have been identified. Some regularities of changes in their thermal properties was established depending on the nature of outer-sphere cations and the 3d-elements that make up their composition. The investigated heteropolytungstates and their thermolysis products (phases with pyrochlore-type structure and hexagonal tungsten bronzes) are promising compounds for the preparation of catalysts of organic synthesis reactions. The research results will be useful in predicting the thermal properties and phase composition of thermolysis products of similar heteropolycompounds, including in the creation of new catalytic systems based on them.

Keywords: heteropolycompounds; tungsten; 3d-elements; thermal analysis; products of thermolysis; composition; structure.

Мороз Ярослав Анатольевич
кандидат химических наук, старший научный сотрудник;
ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко», г. Донецк, 83114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 70
E-mail: jaroslavchem@mail.ru
Тел. для контактов: +38 066 7965206;
+38 062-311-68-18

Moroz Yaroslav
Candidate of Chemical Sciences (Ph. D.), Senior Research Worker,
State institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry», Donetsk

Чередниченко Людмила Александровна
кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник; Донецкий государственный научно-исследовательский институт черной металлургии, 83017, г. Донецк, бул. Шевченко, 26
E-mail: cherednichenko.60@mail.ru
Телефон для контактов: +38 050 5035881

Cherednychenko Lyudmila
Candidate of Chemical Sciences, Leading Research Worker, Donetsk State Research Institute of Ferrous Metallurgy, Donetsk

УДК 544.032.3

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСТВОРОВ ПЕКТИНОВ ПОСЛЕ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

© 2018. ***Т.Б. Полищук, В.В. Моренко***

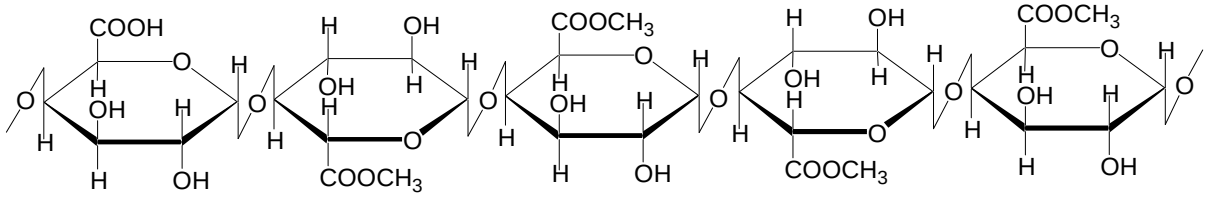
В работе представлены результаты исследований реологических свойств (направление сдвига, вязкость) растворов пектина в зависимости от степени обработки растительного сырья высоким давлением от 100 до 400 МПа. В качестве растительного сырья использовались выжимки яблок сорта «Ренет Симиренко» и грейпфрутов сорта «Дункан». Определена степень этерификации водных растворов пектинов. Вязкость растворов определялась вискозиметрическим методом на ротационном вискозиметре Reotest RN 4.1. Обработка растительного сырья высоким давлением производилась на установке сверхвысокого давления.

***Ключевые слова*:** пектин, степень этерификации, давление, ротационный вискозиметр, направление сдвига, скорость сдвига, вязкость.

Введение. В последние десятилетия в пищевой промышленности в области производства и хранения различных продуктов стали использоваться технологии, основанные на использовании высокого давления. Основной целью использования этих технологий является экономичное получение полезных пищевых продуктов с длительным сроком хранения из органического сырья. Новые продукты питания, получаемые из сырья природного происхождения в результате переработки его под высоким давлением, в научной литературе принято называть новыми формами пищи. В будущем они призваны заменить значительную часть традиционных пищевых продуктов, полученных с использованием тепловых методов [1].

Важным пищевым продуктом является пектин. Крупнейшим производителем пектина в мире является компания «CP Kelco» (США). Второе место по объему производства занимает компания «Yerbstreith & Fox KG» (Германия). Около 16 % производства приходится на компанию «Danisco» (Дания). Четвертое место принадлежит французской фирме «Degussa» – около 12 %. С 2003 года пектин стали получать в Китае. В настоящее время в ряде стран это направление получило государственную поддержку, результатом которой явилось создание новых пищевых отраслей, например инвестиционные проекты в России. Россия пектиновой промышленности не имеет, а потребности производства составляют 10 000 тонн в год, что приводит к закупкам пектина, ингредиентов и медицинских препаратов с пектином на сумму около 190 миллионов долларов США [2, 3].

Пектины – это высокомолекулярные полисахариды клеточных стенок, относящиеся к линейным коллоидам с длиной молекулы порядка 10–14 мкм. Доминирующим компонентом пектиновых полисахаридов являются полиуроновые кислоты, которые образуют преимущественно неразветвленные цепи сотен и тысяч остатков D-галактуроновой кислоты, что соответствует молекулярной массе приблизительно от 50 000 до 200 000.



Пектин относятся к натуральным веществам, зарегистрирован в международной классификации пищевых добавок в качестве стабилизатора под номером Е440 и относится к типу разрешенных добавок применению практически во всех странах мира. Получают пектин из различного растительного сырья, при этом содержание пектиновых веществ, в пересчете на сухую массу сырья различно. Например, в яблоках, в свекле, в цитрусовых, в корочках цитрусовых, в топинамбуре содержится 3,3–19,9 %, 6,4–30,0 %, 9,0–14,0 %, 20–35 %, 12,0–24,0 %, 5,7–11,7 % пектиновых веществ, соответственно [4].

Пектины используются в различных отраслях пищевой и фармацевтической промышленности: благодаря способности к гелеобразованию они придают продуктам необходимую структуру, являясь загустителями и стабилизаторами. В медицине и фармацевтике пектины используются при лечении сахарного диабета, лучевой болезни, атеросклероза, гемофилии, в профилактических целях при работе с отравляющими веществами и др. [5].

Вязкость и студнеобразующая способность являются важными свойствами водных растворов пектинов, которые в основном зависят от молекулярной массы, степени этерификации, концентрации сахара, количества балластных веществ, сопутствующих данному пектину, температуры и pH среды. При увеличении взаимной ассоциации молекул пектина при добавлении сахара, спирта образуются стойкие агрегаты молекул, – золь переходит в гель [6]. Структурирование студней пектиновых гелей идет непрерывно, что сопровождается увеличением относительной вязкости системы. Для хорошего студнеобразования геля, молекула пектина должна иметь определенные размеры. Установлено, что пектин с молекулярной массой от 50 000 до 200 000 обладает хорошими студнеобразующими свойствами [7]. Степень этерификации молекул пектина также способствует его студнеобразованию.

Обработка растительного сырья высоким давлением изменяет его реологические свойства и позволяет получать пищевые продукты с увеличенными сроками хранения, не изменяя их натуральных ароматов и питательности. Целью работы было изучение физико-химических и структурно-механических свойств пектинов, которые были получены из выжимок яблок сорта «Ренет Симиренко» и из сушеных выжимок грейпфрута сорта «Дункан» с предварительной выдержкой сырья под высоким давлением. Все методики были отработаны на пектинах типа mRS и ESS_103 заводского производства.

Экспериментальная часть. Для получения пектина из яблок использовались яблочные выжимки, которые хранились в герметичной таре не более 5 суток при температуре 1–4 °С. Протопектин получали после двукратной обработки выжимки (50,0 г выжимки на 250 мл дистиллированной воды) сернокислым раствором до pH 2,5–3,0, фильтровкой на воронке Бюхнера и промывки дистиллированной водой (фильтр не отжимается) при температуре 323 К. Гидролиз протопектина проводили в растворе фильтрата в 600 мл дистиллированной воды 120 минут при pH 1,8 и температуре 344±1 К. Стабильность значения pH контролировали добавками в систему ортофосфорной кислоты (H_3PO_4) или гидрокарбоната натрия ($NaHCO_3$). Нагретую смесь охлаждали до комнатной температуры в кристаллизаторе, нейтрализовали 10% раствором гидроксида натрия (NaOH) до значения pH 3,6–3,8 и центрифугировали не менее 5 минут при 3 000 об/мин. Фильтрат упаривали до 100 мл в ротационном вискозиметре при температуре при температуре не выше 344 °С. После остывания в фильтрат добавлялось 300 мл изопропилового спирта. Через сутки, выпавший в осадок пектин фильтровали на фильтре Шотта, сушили на воздухе не менее суток и в вакуум-

эксикаторе над хлоридом кальция ($CaCl_2$) при 0,5 атм и измельчали в ступке. Выход продукта рассчитывается в пересчете на сырые выжимки.

Для получения пектина из цитрусовых 60 г сушеных выжимок грейпфрутов промывали слабым раствором азотной кислоты (HNO_3) с концентрацией 0,0125 г-экв/дм^3 (pH 2,6; гидромодуль 1:20) при перемешивании в течение 30 мин. После декантации промытые выжимки заливали горячей дистиллированной водой до объема 1 литр. Гидролиз проводили 150 минут, начиная с момента добавления к смеси 20 мл 20% раствора азотной кислоты (pH 1,3) при температуре 358 К [11]. После чего добавляли холодную дистиллированную воду до объема двух литров и отстаивали в течении 2 часов. Пектиновый экстракт отфильтровывали через фильтр-картон с добавлением кизельгура и смешивали с этиловым спиртом (C_2H_5OH) в соотношении 1:1. Коагулированный пектин отделили от спиртовой жидкости и промывали 1 литром спирта, который разделяли на три порции. Промытый пектин сушили при температуре 338 К в течение 3 часов.

Степень этерификации полученных пектинов определяли по ГОСТу пищевой промышленности [12]. Метод основан на титриметрическом определении свободных и, после омыления, этерифицированных карбоксильных групп полигалактуроновой кислоты в очищенной от растворимых балластных примесей и катионов в навеске препарата пектина.

Вязкость водных растворов пектина определяли вискозиметрическим методом. Для этого использовался ротационный вискозиметр Reotest RN 4.1. Управляемый персональным компьютером реометр позволяет в широком диапазоне напряжений и скоростей сдвига автоматически снимать кривые вязкости и текучести.

Обработка растительного сырья высоким давлением осуществлялась на установке сверхвысокого давления (УСВД). Установка предназначена для исследования влияния высокого гидростатического давления (до 800 МПа) и температуры (от -20 ˚С до +80 ˚С) на различные объекты с выдержкой объекта в камере высокого давления на срок от нескольких минут до нескольких суток. Охлаждение проводится продувкой жидким азотом с регулируемой скоростью охлаждения с защитой камеры от обмерзания и потения рабочей камеры. Безостановочная регистрация параметров обработки объектов осуществляется на компьютере.

Результаты и их обсуждение. Перед получением пектина из яблок сорта «Ренет Симиренко» и из грейпфрутов сорта «Дункан» растительное сырье обрабатывалось в течении 15 минут высоким давлением (Р, МПа): 100, 200, 300 и 400. Важной характеристикой пектина является его способность его к студнеобразованию, которая определяется степенью его этерификации. Чем больше степень этерификации, тем прочнее будут получены студни. Полученные в работе пектины относятся к высокоэтерифицированным пектинам (> 50 %). Степень этерификации яблочного пектина составила 66 %, а грейпфрутового пектина – 59 %. Однако недостаточно высокие значения степени этерификации (< 70 %), классифицируют их как пектины медленной садки [12].

Объектом исследования реологии является изучение деформаций и течения материалов. Важным реологическим свойством вещества, особенно жидкостей является их вязкость. Известно, что вязкость, это измерение внутреннего трения между слоями жидкости при ее движении, чем больше трение, тем больше силы необходимо приложить, чтобы вызвать движение жидкости или сдвиг. Сдвиг имеет при физическом перемещении и разрушении жидкости. По характеру течения жидкости и псевдожидкости, делят на ньютоновские жидкости и неньютоновские жидкости:

которые делятся на три типа: псевдопластичные, дилатантные и пластичные жидкости [13]. Согласно полученным зависимостям (рис. 1 и рис. 2), напряжение сдвига и вязкость пектина зависит от скорости сдвига, т.е. исследуемые жидкости относятся к неньютоновским жидкостям. Поскольку напряжение сдвига и динамическая вязкость пектина увеличиваются при увеличении скорости сдвига их можно отнести к типу псевдопластичных жидкостей.

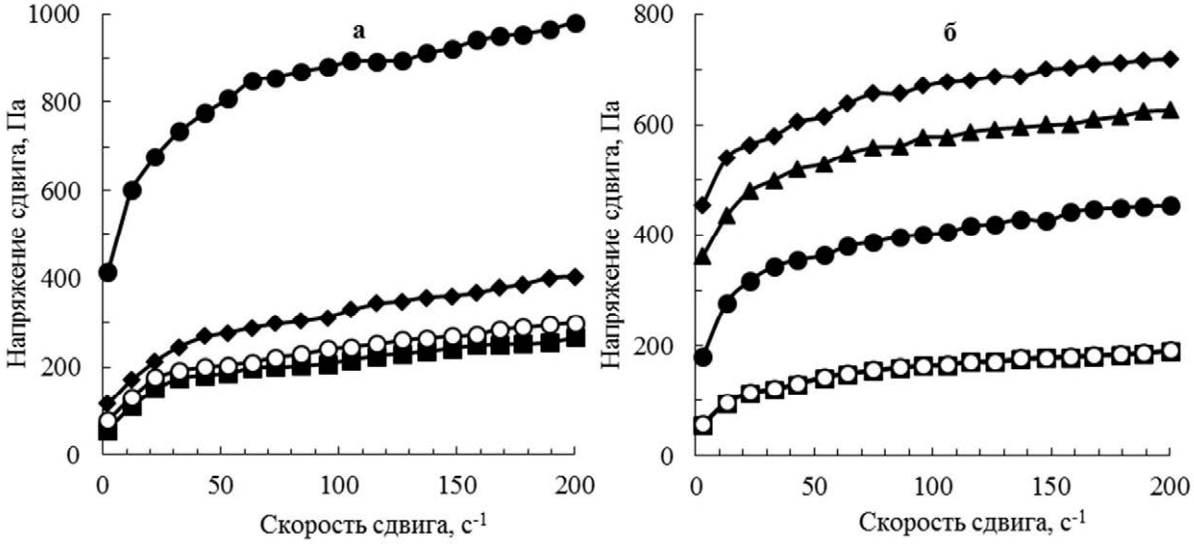


Рис. 1. Зависимости напряжения сдвига от скорости сдвига растворов яблочного (а) и грейпфрутового (б) пектина после предварительной обработки растительного сырья высоким давлением (МПа): ■ – контроль; ○ – 100; ● – 200; ♦ – 300; ▲ – 400

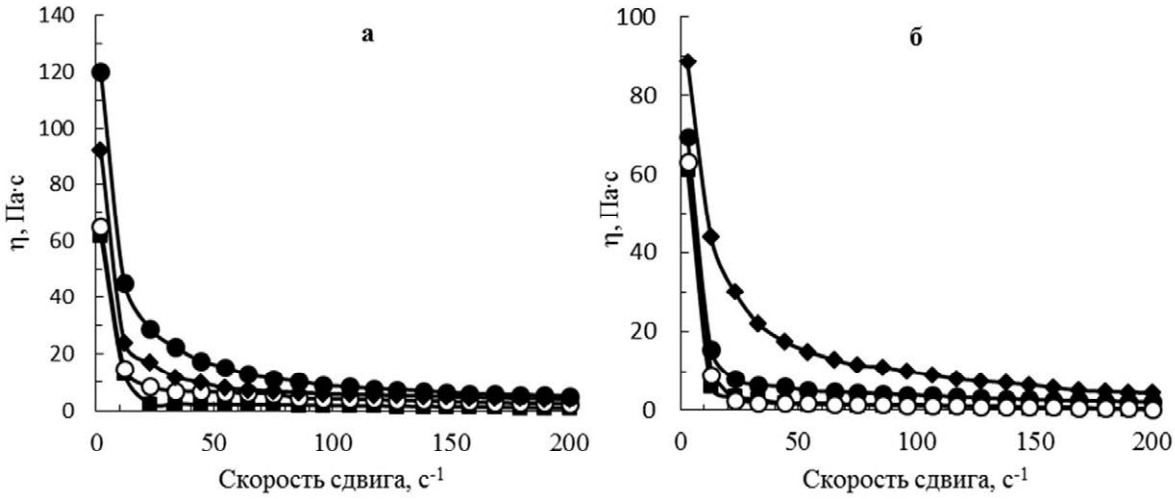


Рис. 2. Зависимости вязкости от скорости сдвига растворов яблочного (а) и грейпфрутового (б) пектина после предварительной обработки растительного сырья высоким давлением (МПа): ■ – контроль; ○ – 100; ● – 200; ♦ – 300

Влияние обработки растительного сырья высоким давлением на реологические свойства получаемого пектина представлены на рис. 1. Значительное падение напряжение сдвига в зависимости от скорости сдвига говорит о разрушении исходной структуры пектина. Для контрольных определений использовались растворы пектина, полученные из растительного сырья без предварительной обработки выжимок высоким давлением.

В случае яблочного фруктового сырья исходная структура пектина разрушается при обработке выжимки при давлении 300 МПа (рис. 1, а). Пектин, полученный из грейпфрутового сырья разрушается при обработке выжимки при 400 МПа (рис. 1, б).

Влияние исходной обработки растительного сырья высоким давлением на структурно-механические свойства пектина подтверждается зависимостями динамической вязкости полученных растворов пектинов от скорости сдвига (рис. 2). Яблочная выжимка разрушается при 300 МПа (рис. 2, а), а для грейпфрута при увеличении предварительной обработки растительного сырья давлением до 400 МПа динамическая вязкость закономерно увеличивается (рис. 2, б).

Для подтверждения влияния давления на процесс структурирования полученных пектинов была исследована зависимость приведенной вязкости от концентрации растворов пектинов, полученных из яблочных и грейпфрутовых выжимок. По представленным на рис. 3 (а и б) зависимостям, можно заключить, что с увеличением давления для обработки растительных вытяжек возрастает характеристическая вязкость исследуемых растворов пектинов, что можно объяснить увеличением молекулярной массы получаемых пектинов.

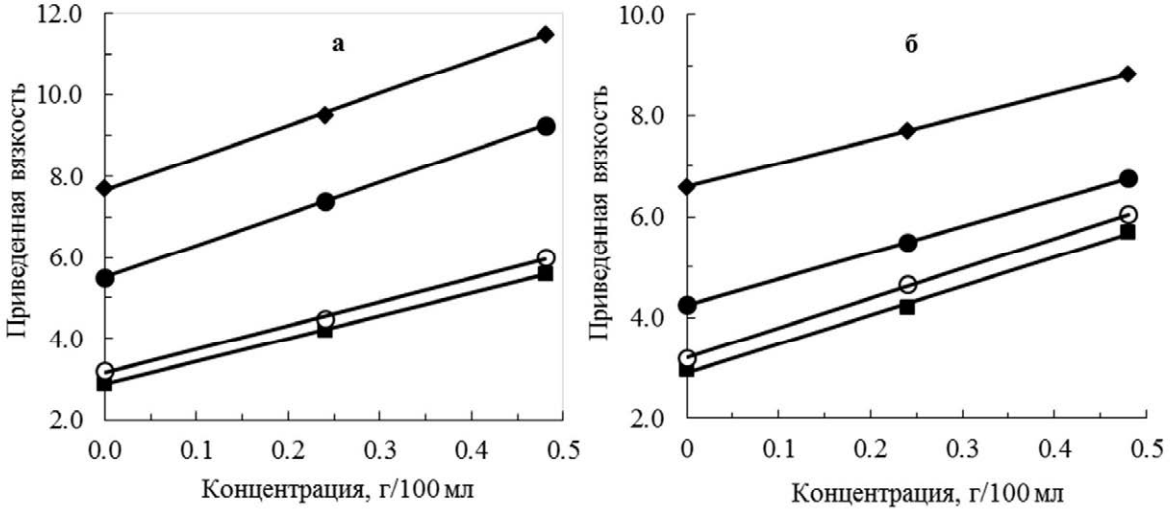


Рис. 3 Зависимости приведенной вязкости растворов яблочного (а) и грейпфрутового (б) пектина от концентрации после предварительной обработки растительного сырья высоким давлением (МПа): ■ – контроль; ○ – 100; ● – 200; ♦ – 300.

На рис. 4 представлена структура пектина, которая была получена из растительных выжимок без их предварительной обработки высоким давлением. Эта структура характеризуется тем, что цепи макромолекул пектина соединены между собой водородными связями, которых не много, т.к. после обработки пектина давлением образуется малая доля влаги.

После обработки выжимки давлением, был получен пектин со структурой, представленной на рис. 5. Мы предполагаем, что при воздействии на систему давлением мы сообщаем ей некоторую энергию, которой достаточно для того, чтобы образовалась эфирная связь. Редкая сшивка цепей приводит к разветвлению молекул и увеличению ее размера.

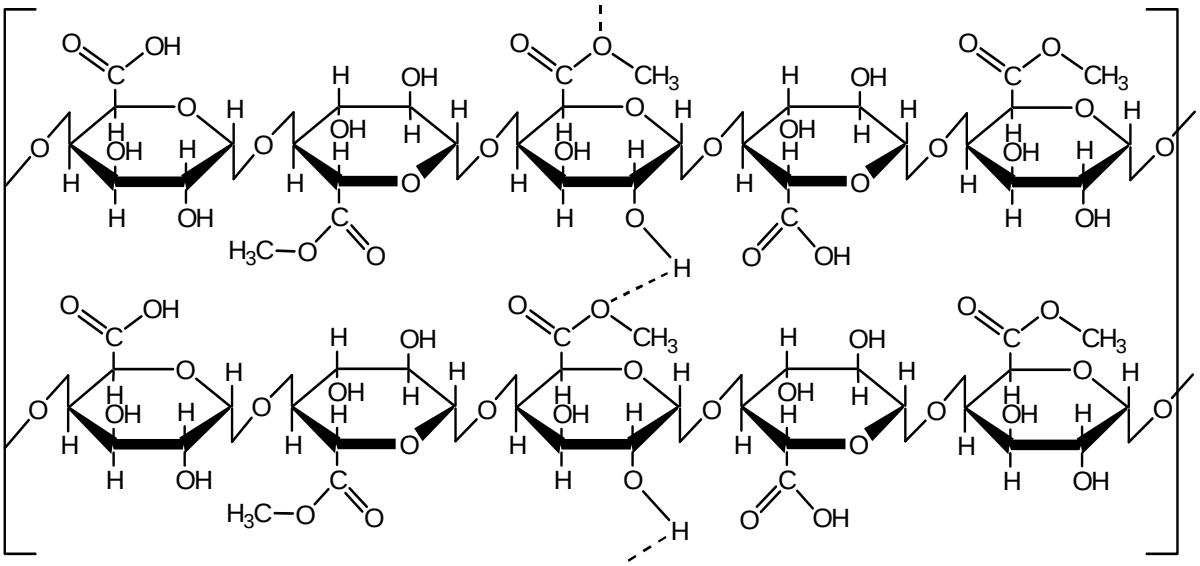


Рис. 4 Структура пектина без обработки растительного сырья высоким

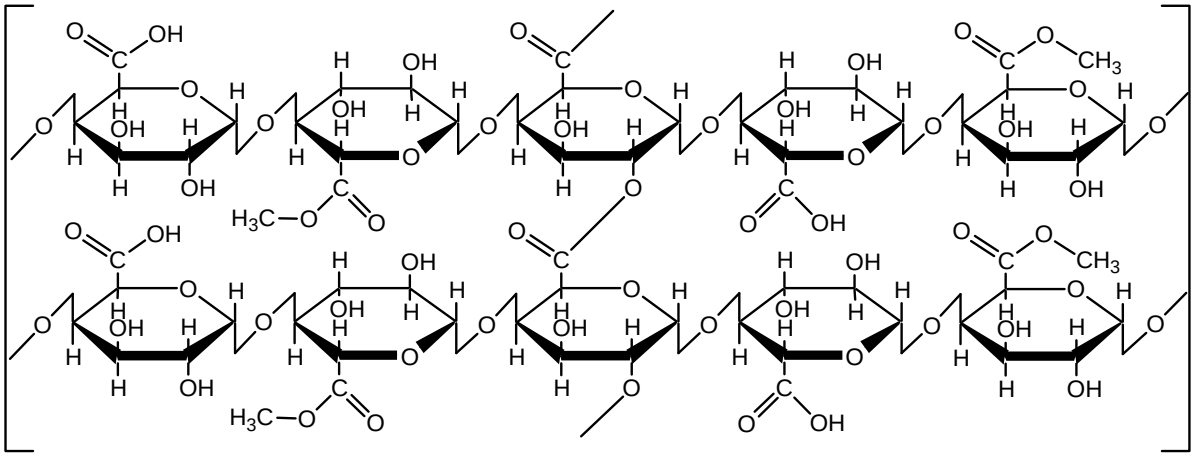


Рис. 5 Структура пектина с обработкой растительного сырья высоким давлением.

Такое предположение косвенно подтверждается тем, что в случае обработки вытяжек давлением 200 МПа для яблочного пектина и 300 МПа для грейпфрутового, характеристическая вязкость значительно увеличивается, а после обработки давлением 300 и 400 МПа, соответственно, – напротив снижается. Данное снижение можно объяснить тем, что во время обработки вещества высоким давлением, имеет место такое состояние, которое характеризуется сильным сжатием полимера. При этом свободный объем полимера уменьшается за счет уменьшения межмолекулярных расстояний, при этом могут деформироваться электронные оболочки атомов. Таким образом, при давлении 300 МПа для яблочного и 400 МПа для грейпфрутового пектина наблюдается разрушение структуры, а именно происходит механический разрыв макромолекул, за счет невозможности дальнейшего уменьшения свободного объема полимера.

Выводы. На ротационном вискозиметре исследованы реологические свойства водных растворов пектина, которые были получены из выжимок яблок сорта «Ренет Симиренко» и грейпфрутов сорта «Дункан». Определены оптимальные условия

обработки растительных выжимок высоким давлением. Для получения яблочного пектина вытяжки можно обрабатывать давлением 200 МПа, а верхний предел давления для обработки вытяжек из грейпфрута составляет 300 МПа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Богатырева, Т.Г. Технологии пищевых продуктов с длительными сроками хранения [Текст] / Т.Г. Богатырева, Н.В. Лабутина. - СПб.: Профессия, 2013. – 184 с.
2. Состояние рынка пектина в России и за рубежом [Электронный ресурс] / Н.В. Сокол, З.Н. Хатко, Л.В. Донченко и др. // Новые технологии. – 2008. – № 6. – URL: http://cyberleninka.ru/article/n/sostoyanie-rynka-pektina-v-rossii-i-za-rubezhom
3. Федорук В. А. К вопросу производства пектина из свекловичного жома [Текст] / В.А. Федорук, И.С. Бушмин // Вестник Воронеж. гос. ун-т инж. технол. – 2016. – № 2. – С. 238–242.
4. Оводов, Ю.С. Современные представления о пектиновых веществах [Текст] / Ю.С. Оводов // Биоорган. химия – 2009. – Т. 5, № 3. – С. 293-310.
5. Михеева Л.А. Получение и перспективы использования пектиновых комплексов [Электронный ресурс] / Л.А. Михеева, А.В. Солдатенкова // Ульяновский медико-биологический журнал. – 2011. – №3. – URL: http://cyberleninka.ru/article/n/poluchenie-i-perspektivy-ispolzovaniya-pektinovyh-kompleksov
6. Шелухина Н. П. Пектиновые вещества, их некоторые свойства и производные [Текст] / Н.П. Шелухина, З.Д. Ашубаева, Г.Б. Аймухамедова. – Фрунзе.: Илим, 1970. – 73 с.
7. Хенглейн Ф. Пектины. Биохимические методы анализа растений [Текст] / Ф. Хенглейн. – М.: Иностранная литература, 1960. – С. 280-323.
8. Беспалова С.В. Изучение действия высокого давления и температуры на некоторые микроорганизмы и витамины [Текст] / С.В. Беспалова, И.В. Нога, В.А. Сукманов и др.: Матеріали IV з'їзду українського біофізичного товариства. Донецьк, 19-21 грудня 2006 р. – Донецьк, 2006. – С. 331-332.
9. Толмачев В.О. Разработка технологии экстракта люцерны посевной и его использование для производства безалкогольных напитков антиоксидантной направленности [Текст] / В.О. Толмачев, С.Л. Тихонов, Н.В. Тихонова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Пищевые и биотехнологии». – 2016. – Т. 4, № 3. – С. 47–54.
10. Малишевский, А.А. Использование высокого давления в технологии экстрагирования растительного сырья [Текст] / А.А. Малишевский, С.Л. Тихонов, Н.В. Тихонова // Известия высших учебных заведений. Пищевая технология. – 2016. – № 3. – С. 12-19.
11. Пат. 2033056 Российская федерация, МКИ 6 А 23 L 1/0524, С 08 В 37/06. Способ получения пектина из фруктовых выжимок [Текст] / Андреев В.В., Паршакова Л.П., Демченко Л.А; заявитель и патентообладатель Научно-исследовательский, конструкторско-технологический институт пищевой промышленности. – №4858258; заявл. 10.08.90; опубл. 20.04.95, Бюл. №11. – Режим доступа: http: // ru-patent.info / 20 / 30 – 34 / 2033056.htmlhttp://ru-patent.info/20/30-34
12. ГОСТ РФ 29186 – 91. Пектин. Технические условия [Текст]. – М.: Изд-во стандартов. – 15 с. – Режим доступа: https://standartgost.ru/g/%D0%93%D0%9E%D0%A1%D0%A2_29186-91
13. Чернышева Е.В. Реологические свойства жидкостей [Электронный ресурс] / Е.В. Чернышова, П.А. Ряполов: Молодежь и XXI век – 2016. Материалы VI Международной научной конференции (Курск: 25-26 февраля 2016 г.): в 4-х томах Отв. Ред. Горохов А.А. – Курск.: ЗАО «Университетская книга». – Т.4. – С. 71-74. URL: https://elibrary.ru/item.asp?id=25607333&

Поступила в редакцию 15.02.2018 г.

RHEOLOGICAL PROPERTIES OF SOLUTIONS OF PECTINS AFTER PRELIMINARY PROCESSING OF PLANT RAW MATERIAL WITH HIGH PRESSURE

T.B. Polishchuk, V.V. Morenko

The paper presents the results of investigating the rheological properties (shear direction, viscosity) of pectin solutions depending on the degree of processing of plant material with high pressure from 100 to 400 MPa. As a vegetable raw material, squeezes of apple "Renet Simirenko" and grapefruits of "Duncan" variety were used. The degree of esterification of aqueous solutions of pectins is determined. The viscosity of the

solutions was determined viscometrically on a Reotest RN 4.1 rotational viscometer. Processing of plant raw materials with high pressure was performed on an ultra-high pressure plant.

Keywords: pectin, degree of esterification, pressure, rotational viscometer, shear direction, shear rate, viscosity.

Полищук Татьяна Брониславовна,
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
ассистент кафедры физической химии,
283001, г. Донецк, ул. Университетская 24,
e-mail: tb_polischuk@mail.ru
Тел.: +38050-606-12-81, +38071-395-51-58

Polishchuk Tatiyana Bronislavovna,
Donetsk National University,
283001, Donetsk, Universitetskaya str., 24
Assistant of Physical chemistry department

Моренко Владислав Владиславович,
кандидат химических наук, старший научный сотрудник, ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко»,
283114, г. Донецк, ул. Розы Люксембург 70,
научный сотрудник
e-mail: mvlvl@yandex.ru
Тел.: +38050-844-40-58, +38071-311-77-19

Morenko Vladyslav Vladyslavovich
Candidate of Chemical Sciences (Ph. D.),
Senior Research Officer,
State Institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic Chemistry and Coal Chemistry»,
283114, Donetsk, R. Luxemburg str., 70 Research fellow

Б И О Л О Г И Ч Е С К И Е Н А У К И

УДК 634.948 (477.62)

НОВАЯ КОЛЛЕКЦИЯ-ЭКСПОЗИЦИЯ МОЖЖЕВЕЛЬНИКОВ В ДОНЕЦКОМ БОТАНИЧЕСКОМ САДУ

© 2018. ***А.З. Глухов, Л.В. Хархота, Е.Н. Лихацкая***

В статье приведены данные о создании на территории Донецкого ботанического сада нового коллекционно-экспозиционного участка «Коллекция можжевельников». Коллекция-экспозиция представленных древесных растений соответствует направлению развития современной декоративной дендрологии, а также является базой для изучения новых видов и культиваров древесных растений с перспективой разработки методов их выращивания и размножения для получения посадочного материала местной репродукции и введения в культуру городов промышленного Донбасса. Новая экспозиция вызывает интерес у посетителей сада, разработан целевой экскурсионный маршрут.

Ключевые слова: коллекция; экспозиция; *Juniperus* L.; можжевельник; культивары.

Введение. Род *Juniperus* L. (можжевельник) является самым крупным в семействе Cupressaceae Rich. ex Bartl. и включает 75 видов [The Plant List, 2016]. Все виды рода, за исключением *J. procera* Hochst. ex Endl., распространены в северном полушарии от Арктики до тропического пояса.

Жизненные формы можжевельников разнообразны – от деревьев, образующих можжевеловые леса, до крупных и низких стелющихся кустарников, произрастающих в подлеске или на горных склонах. В регионе естественно не произрастают, в зеленых насаждениях г. Донецка и области встречаются 4 вида и их декоративные культивары, а также отмечены только культивары еще 4 видов [1, 2].

Интродукция древесных растений сегодня переживает особенный этап, характеризующийся значительным ростом интродукции форм, сортов, гибридов как покрытосеменных, так и голосеменных древесных растений [3, 4]. Мировой генофонд культурных форм можжевельников чрезвычайно богат сортами именно декоративной направленности. С таким важным признаком растений как декоративность связано эстетическое воздействие зеленых насаждений, что отличает современное зеленое строительство, развивающееся как отрасль общей культуры. В связи с этим появилась необходимость пополнения коллекции рода *Juniperus* новыми сортами, демонстрирующими достижения современной селекции, а также приемы использования этих ценных хвойных растений в ландшафтном дизайне [2, 5].

Коллекция можжевельников. Формирование коллекции можжевельников в дендрарии (южном массиве) Донецкого ботанического сада было начато в 70-х гг. Посадочный материал был выращен из черенков, полученных из лесных питомников Донецкой обл. и ботанических учреждений республик бывшего СССР.

В коллекционных насаждениях дендрария в 70-80-е гг. было высажено около 1 500 саженцев. Растения высаживались группами, по видам, и в соответствии с их декоративными особенностями. Кустарники, разрастающиеся в ширину (*J. chinensis* L., *J. sabina* L.), были размещены на переднем плане, по периметру, а более высокие виды (*J. virginiana* L., *J. semiglobosa* Regel, *J. seravschanica* Kom.) – на заднем плане или в

центре группы. Сегодня эти композиции выглядят достаточно декоративно. Кроны низких растений перекрывают друг друга и эффектно обрамляют посадки лиственных и хвойных древесных пород.

Виды рода *Juniperus* нашли применение и в композициях северного массива ботанического сада: в партерной части, на экспозиционных участках созданы крупные массивы из *J. sabina*, из деревьев *J. virginiana* сформирована изящная аллея.

В 2009 – 2010 гг. сотрудниками лаборатории дендрологии, возглавляемой с.н.с., к.б.н. Сусловой Е.П., был спроектирован новый коллекционно-экспозиционный участок «Коллекция можжевельников», площадь которого составляет 0,12 га. Осенью 2010 года высажены растения, полученные из частных питомников Польши. На протяжении 2011–2013 гг. коллекция пополнялась собственно выращенными саженцами из черенков. В настоящее время ассортимент экспозиции включает 30 культиваров, относящихся к 8 видам (таблица).

Таблица

Таксономический состав и декоративность культиваров рода *Juniperus* L.

Вид	Культивар	Форма кроны	Цвет хвои
1	2	3	4
Juniperus chinensis L.	‘Blue alps’	пряморастущая с опущенными кончиками побегов	голубовато-зеленая
	‘Kuriwao Gold’	широкая неправильная	зеленая с золотистым оттенком
	‘Spartan’	широкопирамидальная или колоновидная	светло-зеленая
	‘Stricta’	конусовидная	зеленая с голубоватым оттенком
J. communis L.	‘Blue Fox’	компактная обратноконическая	сизо-зеленая с серебристым оттенком
	‘Hibernica’	узкопирамидальная	голубовато-серо-зеленая
	‘Horstmann’	плакучая	светло-зеленая
	‘Repanda’	стелющаяся	зеленая с серебристыми полосками
J. horizontalis Moench	‘Andorra compacta’	стелющаяся плотная компактная	сизо-зеленая
	‘Blue chip’	стелющаяся плотная компактная	серебристо-серо-голубая
	‘Blue pearl’	приподнята вверх	серебристо-голубая
	‘Glauca’	стелющаяся	голубовато-стальная
	‘Golden carpet’	стелющаяся плотная	желто-зеленая, ярко-золотистая сверху
	‘Montana’	стелющаяся раскилистая	серо-зеленая
	‘Prince of Wales’	стелющаяся	насыщенно зеленая
	‘Wiltonii’	стелющаяся расползающаяся	серебристо-голубая
J. ×media Melle	‘Blue and gold’	пышная раскидистая	сизо-зеленая с желтыми вкраплениями
	‘Gold star’	раскидистая плоская	зеленовато-желтая
	‘Hetzii’	широкая раскидистая неплотная	серо-голубовато-зеленая
	‘Mint Julep’	раскидистая плотная	свеже-зеленая
	‘Old Gold’	раскидистая плоская компактная	золотисто-желто-зеленая
	‘Pfitzeriana aurea’	раскидистая	желто-зеленая

Продолжение табл.

1	2	3	4
J. sabina L.	‘Blaue Donau’	распростертая	сизо-зеленая, сизо-голубая
	‘Tamariscifolia’	распростертая	зеленая с сизоватым оттенком
	‘Variegata’	компактная воронковидная	зеленая с кремовыми подпалинами
J. scopulorum Sarg.	‘Silver Star’	колоновидная	голубая с кремовыми прожилками
Juniperus scopulorum Sarg.	‘Skyrocket’	узкая колоновидная	серовато-голубая
J. squamata Buch.-Ham. ex D.Don	‘Blue spider’	форма «паука» - широкий конус с приподнятым центром	серебристо-голубая
J. virginiana L.	‘Grey Owl’	раскидистая	серо-голубая

Сеть извилистых садовых дорожек в пейзажном стиле из декоративной плитки делит экспозиционный участок на шесть отдельных фрагментов. Сорта можжевельников с раскидистой формой кроны обрамляют солитерные посадки высоких колоновидных и пирамидальных культиваров. Отдельными группами высажены сорта с особенно оригинальной кроной – *J. chinensis* ‘Blue alps’ высотой до 1,5 м с мощными побегами, кончики которых эффектно опущены вниз; *J. communis* ‘Blue Fox’ высотой и в диаметре до 1,5 м с кроной в виде перевернутого конуса; карликовый (высота 0,3 м) с распростертыми до 1,0 м в диаметре побегами, придающими кустарнику форму паука, *J. squamata* ‘Blue spider’ с игольчатой, жесткой, колючей серебристо-голубой хвоей. Из кустарников *J. sabina* ‘Blaue Donau’ сформирован массив до 0,7 м высотой, который напоминает прохладную зелено-голубую речную гладь. В солитерных посадках – *J. communis* ‘Horstmann’ (высотой более 2,0 м) – один из самых красивых «плакучих» сортов можжевельников (рис. 1, а), низкорослый (высота 0,3 м, диаметр кроны 0,9 м) кустарник *J. ×media* ‘Gold star’ с раскидистыми в форме лучей звезды золотисто-зелеными побегами, а также группа стройных высотой до 2,5 м колоновидных *J. chinensis* ‘Spartan’ с мягкими побегами и тонкой игольчатой хвоей светло-зеленого цвета (рис. 1, б). Стелющиеся можжевельники высажены небольшими группами ближе к краям участков, образуя красивый густой ковер или миниатюрный лес (*J. horizontalis* ‘Blue pearl’ высотой 0,3 м с ровными направленными строго вверх побегами). Сорта с нетрадиционной цветовой палитрой хвои – сизо-зеленой, серебристо-голубой, золотисто-зеленой создали яркий колористический акцент на экспозиции.

Настоящим украшением коллекции-экспозиции являются отдельные группы и солитерные посадки декоративнолиственных и красивоцветущих кустарников:

- весеннего срока цветения – *Berberis thunbergii* DC. ‘Aurea’, *B. thunbergii* ‘Golden Ring’, *B. thunbergii* ‘Purpurea’, *Deutzia ×lemoinei* Lemoine, *Kolkwitzia amabilis* Graebn., *Spiraea × cinerea* Zab. ‘Grefsheim’;

- весенне-летнего – *Spiraea ×bumalda* Burvenich ‘Crispa’, *S. japonica* L.f. ‘Gold flame’, *S. japonica* ‘Gold Mound’, *S. japonica* ‘Golden Princess’, *S. japonica* ‘Little Princess’, *Weigela ×hybrida* ‘Bristol Ruby’;

- летнего – сорта *Buddleia davidii* Franch. (‘Pink Delight’, ‘Purple princess’, ‘White Profusion’);

- летне-осеннего – *Caryopteris ×clandonensis* Simmonds.

а б

Рис. 1. Фрагмент экспозиции «Коллекция можжевельников»:
а – *Juniperus communis* L. ‘Horstmann’, б – *Juniperus chinensis* L. ‘Spartan’

Эффектно гармонируют с группами можжевельников привитые на штамбе деревца с плакучей формой кроны *Caragana arborescens* Lam. ‘Pendula’ и *Cerasus serrulata* (Lindl.) Loudon ‘Pendula’ (рис. 2).

По данным ревизии текущего года на участке произрастают 187 кустарников, относящихся к 14 родам 8 семейств.

В настоящее время территория коллекционно-экспозиционного участка выглядит ухоженной, оборудована необходимым садово-парковым оборудованием – скамейками для отдыха, фонарями, мусорными урнами.

Рис. 2. Фрагмент экспозиции «Коллекция можжевельников»

Декоративные формы древесных растений, стихийно завезенные частными предпринимателями из питомников Западной Европы, все чаще встречаются в отдельных композициях городского озеленения. Однако основанием для введения их в культуру региона должны быть не только исключительно высокие декоративные качества, а, прежде всего, глубокие интродукционные исследования. Созданная нами на территории ботанического сада коллекция-экспозиция можжевельников дает возможность проводить

такие исследования, что, в конечном итоге, позволит расширить и обогатить ассортимент древесных растений для зеленых насаждений городов Донбасса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Поляков А.К. Интродукция древесных растений в условиях техногенной среды / А.К. Поляков / под общ. ред. чл.-корр. НАН Украины А.З. Глухова. – Донецк: Ноулидж (донецкое отделение), 2009. – 268 с.
2. Поляков А.К. Хвойные на юго-востоке Украины / А.К. Поляков, Е.П. Суслова. – Донецк: Норд-пресс, 2004. – 197 с.
3. Глухов А.З. Интродукционная репрезентативность дендрофлоры мира в коллекционном фонде Донецкого ботанического сада / А.З. Глухов, А.К. Поляков // Проблемы дендрологии на рубеже XXI века: Тез. докл. Междунар. конф., посвященной 90-летию со дня рождения чл.-корр. РАН П.И. Лапина. – М., 1999. – С. 76–77.
4. Поляков А.К. Видовой состав городских насаждений юго-востока Украины и перспективы его обогащения / А.К. Поляков, Е.П. Суслова, С.И. Терещенко и др. // Матер. XII з'їзду Укр. ботан. т-ва (Одеса, 15 – 18 трав. 2006 р.). – Одеса, 2006. – С. 358–359.
5. Эйрих Э. История сортовых можжевельников. Питомник «Эврико». / Э. Эйрих. – Куланинка, 2009. – 34 с.

Поступила в редакцию 19.03.2018 г.

NEW COLLECTION AND EXHIBITION AREA OF JUNIPER SPECIES IN THE DONETSK BOTANICAL GARDEN

A.Z. Glukhov, L.V. Kharkhota, E.N. Likhatskaya

The paper covers laying out of the new collection and display area of juniper species in the Donetsk Botanical Garden, named «Juniper collection». The tree collection presented in this display area reflects main trends in contemporary ornamental dendrology and landscape design. The research on new arboreal species and cultivars with the view of developing methods for their breeding to obtain the planting material of local reproduction for urban greening in Donbass is based on this plant collection. It is also a popular visitor's attraction and a target of guided tours' routes.

Keywords: collection, exhibition area, Juniper, *Juniperus* L., cultivars.

Глухов Александр Захарович
чл.-корр. НАН Украины, доктор биологических наук, професор,
ГУ «Донецкий ботанический сад» (г. Донецк),
главный научный сотрудник отдела интродукции культурных растений.
Тел.: 071 4039506

Glukhov Alexandr Zakharovych
Corresponding Member of the Academy of Sciences of Ukraine, Doctor of Biological Sciences, Professor,
Public Institution Donetsk Botanical Garden (Donetsk), Chief Research Scientist of the Department of Introduction of Cultivated Plants.

Хархота Людмила Валериевна
кандидат биологических наук,
ГУ «Донецкий ботанический сад» (г. Донецк),
старший научный сотрудник лаборатории дендрологии.
E-mail: ludmilaharhota@yandex.ru
Тел.: 071 4386492

Kharkhota Lyudmila Valerievna
Candidate of Biological Sciences,
Public Institution Donetsk Botanical Garden (Donetsk), Senior Research Scientist of the Department of Dendrology.

Лихацкая Елена Николаевна
ГУ «Донецкий ботанический сад» (г. Донецк),
младший научный сотрудник лаборатории дендрологии.
E-mail: lehatskaya@mail.ru
Тел.: 050 7077844

Likhatskaya Elena Nikolaevna
Public Institution Donetsk Botanical Garden (Donetsk), Junior Research Scientist of the Department of Dendrology.

УДК 574.34

МОДЕЛЬ ХИЩНИК — ЖЕРТВА, УЧИТЫВАЮЩАЯ НИЖНЮЮ КРИТИЧЕСКУЮ ПЛОТНОСТЬ ЖЕРТВЫ И КОНКУРЕНЦИЮ ХИЩНИКОВ ЗА ОТЛИЧНЫЙ ОТ ЖЕРТВ РЕСУРС

© 2018. ***А.А. Губарев, В.В. Мицкан, О.В. Краюшкин***

В работе исследуется сосредоточенная (точечная) модификация модели хищник — жертва и устойчивость пространственно-однородных решений её простейшего пространственного обобщения. В случае сосредоточенной модели обнаружено, что имеется область пространства параметров, в которой плотность хищников в стационарном состоянии возрастает с увеличением конкуренции. Для анализа устойчивости пространственно-однородных решений используется линеаризация задачи. Численные эксперименты показали, что некоторые неустойчивые гармонические возмущения приводят к формированию стационарных распределений, совпадающих с формирующимися при других частотах гармонических возмущений.

Ключевые слова: математическая экология; отношение хищник-жертва; конкуренция хищников; диссипативные структуры.

Введение. Учет в базовой модели Вольтерра конкуренции хищников за отличный от жертв ресурс — в простейшем виде линейной зависимости смертности хищников от плотности — приводит [1] к системе уравнений

$$\dot{n}_1 = an_1 - bn_1n_2\,,\ \dot{n}_2 = -cn_2 + dn_1n_2 - en_2^{\,2}\,. \qquad (1)$$

Здесь и ниже по тексту точкой над переменными в исходной модели обозначается производная по t, n_1 и n_2 — плотности численности жертв и хищников. Параметры a, b, c, d положительные; параметр e — неотрицательный. При помощи замены $n_1 = u$, $t = \tau/a$, $n_2 = \dfrac{a}{b}v$ эта система приводится к виду

$$\dot{u} = u - uv\,,\ \dot{v} = -\varepsilon v(m - u - \delta v)\,,$$

где $m = c/d$, $\varepsilon = d/a$, $\delta = ea/(db)$, а точка над переменными здесь и ниже по тексту в системах уравнений, полученных после замены переменных для уменьшения числа параметров, обозначает производную по параметру τ. Система имеет две принадлежащие первой четверти фазовой плоскости стационарные точки: $O(0,0)$ и $A(m+\delta,1)$. Точка A является устойчивым фокусом и глобальным аттрактором при любых значениях параметров (т.е. при любых начальных значениях, принадлежащих первой четверти, все фазовые траектории «стремятся к этой точке»). В данной модели плотность хищников в стационарной точке от δ не зависит, а плотность жертв растёт с увеличением δ.

Учет конкуренции как хищников (за отличный от жертв ресурс), так и жертв, в простейшем виде линейной зависимости, приводит к модели

$$\dot{n}_1 = an_1(1 - n_1/K) - bn_1n_2\,,\ \dot{n}_2 = -cn_2 + dn_1n_2 - en_2^{\,2}\,. \qquad (2)$$

Здесь первое уравнение записано в традиционной форме «ограниченности ресурсов». При помощи замены $n_1 = Ku$, $t = \tau/a$, $n_2 = av/b$ эта система приводится к виду

$$\dot{u} = u(1-u) - uv\,,\ \dot{v} = -\varepsilon v(m - u + \delta v)\,,$$

где $m = c/(dK)$, $\delta = ac/(dbK)$, $\varepsilon = dK/a$. Система имеет в первой четверти фазовой плоскости три стационарные точки $O(0,0)$, $A(1,0)$, $B\left(\frac{m+\delta}{1+\delta}, \frac{1-m}{1+\delta}\right)$. Плотность хищников, соответствующая точке B, убывает при увеличении учитывающего конкуренцию хищников параметра δ (при $m \le 1$, когда точка B принадлежит первой четверти).

При малых плотностях в изолированной двуполой популяции для плодовитости более уместно не постоянное значение, а линейное выражение. Это приводит к модели

$$\dot{n} = an(n - L)(K - n)\,,$$

которую иногда называют моделью изолированной популяции, учитывающую нижнюю критическую плотность и конкуренцию.

В [1], наряду с другими трехфакторными моделями, рассматривается модель отношения хищник — жертва, использующая предыдущую модель для описания популяции жертвы в отсутствии хищника

$$\dot{n}_1 = an_1(n_1 - L)(1 - x/K) - bn_1n_2\,,\ \dot{n}_2 = -cn_2 + dn_1n_2\,. \tag{3}$$

Эту систему при помощи замены $n_1 = Ku$, $t = \tau/(aK)$, $y = (a/b)Kv$ можно привести к виду

$$\dot{u} = u(u - l)(1 - u) - uv\,,\ \dot{v} = -\varepsilon v(m - u)\,,$$

где $\varepsilon = d/a$, $m = c/d\,K$, $l = L/K$.

В настоящее время продолжают изучаться ранее предложенные модели [2, 3, 4] и строятся новые [5, 6, 7, 8]. Модели взаимодействующих популяций используются для описания близких экологических и биологических проблем: в [9] —очистки сточных вод, в [10] — взаимодействия когнитивных и эмоциональных мод мозга. Используемые в [9] и [10] модели являются моделями типа хищник — жертва или прямым обобщением модели хищник — жертва. В связи с важностью построения иерархической базы знаний по математическому моделированию биологических систем остается актуальной задача исследования простых неизученных моделей [11].

В данной работе исследуется модификация модели (3), учитывающая конкуренцию хищников за отличный от жертв ресурс, а также устойчивость пространственно-однородного решения распределённого обобщения этой модификации. Учет конкуренции хищников приводит к тому, что при параметризации аналогичной используемой в работе [1] для модели (3) граница области устойчивости перестаёт быть независящей от параметра ε.

Модель и метод исследования. В первой части работы исследуется сосредоточенная модель

$$\dot{n}_1 = an_1(n_1 - L)(1 - n_1/K) - bn_1n_2\,,\quad \dot{n}_2 = -cn_2 + dn_1n_2 - en_2^2\,. \tag{4}$$

Во второй части — устойчивость пространственно-однородных решений системы

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = D_1\frac{\partial^2 n_1}{\partial x^2} + an_1(n_1 - L)(1 - n_1/K) - bn_1n_2\,,\ \frac{\partial n_2}{\partial t} = D_2\frac{\partial^2 n_2}{\partial x^2} - cn_2 + dn_1n_2 - en_2^2\,, \tag{5}$$

на отрезке $(0, \ell)$, с краевыми условиями

$$\frac{\partial n_1(0,t)}{\partial x}=\frac{\partial n_1(\ell,t)}{\partial x}=0\,,\quad \frac{\partial n_2(0,t)}{\partial x}=\frac{\partial n_2(\ell,t)}{\partial x}=0\,. \tag{6}$$

Здесь x — пространственная координата; D_1, D_2 — коэффициенты, характеризующие перемещение особей по ареалу.

Граничные условия выражают замкнутость ареала: особи не могут покидать ареал или проникать извне. В качестве пространственно-однородного решения рассматривается асимптотически устойчивое решение сосредоточенной системы (4).

Заменой $n_1=Ku_1$, $t=\tau/(aK)$, $n_2=(a/b)Kn_2$ система (4) и задача (5), (6) приводятся к виду

$$\dot{u}_1=u_1(u_1-l)(1-u_1)-u_1u_2\,,\ \dot{u}_2=-\varepsilon u_2(m-u_1+\delta u_2)\,; \tag{7}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial\tau}=\widetilde{D}_1\frac{\partial^2u_1}{\partial x^2}+u_1(u_1-l)(1-u_1)-u_1u_2\,,\ \frac{\partial u_2}{\partial\tau}=\widetilde{D}_2\frac{\partial^2u_2}{\partial x^2}-\varepsilon u_2(m-u_1+\delta u_2)\,, \tag{8}$$

$$\frac{\partial u_1(0,t)}{\partial x}=\frac{\partial u_1(\ell,t)}{\partial x}=\frac{\partial u_2(0,t)}{\partial x}=\frac{\partial u_2(\ell,t)}{\partial x}=0\,, \tag{9}$$

$$0\le l<1\,,\ m>0\,,\ \delta>0\,, \tag{10}$$

где $\varepsilon=d/a$, $m=c/(dK)$, $\delta=ea/(db)$, $\widetilde{D}_i=D_i/(Ka)$, $i=1,2$.

Исследование сосредоточенной модели. В первой четверти система (7) может имеет стационарные точки: $O(0,0)$, $A(1,0)$, $B(l,0)$,

$$C\left(\frac{\delta l+\delta-1+\sqrt{(\delta l+\delta-1)^2-4\delta(\delta l-m)}}{2\delta},\frac{1}{\delta}\left[\frac{\delta l+\delta-1+\sqrt{(\delta l+\delta-1)^2-4\delta(\delta l-m)}}{2\delta}-m\right]\right),$$

$$D\left(\frac{\delta l+\delta-1-\sqrt{(\delta l+\delta-1)^2-4\delta(\delta l-m)}}{2\delta},\frac{1}{\delta}\left[\frac{\delta l+\delta-1-\sqrt{(\delta l+\delta-1)^2-4\delta(\delta l-m)}}{2\delta}-m\right]\right).$$

Стационарные точки O, A и B принадлежат первой четверти при всех допустимых значениях параметров. Точки C и D принадлежат первой четверти при выполнении условия $m<1$ и дополнительно: в случае точки C — условия $l<l_h$, где

$$l_h:\quad l=\begin{cases}\dfrac{\delta+1-2\sqrt{\delta(1-m)}}{\delta}, & m\le\dfrac{\delta-1}{\delta},\\ m, & m>\dfrac{\delta-1}{\delta},\end{cases}$$

а в случае точки D — условий $\delta>1$, $m\le l\le l_h$.

Если обозначить координаты стационарной точки через $u_{1s}(m,l,\delta,\varepsilon)$ и $u_{2s}(m,l,\delta,\varepsilon)$, то система первого приближения может быть записана в виде

$$\dot{v}_1=a_{11}v_1+a_{12}v_2\,,\ \dot{v}_2=a_{21}v_1+a_{22}v_2\,,$$

где $v_1=u_1-u_{1s}$, $v_2=u_2-u_{2s}$, $A=\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}u_{1s}(1-2u_{1s}+l) & -u_{1s}\\ \varepsilon u_{2s} & -\varepsilon\delta u_{2s}\end{pmatrix}$.

Для асимптотической устойчивости должны выполняться соотношения

$$a_{11}+a_{22}<0, \quad \Delta \equiv a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}>0. \tag{11}$$

Тип точек O, A и B не зависит от параметров ε и δ, и легко находится непосредственной подстановкой координат этих точек в (11): O — устойчивый узел для всех допустимых значений параметров; A — устойчивый узел, если $m>1$, и седло, если $m<1$; B — неустойчивый узел, если $l>m$, и седло, если $l<m$.

В случае точки C, для всех значений параметров, для которых выполняется первое неравенство (11), выполняется неравенство $\Delta \geq 0$, причем Δ принимает значение равное нулю на линии $l=l_h(\delta,m)$. Следовательно, в области, где $a_{11}+a_{22}<0$ точка C — асимптотически устойчивая. Явные выражения для границы областей устойчивости и неустойчивости

$$u_{1s}(1+l-2u_{1s})-\varepsilon(u_{1s}-m)=0$$

стационарных точки C и D могут быть получены в предельных случаях $\varepsilon \to 0$ и $\varepsilon \to \infty$. Подставив координаты точек C и D, получим, что на параметрической плоскости (m,l).

1. При $\varepsilon \to 0$ для точки C это уравнение задаёт линию

$$m=\frac{l+1}{2}-\frac{\delta}{4}(l-1)^2. \tag{12}$$

Для точки D решений нет.

2. При $\varepsilon \to \infty$ граница $l=m$ существует при $\delta>1$ и втором ограничении: для точки C при $m>(\delta-1)/\delta$, а для точки D при $m<(\delta-1)/\delta$.

Путем очевидных, но громоздких вычислений можно показать, что точка D является седлом.

Исследование распределённой модели. Линеаризуя правые части системы (8) в окрестности точки $M(u_{1s},u_{2s})$, получим

$$\frac{\partial v_1}{\partial \tau}=\widetilde{D}_1\frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2}+a_{11}v_1+a_{12}v_2, \quad \frac{\partial v_2}{\partial \tau}=\widetilde{D}_2\frac{\partial^2 v_2}{\partial x^2}+a_{21}v_1+a_{22}v_2). \tag{13}$$

Для исследования устойчивости, решение представляется в виде

$$v_1(x,t)=\sum_{k=0}^{\infty}A_k(t)\sqrt{\frac{2}{\ell}}\cos(\mu_k x), \quad v_2(x,t)=\sum_{k=0}^{\infty}B_k(t)\sqrt{\frac{2}{\ell}}\cos(\mu_k x),$$

где $\mu_k=\pi k/\ell$. Коэффициенты A_k и B_k удовлетворяют обыкновенным дифференциальным уравнениям

$$\frac{dA_i}{dt}=(a_{11}-\widetilde{D}_1\mu_i^2)A_i(t)+a_{12}B_i, \ \frac{dB_k}{dt}=a_{21}A_i+(a_{22}-\widetilde{D}_2\mu_i^2)B_i, \ i=0,1,2,...$$

Для устойчивости тривиального решения должны выполняться соотношения

$$a_{11}+a_{22}-(\widetilde{D}_1+\widetilde{D}_2)\mu_i^2<0, \ (a_{11}-\widetilde{D}_1\mu_i^2)(a_{22}-\widetilde{D}_2\mu_i^2)-a_{12}a_{21}>0. \tag{14}$$

Первое соотношение выполняется автоматически, если в качестве пространственно-однородного решения рассматривается решение сосредоточенной модели. Левая часть второго неравенства представляет собой квадратный многочлен относительно $z\equiv\mu_i^2$.

Для того чтобы условие устойчивости не выполнялось хотя бы для сколь угодно большого значения ℓ, должны существовать положительные корни этого многочлена. Это приводит к следующим необходимым условиям неустойчивости

$$(\widetilde{D}_1 a_{22} + \widetilde{D}_2 a_{11})^2 - 4(\widetilde{D}_1 \widetilde{D}_2)(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) > 0,$$
$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} > 0, \quad \widetilde{D}_1 a_{22} + \widetilde{D}_2 a_{11} > 0. \tag{15}$$

Второе неравенство совпадает с одним из условий устойчивости решения сосредоточенной системы, первое и третье — задают условия неустойчивости. Подставив в эти условия выражения для коэффициентов a_{ij}, получаем конкретные необходимые условия неустойчивости пространственно-однородного решения в области параметров, где решение сосредоточенной системы устойчиво.

Результаты исследования сосредоточенной модели. При $m > 1$ фазовый портрет системы (7) определяется стационарными точками O, A и B. Он качественно эквивалентен фазовому портрету модели (3), не учитывающей конкуренцию хищников: точка A — седло, а точки O и B — устойчивые узлы: при $m > 1$ невозможно сосуществование популяций хищников и жертв. С увеличением параметра δ увеличивается область фазовой плоскости с фазовыми кривыми, заканчивающимися в B. Биологически это ожидаемый результат: с увеличением конкуренции хищников увеличивается множество начальных состояний системы, приводящих к вымиранию популяции хищников и достижению плотности жертв величины определяемой емкостью среды K.

При $m < 1$ так же наблюдается ряд областей параметров с фазовыми портретами эквивалентными портретам модели (3). В случае $m < 1$, $l > l_h$ (область Ω_0 на рис. 1) фазовый портрет определяется точками O, A, B. Все фазовые кривые входят в т. O. В случае $l < m$ и $l < l_z$ (область Ω_1) — точками O, A, B и устойчивой точкой C. В случае $l < m$ и $l > l_z$ (область Ω_4) — точками O, A, B и неустойчивой точкой C. В области Ω_4 фазовая кривая, входящая в A, делит фазовую плоскость на две области: с фазовыми кривыми, заканчивающимися в начале координат и фазовыми кривыми, заканчивающимися в C.

В областях Ω_2: $l > m$, $l < l_z$, $l < l_h$ и Ω_3: $l > m$, $l > l_z$, $l < l_h$ фазовый портрет определяется седлом D и устойчивой точкой C в случае области Ω_2, и неустойчивой точкой C в случае области Ω_3. В области Ω_2 фазовые кривые, входящие в седло D, делят фазовую плоскость на две области: область с фазовыми кривыми, заканчивающимися в точке O, и область с фазовыми кривыми, заканчивающимися в C. В области параметров Ω_3 выходящие из D фазовые кривые, ограничивают область, заполненную фазовыми кривыми, выходящими из точки C. Все фазовые кривые в первой четверти заканчиваются в точке O.

В части областей параметров, в которых устойчивым равновесным состоянием является состояние с ненулевой плотностью хищников и жертв (Ω_1 и Ω_2), производная плотности хищников в стационарном состоянии по δ — положительная. При фиксированных значениях δ и ε область, где $\partial u_{2s}(m,l)/\partial\delta > 0$, ограничена линиями $l = l_h$ и (12). С изменением δ изменяется положение линий (12) и l_z на параметрической плоскости, однако, существует область, в которой для двух достаточно близких, но отличающихся на конечную величину $\Delta\delta$ имеется не пустое пересечение таких областей.

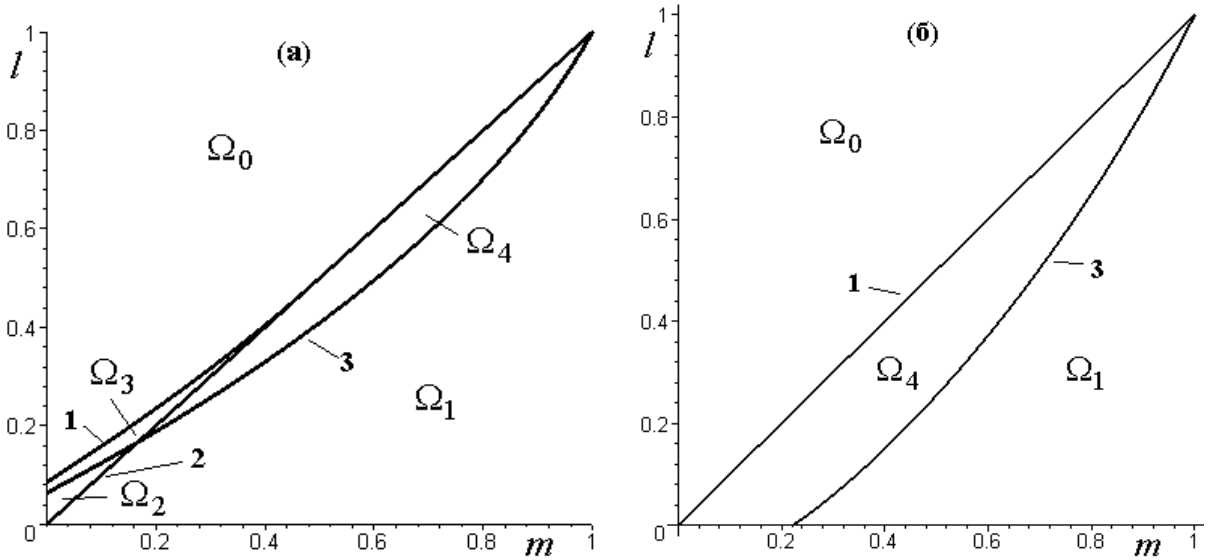


Рис. 1. Параметрические портреты при различных фиксированных значениях параметров: (а) — $\varepsilon = 0.25$, $\delta = 2$; (б) — $\varepsilon = 1$, $\delta = 0.5$. Линии помечены цифрами: 1 — $l = l_h$, 2 — $l = m$, 3 — l_z

На рис. 2 для $\varepsilon = 1$ приведены линии l_z для значений параметров $\delta = 1$ и $\delta = 1/2$ — $l_{z,1}$ и $l_{z,1/2}$, а также некоторые линии уровня функции $\Delta(l.m) = u_{2s}(l,m,1,1) - u_{2s}(l,m,1/2,1)$, т.е. разности плотностей хищников для значений $\delta = 1$ и $\delta = 1/2$ при одинаковых остальных значений параметров. В области ниже линии $l_{z,1/2}$ стационарная точка C устойчива при обоих значениях параметра δ. Область, ограниченная линиями 1 и 3, — пример области, где с увеличением значения параметра δ происходит рост плотности хищников.

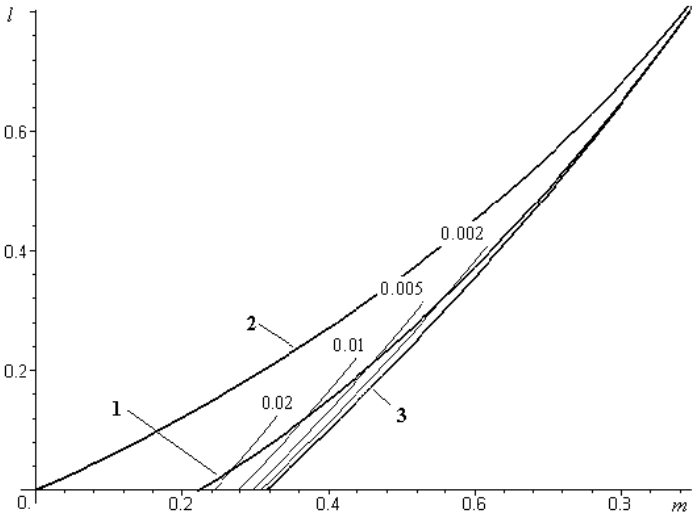


Рис. 2. Область на плоскости параметров (m,l) Линии: 1 — $l_{z,1}$, 2 — $l_{z,1/2}$, 3 — линия уровня $\Delta = 0$; тонкие линии — фрагменты линии уровня Δ, числа возле них — соответствующие значения Δ

В [1] для модели (3) предложено интерпретировать параметр m как приспособляемость хищников к плотности жертвы. Чем меньше величина m — тем выше приспособляемость хищников. В данной работе величину m можно интерпретировать как приспособляемость хищников к плотности жертв в отсутствии конкуренции за ресурсы. Используя такую интерпретацию, можно сформулировать, что максимальное увеличение плотности хищников наблюдается при максимально допустимой условием устойчивости приспособляемости и минимальной нижней плотности l.

С уменьшением ε уменьшается область, в которой плотность хищников в стационарном состоянии имеет положительную производную по δ. При $\varepsilon \to 0$ эта область не существует, поскольку линии l_z и (12) совпадают. Это ожидаемое

поведение. Параметр ε пропорционален коэффициенту d в слагаемом, описывающем увеличение плотности хищников за счет поедания жертв. ε может стремиться к нулю при стремлении d к нулю. В пределе плотность хищников не зависит от плотности жертв, а в модели изолированной популяции, которая учитывает конкуренцию в форме плодовитости пропорциональной плотности, с возрастанием конкуренции плотность популяции уменьшается.

Результаты исследования распределённой модели. На рис. 3 построены линии определяющие область, в которой пространственно-однородное решение может быть неустойчивым. В области ниже линии 2, но выше линий 3 и 5 решение сосредоточенной задачи асимптотически устойчиво, а пространственно-однородные решения распределённой задачи неустойчивы при достаточно большом значении ℓ.

В данной области рассматриваемое решение распределённой задачи устойчиво, если $\ell < \ell_{\min}$, и неустойчиво, если $\ell > \ell_{\min}$, где $\ell_{\min}$ наименьшее положительное решение уравнения $P_k(\ell) = 0$, при $k = 1$, где $P_k(\ell) = (a_{11} - \widetilde{D}_1\mu_k^2)(a_{22} - \widetilde{D}_2\mu_k^2) - a_{12}a_{21}$ (все параметры задачи, кроме ℓ, зафиксированы).

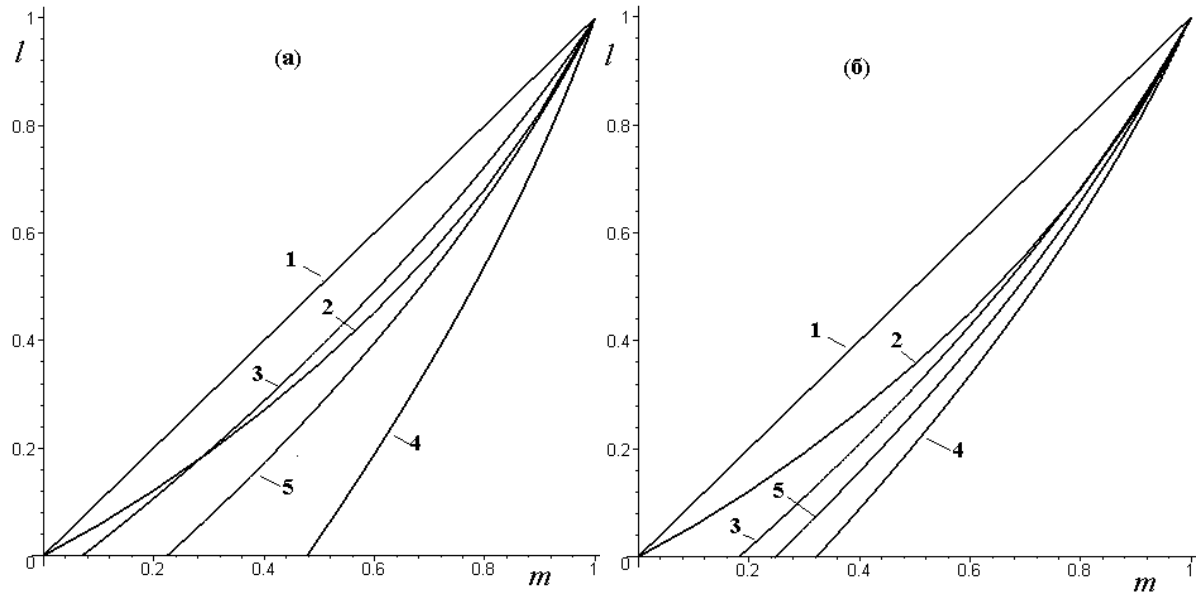


Рис. 3. Граница области неустойчивости пространственно-однородного решения для значений параметров $\varepsilon = 1$ и $\delta = 1$ для разных значений $\widetilde{D}_1/\widetilde{D}_2$: на рис. (а) $\widetilde{D}_1/\widetilde{D}_2 = 1/10$, на рис. (б) $\widetilde{D}_1/\widetilde{D}_2 = 1/100$. Линии: 1 — l_h, 2 — l_z, 3 и 4 — $(\widetilde{D}_1 a_{22} + \widetilde{D}_2 a_{11})^2 - 4(\widetilde{D}_1\widetilde{D}_2)(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) = 0$, 5 — $\widetilde{D}_1 a_{22} + \widetilde{D}_2 a_{11} = 0$.

Типичная зависимость $P(\ell)$, рассчитанная для набора параметров $\widetilde{D}_1 = 1$, $\widetilde{D}_2 = 100$, $\varepsilon = 1$, $\delta = 1$ приведена на рис. 4.

В исследуемой модели для каждого значения k уравнение $P_k(\ell) = 0$ имело два положительных корня — $\ell_{k,1}$ и $\ell_{k,2}$. Численные эксперименты показали следующее.

1. Если при заданной длине ареала ℓ, имеется несколько значений k, таких что

$$\ell_{k,1} < \ell < \ell_{k,2}, \tag{16}$$

то в результате роста возмущения вида $A\cos(k\pi/\ell)$ (где A сколь угодно малая ненулевая

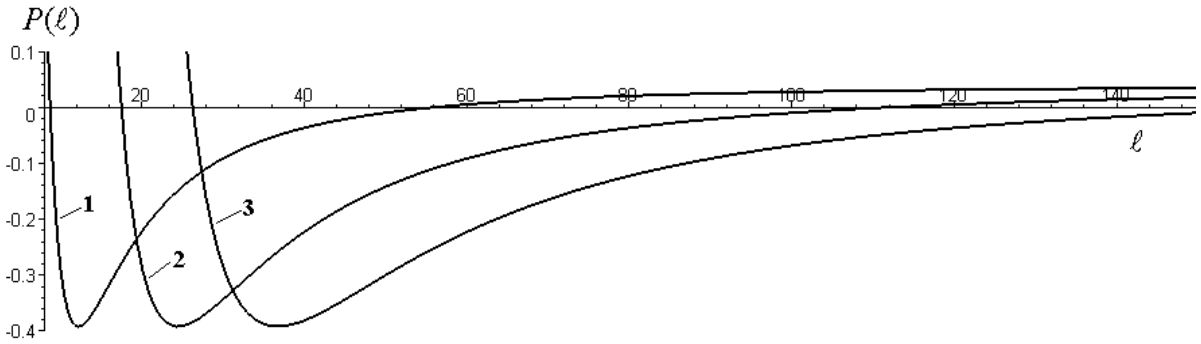


Рис. 4. Зависимость левой части условия устойчивости $P_k(\ell)$ для фиксированных значений параметров $\widetilde{D}_1$, $\widetilde{D}_2$, ε, δ, m, ℓ и различных значений k : 1 — $k=1$, 2 — $k=2$, 3 — $k=3$

величина) формируется пространственно-неоднородное стационарное распределение. Разным значениям k могут соответствовать разные стационарные распределения. Не всем значениям k, удовлетворяющим условию (16), соответствуют своё стационарное распределение: при некоторых значениях k пространственное распределение стремится с ростом времени к стационарному распределению, которое наблюдается при других значениях k.

2. Если при заданном значении k неравенство (16) не удовлетворяется, то, после начального затухания возмущения вида $A\cos(k\pi/\ell)$ с конечной величиной A, формируется пространственное распределение соответствующее одному из значений k, удовлетворяющему (16).

Так, например, при величине $\ell=20$ могут увеличиваться как возмущения с $k=1$, так и возмущения с $k=2$, и они формируют два различных стационарных распределения. Возмущения вида $A\cos(3\pi/\ell)$ испытывают затухание с дальнейшей перестройкой в профиль, соответствующий значению $k=1$ в начальном возмущении, см. рис 5 (а). При $\ell=30$ возмущение вида $A\cos(3\pi/\ell)$ возрастает, однако решение с ростом t стремится к стационарному распределению, формирующемуся при $k=2$, см. рис. 5 (б).

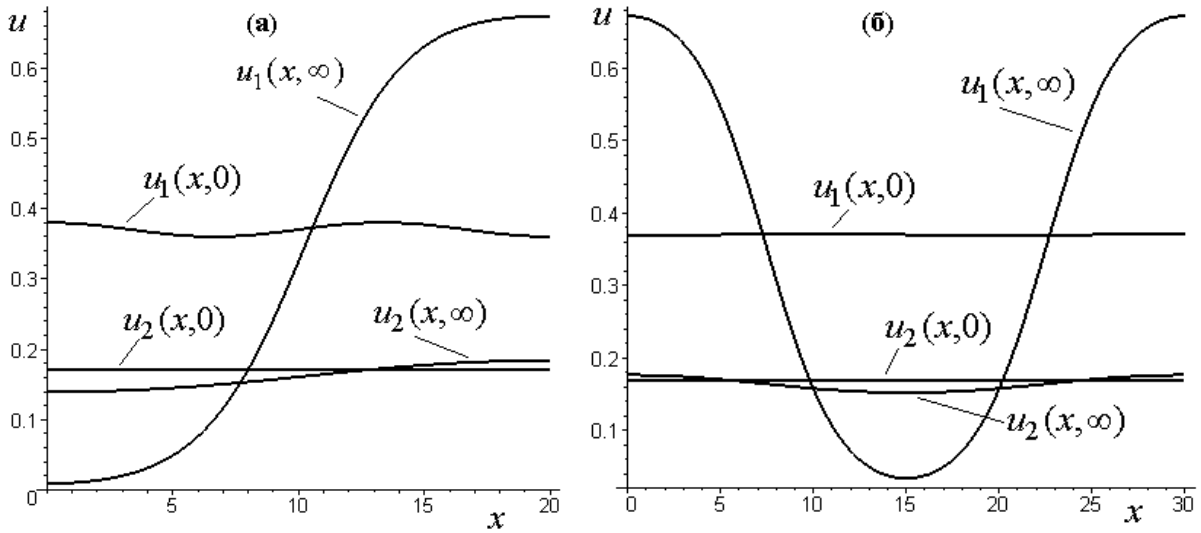


Рис. 5. Примеры возникающих диссипативных структур. На обоих рисунках возмущение пространственно-однородного решения имели вид $A\cos(3\pi/\ell)$. (а) — большая начальная амплитуда; (б) — сколь угодно малая начальная амплитуда

Выводы. Учтет в сосредоточенной модели конкуренции хищников приводит к появлению фазовых портретов, качественно не эквивалентных фазовым портретам модели (3).

Несмотря на качественную неэквивалентность фазовых портретов, соответствующих областям параметров Ω_0 и Ω_3 (например, для параметров из Ω_3 на части фазового портрета присутствуют кривые, описывающие при малых t колебания численности хищников и жертв с увеличивающейся амплитудой, тогда как для параметров из Ω_0 таких фазовых кривых нет), на обоих портретах фазовые кривые заканчиваются в начале координат (вымирание обеих популяций).

Аналогично, с биологической точки зрения, близки и фазовые портреты, соответствующие областям параметров Ω_2 и Ω_4. На фазовых плоскостях можно выделить две области. В одной области фазовые кривые заканчиваются в начале координат (вымирание обеих популяций), в другой области — в устойчивой точке C (сосуществование двух популяций).

В простых моделях с увеличением конкуренции хищников за отличный от жертв ресурс, плотность хищников остается постоянной, например, в модели (1), или убывает, например, в модели (2). В рассматриваемой в данной работе модели имеется область параметров, в которой с возрастанием конкуренции хищников возрастает их плотность. Иными словами, две системы, имеющие в начальный момент одинаковые плотности хищников и жертв, с течением времени приходят в стационарные состояния, в которых плотности хищников и жертв больше у системы с большей конкуренцией хищников за отличный от жертвы ресурс. Это можно объяснить тем, что в результате большей конкуренции хищников популяция жертв имеет возможность увеличить свою численность, что в свою очередь приводит к увеличению плотности популяции хищников в стационарном состоянии.

Непосредственным вычислением можно показать, что пространственно-однородные решения распределённого обобщения модели (3), соответствующие асимптотически устойчивым решениям сосредоточенной системы, устойчивы при любых допустимых значениях параметров. В рассматриваемой в данной работе модели аналогичные пространственно-однородные решения могут быть неустойчивыми. Анализ области параметров, в которой может наблюдаться неустойчивость, удобно разбить на два шага. На первом шаге исследуется область, в которой пусть даже при сколь угодно больших длинах ареала может наблюдаться неустойчивость. На втором шаге для выбранных значений параметров (за исключением длины ареала) можно проверить возможность неустойчивости для заданного значения длины ареала.

Анализ устойчивости выполнялся путем линеаризации исходного уравнения. Численные эксперименты показали, что при фиксированной длине ареала, не все неустойчивые гармонические возмущения формируют своё стационарное состояние (свою диссипативную структуру). Некоторые могут формировать диссипативную структуру, возникающую при гармонических возмущениях другой частоты.

СИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Базыкин А. Д. Нелинейная динамика взаимодействующих популяций / А. Д. Базыкин. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003 – 368 с.
2. Мамедова Т. Ф. Устойчивость математических моделей типа «хищник-жертва» / Т. Ф. Мамедова, Е. В. Десяев, А. А. Ляпина // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. – 2012. – Т. 22, №. 2. – С. 98–105.

3. Гайко В.А. Глобальный бифуркационный анализ квартичной модели «хищник–жертва» / В.А. Гайко // Компьютерные исследования и моделирование. – 2011. – Т. 3, № 2. – С. 125−134.
4. Murray J. D. Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications, Third Edition, – N.-Y. – Berlin: Springer-Verlag, 2003. – 811 p.
5. Апонин Ю. М. Математическая модель сообщества хищник – жертва с нижним порогом численности жертвы / Ю. М. Апонин, Е. А Апонина // Компьютерные исследования и моделирование. – 2009. – Т. 1, № 1. – С. 51–56.
6. Pattern Dynamics in a Spatial Predator-Prey System with Allee Effect. / Gui-Quan Sun, Li Li, Zhen Jin, Zi-Ke Zhang, Tao Zhou // Abstract and Applied Analysis – 2013. – Vol. 2013. – Article ID 921879, 12 p.
7. Букин Ю.С. Процессы коэволюции в системе «хищник–жертва». Эколого-генетическая модель. / Ю.С. Букин // Вавиловский журнал генетики и селекции. – 2014. – Т. 18, № 2. – С. 320–328.
8. Wang J. Dynamics and pattern formation in a diffusive predator–prey system with strong Allee effect in prey / Jinfeng Wang, Junping Shi, Junjie Wei / Journal of Differential Equations. – 2011. – Vol. 251. – P. 1276–1304.
9. Братусь А.С. Математические модели взаимодействия загрязнения с окружающей средой. / А.С. Братусь, А.С. Мещерин, А.С. Новожилов // Вестник МГУ, серия Вычислительная математика и кибернетика. – 2001. – Т. 6. – С. 140–148.
10. Рабинович М.И. Нелинейная динамика мозга: эмоции и интеллектуальная деятельность / М.И. Рабинович, М.К. Мюезинолу // Успехи физических наук. – 2010. – Т. 180, № 4. – С. 371–387.
11 Апонин Ю.М. Иерархия моделей математической биологии и численно-аналитические методы их исследования. / Ю.М. Апонин, Е.А. Апонина // Математическая биология и биоинформатика. – 2007. – Т.2, № 2. – С. 347–360.

Поступила в редакцию 28.10.2016 г.

THE PREDATOR–PREY MODEL WITH LOWER CRITICAL PREY DENSITY AND COMPETITION PREDATOR FOR RESOURCES OTHER THEN PREY

A. A. Gubarev, V. V. Mickan, O. V.Kraushkin

In the paper investigated local (point) modification of the predator–prey model and stability of spatially homogeneous solutions its simplest spatial generalization. In the case of the local model found that there is a region of the parameter space, in which the density of predators in the steady state rises with increasing competition. To analyze the stability of spatially homogeneous solutions used linearization problem. Numerical experiments have shown that some unstable harmonic perturbations lead to the formation of stationary distributions, coincides with the distribution, emerging at the other frequencies of harmonic disturbances.

Keywords: mathematical ecology; predator–prey interaction, predator competition.

Губарев Андрей Анатольевич
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк
E-mail: Gubarev_A_A_@mail.ru
83001, ул. Университетская, 24

Gubarev Andrey Anatolievich
Donetsk National University, Donetsk

Мицкан Владислав Владимирович
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк
83001, ул. Университетская, 24

Mickan Vladislav Vladimirovich
Donetsk National University, Donetsk

Краюшкин Олег Вадимович
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк
83001, ул. Университетская, 24

Kraushkin Oleg Vadimovich
Donetsk National University, Donetsk

ИОСИФ ИЛЬИЧ ГИХМАН
(*К столетию со дня рождения*)

Иосиф Ильич Гихман родился 26 мая 1918 г. в г. Умань Черкасской области. Его научная и педагогическая деятельность связана с Киевским и Донецким университетами.

И.И. Гихман является широко известным математиком 20-го столетия благодаря своим основополагающим работам по теории вероятностей и математической статистике. Вместе с японским математиком К. Ито он считается основателем теории стохастических дифференциальных уравнений. Эта теория достаточно адекватно отображает эволюцию физических, биологических, экономических явлений, которые находятся под влиянием случайных возмущений. Необходимо отметить, что эта теория является одним из наиболее важных открытий прошлого столетия. Кроме того, И.И. Гихман сделал значительный вклад в развитие теории многопараметрических мартингалов и интегралов по ним.

В 1935 г. И. Гихман поступил в Киевский университет на физико-математический факультет, где уже во время обучения работал под руководством Н.Н. Боголюбова, изучая поведение динамических систем при наличии случайных сил.

Н.Н. Крылов и Н.Н. Боголюбов впервые изучали предельные уравнения относительно динамических систем, которые находятся под влиянием случайных сил, которые в пределе превращаются в стохастические процессы с независимыми значениями. Предельный процесс оказался марковским, переходные вероятности которого удовлетворяют уравнениям Фоккера-Планка. Но предельный переход не был строго обоснован, он производился на физическом уровне. Такое обоснование дал

И.И. Гихман, и это положило начало его заинтересованности теорией дифференциальных уравнений, коэффициенты которых зависят от случайных функций.

Полученные следствия составили кандидатскую диссертацию «О влиянии случайных процессов на динамические системы», защищенную в Ташкентском Институте Математики Узбекской ССР в 1942 году во время короткого отпуска из Вооруженных сил. Экстренность такой защиты была вызвана актуальностью рассматриваемых И.И. Гихманом задач с точки зрения акустики и восстановления сигналов.

С первого до последнего дня Великой Отечественной войны Гихман И.И. находился в рядах Красной Армии, был ранен и награжден государственными отличиями. После демобилизации Иосиф Ильич возвращается в научную деятельность и в 1946–1950 гг. завершает теорию стохастических дифференциальных уравнений, которая стала со временем одним из самых важных разделов теории случайных процессов.

Независимо от работ Гихмана и в то же время японский математик Киоси Ито предложил другой подход к построению стохастического дифференциального уравнения. Он базируется на известной из теории обыкновенных дифференциальных уравнений аналогии с интегральными уравнениями. Эта аналогия была осуществлена благодаря определению стохастического интеграла по процессу Винера (интеграла Ито). В дальнейшем именно это построение стало общеизвестным и наиболее употребляемым.

С 1947 г. по 1966 г. И.И. Гихман работает в Киевском университете доцентом, профессором. В 1964 г. Он возглавляет кафедру теории вероятностей и математической статистики. В это время он изучает предельные теоремы для случайных процессов и их применение к предельным свойствам тестов статистических гипотез. В области математической статистики он изучает вопрос об эмпирически оцененных параметрах в свободных от распределений критериях Колмогорова, Смирнова и Мизеса. Вследствие этих исследований он защищает в 1955 г. докторскую диссертацию «Марковские процессы и некоторые проблемы математической статистики»; оппонентами на защите были Б.В. Гнеденко, Н.Н. Боголюбов и Н.В. Смирнов.

Относительно предельных теорем, следует отметить асимптотические разложения аддитивных функционалов, предельные распределения при наличии сходимости к разрывным процессам, эффект нарушения «принципа инвариантности» в теоремах про число пересечений данного уровня. Он установил условия сходимости к винеровскому процессу или к решению стохастического дифференциального уравнения, а также условия стойкости его решения.

Иосиф Ильич Гихман был широко образованным человеком в сфере математики, он читал курсы «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Теория меры и интеграла», «Функциональный анализ», «Теория чисел», «Интегральные уравнения», «Теория вероятностей», «Теория случайных процессов», «Математическая статистика».

Под руководством Гихмана начинал в 1953 году научную деятельность А.В. Скороход, защитили кандидатские диссертации М.Й. Ядренко, А.Я. Дороговцев, И.И. Ежов, Н.И. Портенко, А.Д. Шаташвили – всего 12 молодых ученых.

В декабре 1965 года Иосифа Ильича Гихмана избирают членом-корреспондентом АН УССР, и в феврале 1966 года он переезжает в Донецк, где становится заведующим отделом теории вероятностей и математической статистики Донецкого вычислительного Центра АН УССР, и одновременно заведующим кафедрой алгебры и теории вероятностей Донецкого государственного университета.

В Донецке для развития предыдущих исследований он занимается теорией мартингальных случайных полей, стохастических дифференциальных уравнений в частных производных, криволинейных стохастических уравнений, управляемых случайных процессов. Результаты указанных работ опубликованы в ряде монографий, написанных в соавторстве с А.В. Скороходом, переведены на другие языки.

Особенно следует отметить вклад И.И. Гихмана в теорию мартингальных полей, где он ввел понятие двухпараметрического, слабого и сильного мартингала, бимартингала и установил связь между этими понятиями. Последнее дало возможность обозначить разные стохастические интегралы по двухпараметрическим мартингалам и дать разные версии формулы Ито. В свою очередь, это дало возможность изучать стохастические дифференциальные уравнения в частных производных параболического и гиперболического вида, установить теоремы существования и сходимости их решений, изучать свойства последних.

Разнообразная и плодотворная научная деятельность Иосифа Ильича сопровождалась педагогической. Под его руководством защищено 24 кандидатских и 4 докторских диссертаций.

И.И. Гихман в соавторстве с А.В. Скороходом издали трехтомную монографию по теории случайных процессов, которую можно рассматривать как своеобразную энциклопедию, которая широко цитируется и была переведена на иностранные языки. Он постоянно следил за потребностями студенческого обучения, издавая учебные пособия по читаемым им дисциплинам.

В 1968 году в честь 50-летия Иосифа Ильича состоялся первый Всесоюзный научный форум по теории вероятностей и математической статистике. С тех пор, каждый год до 1975 г. проводились выездные школы-семинары, на которые приезжали учёные из Москвы, Киева, Вильнюса и других городов Советского Союза.

В 1973 году И.И. Гихман основал научные журналы «Поведение систем в случайных средах» и «Теория случайных процессов», будучи главой редакционных советов. Он член редакционной коллегии журнала «Теория вероятности и математической статистики» (г. Киев). Гихманом И.И. и его соавторами были подготовлены и изданы монографии: «Стохастические дифференциальные уравнения», «Управляемые случайные процессы», трёхтомник «Теория случайных процессов», удостоенный Государственной премии УССР, а также учебник «Теория вероятностей и математическая статистика».

И.И. Гихман был широко образованным человеком, прекрасно знал художественную литературу, искусство, имел исключительное чувство юмора, а его трудолюбие и трудоспособность не могли не впечатлять каждого из его окружения.

И.И. Гихман умер 30 июля 1985 г. после тяжелой продолжительной болезни и похоронен в Донецке.

АЛЕКСАНДР СЕРГЕЕВИЧ КОСМОДАМИАНСКИЙ
(*К девяностопятилетию со дня рождения*)

24 марта 2018 года исполнилось девяносто пять лет со дня рождения известного ученого-механика, академика НАН Украины, заслуженного деятеля науки Украины, лауреата премии им. А.Н. Динника, основателя (с 1965 года) и бессменного заведующего кафедрой теории упругости и вычислительной математики Донецкого национального университета по 2004 год.

А.С. Космодамианский родился 24 марта 1923 года в селе Ревны Брянской области. В 1941 году он поступил на первый курс механико-математического факультета Воронежского государственного университета. Однако учебу прервала война, и он добровольцем ушел на фронт. Все годы Великой Отечественной войны был на передовой, его мужество и героизм были отмечены орденом Славы III степени, двумя медалями «За отвагу», многими другими боевыми наградами.

После войны, которая для А.С. Космодамианского завершилась со штурмом Кенигсберга, он продолжил учебу на механико-математическом факультете Саратовского университета (1945–1949). Окончил здесь же аспирантуру с защитой кандидатской диссертации (1952 год) при кафедре теории упругости, возглавляемой известным ученым-механиком С.Г. Лехницким. В 1963 году защищает докторскую диссертацию. В эти годы он вел научную и преподавательскую работу в Ростовском (1952–1953) и Саратовском (1954–1965) университетах. Совместная работа и дружба связывали его со многими видными учеными современности – будущими академиками И.И. Воровичем,

Н.Н. Моисеевым и Г.Н. Савиным, профессорами С.Г. Лехницким, В.К. Прокоповым, Л.А. Толоконниковым, В.И. Юдовичем.

В 1965 году А.С. Космодамианский избирается членом-корреспондентом АН УССР и переезжает в г. Донецк, где в это время был создан Донецкий научный центр АН УССР и открыт новый классический университет. Здесь талант А.С. Космодамианского как ученого, педагога и организатора науки проявился особенно ярко. Под его руководством в Институте прикладной математики и механики НАН Украины был создан отдел математических проблем упругости и пластичности, а в Донецком государственном университете – кафедра теории упругости и вычислительной математики, которую он возглавлял сорок лет. Александр Сергеевич был первым проректором по научной работе Донецкого государственного университета, руководил этим участком работы в течение одиннадцати лет и за это время молодой университет вошел в число ведущих вузов Украины по показателям научной работы.

Величайшей заслугой А.С. Космодамианского перед отечественной наукой явилось создание в Донецке известной во всем мире научной школы по разработке математических методов решения самого широкого круга задач механики деформируемого твердого тела для многосвязных тел и конструкционных элементов с усложненными физико-механическими свойствами, решения задач горной механики о напряженном состоянии многосвязных анизотропных сред. Результаты, полученные им и его учениками по проблемам исследования напряженно-деформированного состояния плит и пластин в пространственной постановке, учета факторов нелинейности, вязкоупругости, связности физико-механических полей при деформировании многосвязных изотропных и анизотропных сред не имели аналогов среди достижений ученых мира и вошли в сокровищницу мировой механики. Исследования по этим направлениям осуществлялись в рамках многих десятков госбюджетных и хоздоговорных научных тем, проектов по грандам отечественных и зарубежных научных фондов. Одним из результатов научных исследований явились многочисленные защиты докторских и кандидатских диссертаций учениками А.С. Космодамианского. Им подготовлено 7 докторов и 54 кандидата наук. А.С. Космодамианским опубликовано свыше 400 научных статей, 16 монографий и учебных пособий по различным направлениям механики сплошных сред.

Результаты научных исследований А.С. Космодамианского получили самую высокую оценку в Украине и далеко за ее пределами. В 1983 году ему была присуждена Премия АН УССР им. А.Н. Динника и присвоено почетное звание «Заслуженный деятель науки Украинской ССР», в 1990 году Александр Сергеевич был избран действительным членом – академиком НАН Украины. В 1997 году он получил звание Соросовского профессора, а в 2001 году стал первым из ученых вуза, удостоенных почетного звания «Заслуженный профессор Донецкого национального университета».

Александр Сергеевич являлся ответственным редактором авторитетного научно-технического сборника «Теоретическая и прикладная механика», в 1988–2001 гг. переводившегося на английский язык и переиздававшегося в США в виде отдельных выпусков журналов «Journal of Soviet Mathematics», «Journal of Mathematical Sciences», членом редакционного совета Международного научного журнала «Прикладная механика», членом редколлегии других научных изданий.

Все годы жизни А.С. Космодамианского были пронизаны неизменной и беззаветной преданностью науке, творческим горением и высочайшей исследовательской ак-

тивностью. Одной из основ научной школы Александр Сергеевич по праву считал созданный по его инициативе Объединенный научный семинар по математическим проблемам механики сплошных сред, который приобрел широчайшую известность и заслуженный авторитет. Традиции его регулярной работы, высокого уровня взыскательности и компетентности, доступности для молодых ученых поддерживались все годы деятельности Александра Сергеевича и, как и многие другие принципы служения науке, завещаны им своим ученикам и последователям.

Будучи выдающимся исследователем и глубоким аналитиком, Александр Сергеевич вместе с тем уделял огромное внимание вопросам преподавания математики и механики, был талантливым педагогом.

Жизненный путь академика А.С. Космодамианского является яркой страницей в истории отечественной науки, истории Донецкого национального университета и Донецкого научного центра. Направления в науке, открытые трудами А.С. Космодамианского, продолжают его ученики и последователи, которые хранят о нем светлую память.

Научное издание

Вестник Донецкого национального университета.
Серия А: Естественные науки

2018. – № 1

Редактор*: Е.В. Алтухов*
Технический редактор: *М.В. Фоменко*

Свидетельство о регистрации СМИ Серия ААА № 000077 от 21.11.2016 г.

Адрес редакции:
ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»,
ул. Университетская, 24,
283001, г. Донецк
Тел: (062) 302-92-56, 302-92-93
E-mail: vestnikdonnu_a@mail.ru
URL: http://donnu.ru/vestnikA

Подписано в печать 02.04.2018 г.
Формат 60×84/8. Бумага офсетная.
Печать – цифровая. Усл. печ. л. 15,4.
Тираж 100 экз. Заказ. № 18-апр35

Издательство ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет»
283001, г. Донецк, ул. Университетская, 24.
Тел.: (062) 302-92-27.
Свидетельство о внесении субъекта издательской деятельности
в Государственный реестр
серия ДК № 1854 от 24.06.2004 г.