СОДЕРЖАНИЕ

Том 499, 2021

CONTENTS

Volume 499, 2021

PHYSICS

MECHANICS

TECHNICAL SCIENCES

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 3–7

ФИЗИКА

УДК 538.955

ЭЛЕКТРОННЫЙ ПАРАМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС И МОДИФИЦИРОВАННОЕ УРАВНЕНИЕ ЛАНДАУ–ЛИФШИЦА В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ С КВАНТОВЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ МАГНИТНОГО МОМЕНТА

 С. В. Демишев[1,2,*]

Представлено академиком РАН И.А. Щербаковым 31.05.2021 г.
Поступило 31.05.2021 г.
После доработки 31.05.2021 г.
Принято к публикации 03.06.2021 г.

Предложено модифицированное квантовыми флуктуациями магнитного момента уравнение Ландау–Лифшица, на основании которого предсказан ряд новых эффектов в электронном парамагнитном резонансе в сильно коррелированных электронных системах, в том числе увеличение интегральной интенсивности и появление универсальных соотношений, связывающие вклад в ширину линии, сдвиг поля резонанса и интегральную интенсивность. Ожидается, что величина квантовых поправок будет зависеть от единственного безразмерного параметра $\sim 2\Delta M_z^2/\mu_B M_0$, где ΔM_z и M_0 – амплитуда флуктуаций и среднее значение магнитного момента в расчете на магнитный ион соответственно.

Ключевые слова: электронный парамагнитный резонанс, сильно коррелированные электронные системы, квантовые флуктуации магнитного момента, соотношения неопределенности Гейзенберга, уравнение Ландау–Лифшица, универсальные соотношения между шириной линии, *g*-фактором и интегральной интенсивностью

DOI: 10.31857/S2686740021040064

В физике различных сильно коррелированных электронных систем (СКЭС) важную роль играют спиновые (магнитные) флуктуации, влияющие на статические и динамические магнитные свойства, а также на электронный транспорт [1]. Строгое теоретическое описание электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) с учетом специфики СКЭС известно лишь для ограниченного числа случаев [2–5], и, как правило, анализ экспериментальных данных проводится в рамках квазиклассической спиновой динамики, описываемой стандартным уравнением Ландау–Лифшица (ЛЛ) [6]. При этом спиновые флуктуации включаются в рассмотрении лишь на качественном уровне [6]. В настоящей работе предложен вариант количественного учета влияния спиновых флуктуаций на описание магнитного резонанса с помощью уравнения ЛЛ в различных СКЭС.

[1] *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия*
[2] *Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Москва, Россия*
**E-mail: demis@lt.gpi.ru*

1. МОДИФИКАЦИЯ УРАВНЕНИЯ ЛАНДАУ–ЛИФШИЦА КВАНТОВЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ МАГНИТНОГО МОМЕНТА

В качестве отправной точки рассмотрим квазиклассическую систему, динамика которой описывается уравнением ЛЛ, когда магнитный момент M вращается вокруг магнитного поля H с частотой $\omega_H = \gamma H$, зависящей от гиромагнитного отношения γ (рис. 1). В системе с сильными взаимодействиями указанная картина будет модифицироваться сильными магнитными флуктуациями, в результате которых траектория конца вектора **M** будет иметь сложный случайный характер (рис. 1). Уширение траектории определяется флуктуациями магнитного момента ΔM, которые могут быть сопоставлены флуктуациям магнитного поля $\Delta M = \left(\frac{\partial M_0}{\partial H}\right) \cdot \Delta H$. В свою очередь, флуктуации поля ΔH будут пропорциональны ширине линии, причем коэффициент пропорциональности будет зависеть от формы линии. Такой подход, очевидно, не зависит от конкретного механизма спиновой релаксации, нарушающего когерентность

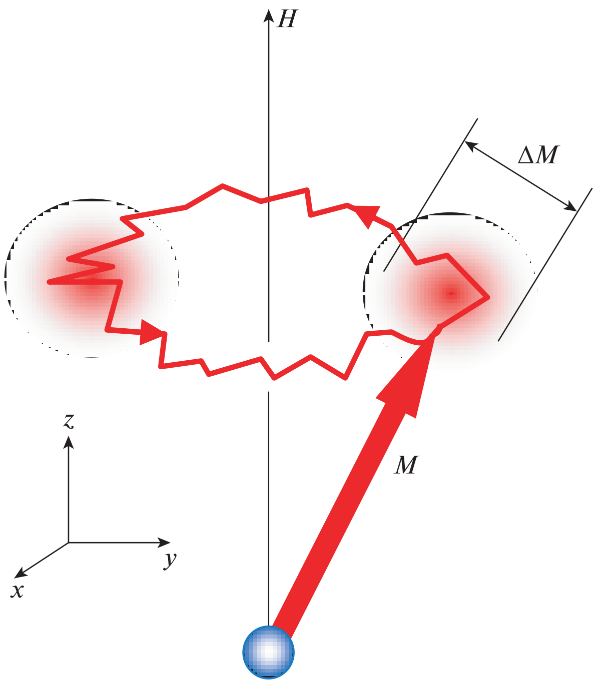


Рис. 1. Движение магнитного момента (M) во внешнем магнитном поле (H) в присутствии спиновых флуктуаций. Траектория конца вектора **M** имеет случайный характер и находится в пространственной области, соответствующей размытию ΔM.

вращения спина и приводящего к флуктуациям ΔM. При этом не ясно, как именно спиновые флуктуации можно включить в релаксационный член, и в результате связь ширины линии ЭПР и флуктуаций остается на качественном уровне. Отметим, что рассмотрение лишь флуктуаций магнитного момента не приведет к изменению резонансной частоты (или g-фактора), поскольку для небольших отклонений от равновесия, характерных для ЭПР-экспериментов, частота вращения не зависит от величины M.

Ситуация существенно изменяется, если флуктуации намагниченности имеют квантовую природу. Для описания квантовых флуктуаций можно использовать соотношения неопределенности Гейзенберга. Поскольку мы рассматриваем квазиклассическую систему, гейзенберговские неравенства должны соответствовать минимальному значению произведения неопределенностей и вырождаются в равенства [7–9].

В квазиклассическом пределе соотношение неопределенностей для физической величины φ имеет вид [8]

$$\Delta E \cdot \Delta\varphi = \hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}, \tag{1}$$

где ΔE – неопределенность энергии рассматриваемой системы E. Если φ – угол вращения вокруг магнитного поля, то

$$\Delta E \cdot \Delta\varphi = \hbar\omega. \tag{2}$$

Неопределенность угла $\Delta\varphi$ связана с неопределенностью связанного механического момента L [8]:

$$\Delta L \cdot \Delta\varphi = \frac{\hbar}{2}. \tag{3}$$

В геометрии рис. 1 система вращается вокруг оси z и, следовательно, ΔL соответствует неопределенности z-компоненты механического момента. Умножая обе части (3) на $e/2mc$, находим связь между неопределенностями магнитного момента и угла:

$$\Delta M_z \cdot \Delta\varphi = \frac{\mu_B}{2}. \tag{4}$$

Здесь e и m обозначают заряд и массу электрона и c – скорость света. Исключая $\Delta\varphi$ из (4) и (2), с учетом $\Delta E = \hbar\Delta\omega$ находим

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{2\Delta M_z}{\mu_B}. \tag{5}$$

(здесь и далее магнитный момент и его флуктуации рассматриваются в расчете на один магнитный ион). Таким образом, в случае квантовых флуктуаций неопределенности частоты вращения и магнитного момента оказываются пропорциональны друг другу и флуктуации намагниченности ΔM и частоты $\Delta\omega$ будут связаны между собой, в результате чего коррелятор $\langle\Delta\omega\Delta M_z\rangle$ будет отличен от нуля.

Рассмотрим теперь вид усредненного уравнения ЛЛ в присутствии квантовых флуктуаций. Примем, что векторы **M** и **H** имеют вид

$$\mathbf{M} = M_0\mathbf{k} + \mathbf{m}(t) + \Delta\mathbf{M},$$

$$\mathbf{H} = H_0\mathbf{k} + \mathbf{h}.$$

Здесь M_0 обозначает величину магнитного момента в постоянном внешнем магнитном поле H_0, направленном вдоль оси z; вектор $\mathbf{m}(t)$ соответствует усредненной осциллирующей намагниченности и $\mathbf{h} \sim \exp(-i\omega \cdot t)$ – переменное магнитное поле, возбуждающее магнитные колебания. В геометрии ЭПР векторы **m** и **h** ортогональны **k** и находятся в плоскости x–y. В уравнении ЛЛ

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma[\mathbf{M},\mathbf{H}] - \frac{\alpha\gamma}{M_0}[\mathbf{M},[\mathbf{M},\mathbf{H}]] \tag{6}$$

флуктуации частоты учтем путем замены $\gamma \to \gamma + \Delta\gamma$, где $\Delta\gamma$ соответствует флуктуациям гиромагнитного отношения, имеющим квантовую природу. Из предыдущего анализа следует, что $\langle\Delta\gamma\Delta\mathbf{M}\rangle = \langle\Delta\gamma\Delta M_z\rangle\mathbf{k}$. В силу условия $m \ll M_0$ примем, что

1) $\Delta M_x, \Delta M_y \ll \Delta M_z$, поскольку флуктуации магнитного момента в плоскости x – y соответствуют флуктуациям малой осциллирующей части намагниченности,

2) корреляторы $\langle \Delta M_x \Delta M_z \rangle$, $\langle \Delta M_y \Delta M_z \rangle$ и $\langle \Delta M_x \Delta M_y \rangle$ равны нулю.

Далее ограничимся линеаризованным вариантом уравнения ЛЛ, когда членами $\sim h^2$ можно пренебречь, а зависимость релаксационного члена от переменной компоненты магнитного поля не учитывается. При усреднении учтем, что $\langle \Delta\gamma \rangle = 0$ и $\langle \Delta\mathbf{M} \rangle = 0$. Тогда уравнение ЛЛ для компонент усредненной осциллирующей части намагниченности принимает вид системы из двух уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dm_x}{dt} &= \gamma H_0 m_y - \gamma M_0 (1+a) h_y - \nu \cdot m_x (1+a), \\ \frac{dm_y}{dt} &= -\gamma H_0 m_x + \gamma M_0 (1+a) h_x - \nu \cdot m_y (1+a), \end{aligned} \tag{7}$$

где параметр $a = \langle \Delta\gamma \Delta M_z \rangle / \gamma M_0$ определяет поправку, обусловленную квантовыми флуктуациями магнитного момента, и $\nu \approx \alpha\gamma H_{res}$ – частота релаксации, соответствующая полю магнитного резонанса H_{res}. Интересно, что квантовые флуктуации привели не только к перенормировке релаксационного члена, как и ожидалось из вышеприведенного качественного рассмотрения, но и повлияли на параметр, задающий влияние переменного магнитного поля. При этом собственная частота спиновой прецессии $\omega_H = \gamma H_0$ не зависит от флуктуаций.

Система (7) легко решается методом комплексных амплитуд, в рамках которого форма линии ЭПР будет определяться поглощенной мощностью $P \sim \mathrm{Im}\{\mathbf{m} \cdot \mathbf{h}^*\}$ [10]. Несложно показать, что

$$\begin{aligned} P &\sim \mathrm{Im}\{\mathbf{m} \cdot \mathbf{h}^*\} = \chi(1+a) h_0^{\,2} \times \\ &\times \frac{2\omega_H \omega \nu (1+a)}{[\omega_H^2 - \omega^2 + \nu^2 (1+a)^2]^2 + 4\omega^2 \nu^2 (1+a)^2}. \end{aligned} \tag{8}$$

Здесь $\chi = M_0/H_0$, $h_0^2 = h_x^2 + h_y^2$ и ω – квадрат амплитуды переменного магнитного поля и его частота соответственно. Если пренебречь сдвигом резонансной частоты, обусловленным релаксацией, то формула (8) приводится к лоренцевскому виду

$$\begin{aligned} P &\sim \mathrm{Im}\{\mathbf{m} \cdot \mathbf{h}^*\} = \frac{1}{2} \chi (1+a) h_0^2 \times \\ &\times \frac{\omega \nu (1+a)}{(\omega_H - \omega)^2 + \nu^2 (1+a)^2}. \end{aligned} \tag{9}$$

2. ФИЗИЧЕСКИЕ СЛЕДСТВИЯ

Рассмотрим некоторые следствия найденного решения. Из формул (8) и (9) видно, что максимальная амплитуда поглощения $P \sim \frac{1}{2} \chi \cdot h_0^2 \frac{\omega}{\nu}$ и не зависит от влияния квантовых флуктуаций, в то время как флуктуационный вклад будет влиять на интегральную интенсивность. С помощью формулы (9) легко показать, что интегральная интенсивность

$$I = \int P d\omega_H \sim \int \mathrm{Im}\{\mathbf{m} \cdot \mathbf{h}^*\} d\omega_H = \frac{\pi}{2} \chi (1+a) h_0^2 \omega \tag{10}$$

увеличивается в $1 + a$ раз и относительное изменение интегральной интенсивности, вызванное квантовыми флуктуациями, будет равно $\Delta I_{QF}/I = a$. Как следует из формулы (5), величина a может быть оценена как $a \sim 2\Delta M_x^2/\mu_B M_0$. Поскольку интегральная интенсивность часто интерпретируется как магнитная восприимчивость или осциллирующая часть намагниченности, то квантовые флуктуации приведут к кажущемуся росту этих параметров, рассчитанных из ЭПР-экспериментов. В результате “кажущаяся” осциллирующая часть намагниченности может оказаться даже больше статической. Именно такое поведение наблюдалось в гексабориде церия CeB_6 при $T \sim 2.5$ K для кристаллографического направления [100], которое характеризуется наиболее сильными спиновыми флуктуациями с амплитудой, увеличивающейся при понижении температуры [11]. Отметим, что указанный эффект не имел до настоящей работы удовлетворительного объяснения.

Из формулы (8) следует, что поле резонанса может быть оценено из условия $\omega_H^2 - \omega^2 + \nu^2 (1+a)^2 \approx 0$, а для ширины линии можно использовать выражение $\nu(1 + a)$. Поскольку в оба выражения входит одна и та же величина $a = \langle \Delta\gamma \Delta M_z \rangle / \gamma M_0$, сдвиг поля резонанса δH_{QF} и вклад в ширину линии ΔH_{QF}, обусловленные квантовыми флуктуациями, будут связаны некоторыми универсальными соотношениями. Действительно, из (8) находим

$$\delta H_{QF} \approx -\frac{\nu^2}{\omega\gamma} a; \quad \Delta H_{QF} \approx \frac{\nu}{\gamma} a. \tag{11}$$

Из (11) вытекают два возможных универсальных соотношения между шириной линии и сдвигом частоты

$$\frac{\Delta H_{QF}}{\delta H_{QF}} \approx -\frac{\omega}{\nu}, \tag{12}$$

$$\frac{\Delta H_{QF}^2}{\delta H_{QF}} \approx -a\omega^2 \gamma, \tag{13}$$

первое из которых не зависит от квантовых флуктуаций, а второе – не зависит от частоты релаксации. Формулу (13) можно использовать для оценки ожидаемой величины квантовых флуктуационных эффектов, характерных для СКЭС в ЭПР-экспериментах. Для этого удобно перейти от сдвига частоты к относительному изменению g-фактора: $\Delta g_{QF}/g \approx a\nu^2/\omega^2$ и рассмотреть ширину линии ЭПР, отнесенную к полю резонанса $\Delta H_{QF}/H_{res} \approx \Delta H_{QF}\gamma/\omega$. Тогда (13) преобразуется к виду

$$\frac{(\Delta H_{QF}/H_{res})^2}{\Delta g_{QF}/g} \approx a \sim \frac{2\Delta M_z^2}{\mu_B M_0}. \qquad (14)$$

С учетом формулы (10) можно найти общую связь между шириной линии, g-фактором и интегральной интенсивностью в исследуемом случае:

$$\frac{(\Delta H_{QF}/H_{res})^2}{\Delta g_{QF}/g} \approx \frac{\Delta I_{QF}}{I}. \qquad (15)$$

Отметим, что из литературы известны некоторые соотношения, связывающие между собой изменение g-фактора и ширину линии ЭПР [12, 13], однако они существенно отличаются от формул (12)–(15), полученных в настоящей работе.

Интересно также рассмотреть случай сильных квантовых флуктуаций, когда $\Delta M_z \sim \mu_B$. Тогда с точностью до численного коэффициента отношения $\frac{(\Delta H_{QF}/H_{res})^2}{\Delta g_{QF}/g}$ и $\frac{\Delta I_{QF}}{I}$ будут порядка $\sim\mu_B/M_0 \sim \sim 1/\langle S_z(H_{res})\rangle$, где $\langle S_z\rangle$ – средняя спиновая поляризация СКЭС в поле магнитного резонанса. Таким образом, для выделения вклада в ЭПР, обусловленного квантовыми флуктуациями, в некоторых случаях может оказаться полезным исследование частотных зависимостей ширины линии, g-фактора и интегральной интенсивности.

ВЫВОДЫ

Предложенное в настоящей работе модифицированное квантовыми флуктуациями магнитного момента уравнение Ландау–Лифшица предсказывает ряд новых эффектов в ЭПР сильно коррелированных электронных систем, в частности, увеличение интегральной интенсивности и появление универсальных соотношений, связывающие вклад в ширину линии, сдвиг поля резонанса и интегральную интенсивность. Ожидается, что величина квантовых поправок будет зависеть от единственного безразмерного параметра $\sim 2\Delta M_z^2/\mu_B M_0$, где ΔM_z и M_0 – амплитуда флуктуаций и среднее значение магнитного момента в расчете на магнитный ион соответственно.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор признателен В.Н. Рыжову за полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Moriya T.* Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism. Berlin: Springer-Verlag, 1985. 239 p.
2. *Oshikawa M., Affleck I.* Low-Temperature Electron Spin Resonance Theory for Half-Integer Spin Antiferromagnetic // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 5136–5139.
3. *Oshikawa M., Affleck I.* Electron spin resonance in $S = 1/2$ antiferromagnetic chains // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 134410 (1–28).
4. *Abrahams E., Wölfle P.* Electron spin resonance in Kondo systems // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 104423 (1–8).
5. *Wölfle P., Abrahams E.* Phenomenology of ESR in heavy-fermion systems: Fermi-liquid and non-Fermi-liquid regimes // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 235112 (1–8).
6. *Demishev S.V.* Electron Spin Resonance in Strongly Correlated Metals // Applied Magnetic Resonance. 2020. V. 53. P. 473–522.
7. *Елютин П.В., Кривченков В.Д.* Квантовая механика (с задачами). Учеб. пособие. М.: Наука, 1976. 336 с.
8. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. В 10 т. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2016. 800 с.
9. *Мессиа А.* Квантовая механика. Т. 1. М.: Наука, 1978. 478 с.
10. *Гуревич А.Г., Мелков Г.А.* Магнитные колебания и волны. М.: Физматлит, 1994. 464 с.
11. *Semeno A.V., Gilmanov M.I., Bogach A.V., Krasnorussky V.N., Samarin A.N., Samarin N.A., Sluchanko N.E., Shitsevalova N.Yu., Filipov V.B., Glushkov V.V., Demishev S.V.* Magnetic resonance anisotropy in CeB_6: an entangled state of the art // Sci. Rep. 2016. V. 6. P. 39196 (1–8).
12. *Demishev S.V., Inagaki Y., Ohta H., Okubo S., Oshima Y., Pronin A.A., Samarin N.A., Semeno A.V., Sluchanko N.E.* Anomalous temperature dependence of the ESR Linewidth in $CuGeO_3$ doped with magnetic impuritiesand the universal relations in the Oshikawa-Affleck theory // Europhys. Lett. 2003. V. 63. P. 446–452.
13. *Семено А.В., Гильманов М.И., Случанко Н.Е., Шицевалова Н.Ю., Филиппов В.Б., Демишев С.В.* Антиферромагнитный резонанс в GdB_6 // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 108. С. 243–258.

ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE AND MODIFIED LANDAU–LIFSHITZ EQUATION IN STRONGLY CORRELATED ELECTRONIC SYSTEMS WITH QUANTUM FLUCTUATIONS OF THE MAGNETIC MOMENT

S. V. Demishev[a,b]

[a] *Prokhorov General Physics Institute of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

[b] *National Research University Higher School of Economics, Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS I.A. Scherbakov

The Landau–Lifshitz equation modified by quantum fluctuations of the magnetic moment is proposed, on the basis of which a number of new effects in electron paramagnetic resonance in strongly correlated electronic systems are predicted, including: an increase in the integral intensity and the appearance of universal relations connecting the contribution to the linewidth, the shift of the resonance field, and integrated intensity. It is expected that the magnitude of the quantum corrections will depend on a single dimensionless parameter ~ $2\Delta M_z^2/\mu_B M_0$, where ΔM_z and M_0 are the amplitude of fluctuations and the average value of the magnetic moment per magnetic ion, respectively.

Keywords: electron paramagnetic resonance, strongly correlated electron systems, quantum fluctuations of the magnetic moment, Heisenberg uncertainty relations, Landau–Lifshitz equation, universal relations between the linewidth, *g*-factor and integrated intensity

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 8–11

ФИЗИКА

УДК 621.315.592

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ РАДИКАЛОВ В ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОКСИДОВ ТИТАНА, МОЛИБДЕНА, ВАНАДИЯ С ПОМОЩЬЮ ЭПР-СПЕКТРОСКОПИИ

© 2021 г. Е. В. Кытина[1], Е. Р. Пархоменко[1], Е. А. Назарова[1], Е. А. Константинова[1,2,*]

Представлено академиком РАН И.А. Щербаковым 12.04.2021 г.
Поступило 14.04.2021 г.
После доработки 14.04.2021 г.
Принято к публикации 22.04.2021 г.

Предложен новый метод построения зонных диаграмм на основе данных ЭПР-спектроскопии, который был применен для исследования легированных азотом нанокристаллических оксидов титана, молибдена, ванадия (TiO_2, MoO_3, V_2O_5) с удельной площадью поверхности порядка 100 м^2/г и средним размером наночастиц 10–15 нм. В TiO_2 обнаружены $N^{\bullet}$-радикалы азота и Ti^{3+}-центры, в MoO_3 зарегистрированы $N^{\bullet}$-, $NO^{\bullet}$-центры и ионы Mo^{5+}, в V_2O_5–V^{4+}-центры. Концентрации дефектов составили 6.5×10^{17} г$^{-1}$, 9.8×10^{16} г$^{-1}$, 2×10^{17} г$^{-1}$ соответственно. С помощью метода ЭПР определено положение уровней энергии радикалов в запрещенной зоне. Уникальные образцы TiO_2, имеющие высокую концентрацию радикалов и скорость фотокатализа, могут быть использованы для создания энергоэффективных фотокаталитических устройств, работающих в видимом диапазоне спектра.

Ключевые слова: нанокристаллические оксиды титана, молибдена, ванадия, спектры ЭПР, радикалы, дефекты, зонная диаграмма, фотокатализаторы

DOI: 10.31857/S2686740021040076

В настоящее время нанокристаллические оксиды металлов активно используются для создания различных устройств, например, фотокаталитических фильтров для очистки воздуха от токсичных примесей, сенсоров для мониторинга состояния окружающей среды, солнечных элементов и т.п. [1–4]. Одним из перспективных направлений является разработка фотокатализаторов, функционирующих в видимом диапазоне спектра и обладающих пролонгированной каталитической активностью [2, 5]. Для этой цели металлооксиды легируют различными элементами – металлами и неметаллами и создают наногетероструктуры типа оксид/оксид [2–7]. Оптоэлектронные свойства полупроводниковых фотокатализаторов с широкой запрещенной зоной определяются структурой энергетических уровней, возникающих в их запрещенной зоне в результате легирования и/или модификации поверхности [4]. Радикалы (парамагнитные дефекты) обеспечивают примесное поглощение, участвуют в фотокаталитических реакциях разложения токсичных примесей на поверхности оксидов металлов. Поэтому целью данной работы являлось изучение природы, определение основных параметров дефектов в нанокристаллических оксидах титана, молибдена, ванадия (TiO_2, MoO_3, V_2O_5) с улучшенными фотокаталитическими свойствами, определение положения уровней энергии дефектов в запрещенной зоне в указанной серии образцов с помощью метода ЭПР, а также сравнительный анализ полученных результатов.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Легированный азотом нанокристаллический TiO_2 в форме водного золя готовили методом контролируемого гидролиза, добавляя по каплям 12.5% NH_4OH к 2.5 M водному раствору $TiCl_4$ + + 0.65 M HCl, охлажденному до нуля градусов Цельсия, при интенсивном перемешивании до достижения pH 5.5. Полученный осадок промывали дистиллированной водой и диспергировали ультразвуковой обработкой. Затем осадок геля помещали в сушильный шкаф в чашке, потом от-

[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия*
**E-mail: liza35@mail.ru*

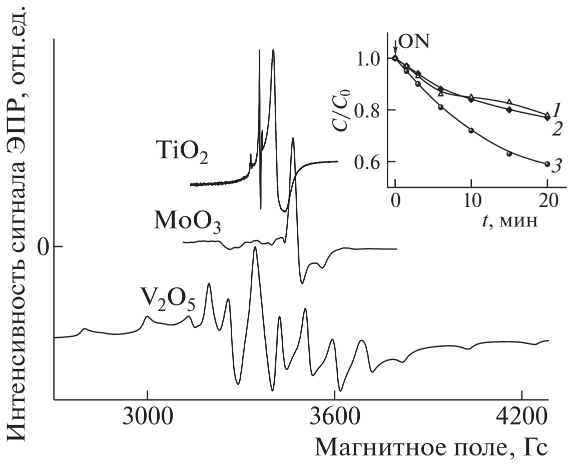


Рис. 1. Спектры ЭПР нанокристаллических оксидов титана, молибдена и ванадия. На вставке показаны кинетики фотокатализа образцов: V_2O_5 (*1*), MoO_3 (*2*), TiO_2 (*3*). Момент включения света отмечен стрелкой ON.

жигали в печи при 400°C в течение часа и растирали. Для получения нанооксидов молибдена и ванадия использовались прекурсоры $(NH_4)_6Mo_7O_{24}$ (парамолибдат аммония) и NH_4VO_3 (метаванадат аммония) соответственно.

Удельную площадь поверхности образцов измеряли по адсорбции азота – методу Брунауэра–Эммета–Теллера (BET) с использованием прибора Chemisorb 2750 (Micromeritics). Размер наночастиц в образцах определяли с помощью дифракции рентгеновских лучей (XRD). Использовался дифрактометр ДРОН-4 (CuK_α-излучение), расчет ОКР производился по формуле Шеррера (приборное уширение 0.09°).

Исследования методом ЭПР были выполнены на ЭПР-спектрометре ELEXSYS-500 фирмы Bruker (Германия) с рабочей частотой 9.5 ГГц – X-диапазон и чувствительностью 5×10^{10} спин/Гс. Образцы помещались в кварцевые ампулы диаметром 4 мм. Освещение образцов осуществлялось непосредственно в резонаторе спектрометра ЭПР светом ртутной лампы высокого давления BRUKER ELEXSYS ER 202 UV (50 Вт). Для выделения видимой области спектра использовались “cut-off” фильтры. Селектирование по длинам волн осуществлялось с помощью монохроматора МДР-204. Температура измерений составляла 77 K. Для определения числа радикалов сигналы ЭПР от исследуемого образца сравнивались со спектрами эталона $CuCl_2{\cdot}2H_2O$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Средние размеры наночастиц в TiO_2, MoO_3, V_2O_5, рассчитанные по уширению линий в дифрактограммах с помощью формулы Шеррера, составили 13, 10, 15 нм соответственно. Согласно данным низкотемпературной адсорбции азота значения удельной площади поверхности в образцах составили: 90 м^2/г (TiO_2), 94 м^2/г (MoO_3), 88 м^2/г (V_2O_5).

Спектры ЭПР нанокристаллических оксидов TiO_2, MoO_3, V_2O_5 представлены на рис. 1. Для выяснения природы детектируемых радикалов было проведено компьютерное моделирование экспериментальных спектров и определены основные параметры дефектов. Установлено, что спектр ЭПР TiO_2 представляет собой суперпозицию примесных дефектов – $N^\bullet$-радикалов ($g_1 = 2.0081$, $g_2 = 2.0042$, $g_3 = 2.0014$, константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ) – $A_1 = 1.5$ Гс, $A_2 = 2.8$ Гс, $A_3 = 32.5$ Гс) и собственных дефектов – Ti^{3+}-центров ($g_1 = 1.9871$, $g_2 = 1.9562$). Общая концентрация дефектов составила 6.5×10^{17} г$^{-1}$. Теоретический анализ спектров ЭПР оксида молибдена показал, что мы имеем суперпозицию линий ЭПР от $N^\bullet$ ($g_1 = 2.0072$, $g_2 = 2.0039$, $g_3 = 2.0026$, $A_1 = 1.6$ Гс, $A_2 = 2.1$ Гс, $A_3 = 22.5$ Гс), $NO^\bullet$ ($g_1 = 2.0001$, $g_2 = 1.9978$, $g_3 = 1.9385$, $A_1 = 0.2$ Гс, $A_2 = 30.5$ Гс, $A_3 = 0.5$ Гс) радикалов и ионов Mo^{5+} в решетке MoO_3 ($g_1 = 1.945$, $g_2 = 1.900$). Вклад в спектр ЭПР нанокристаллического V_2O_5 дают ионы V^{4+} ($g_1 = 1.993$, $g_2 = 1.949$, $A_1 = 53$ Гс, $A_2 = 150$ Гс). Мультиплетная структура спектра обусловлена взаимодействием неспаренного электрона с парамагнитным ядром ванадия (спин 7/2). Концентрации дефектов составили 9.8×10^{16} г$^{-1}$ и 2×10^{17} г$^{-1}$ для MoO_3 и V_2O_5 соответственно.

Для определения положения уровней энергии радикалов в запрещенной зоне исследуемых нанооксидов нами была выполнена регистрация спектров ЭПР при освещении образцов непосредственно в резонаторе спектрометра с использованием монохроматора, т.е. при освещении фотонами с различной энергией. Изменение величины сигнала ЭПР радикалов происходит при достижении определенной величины энергии кванта падающего света (своей для каждого типа радикалов). Это очень важный вывод, означающий, что при освещении исследуемых образцов происходит примесное поглощение света дефектами и их перезарядка. Последнее также подтверждается обратимостью сигнала ЭПР с течением времени после прекращения освещения. Обсудим полученные результаты. Рост величины сигнала ЭПР для азотных радикалов происходит при энергии фотонов $h\nu \geq 1.5$ эВ, т.е., начиная с данной энергии, в результате примесного поглощения электрон переходит с уровня дефекта в зону проводимости TiO_2 (рис. 2). Это позволяет нам оценить положение уровня данного дефекта в за-

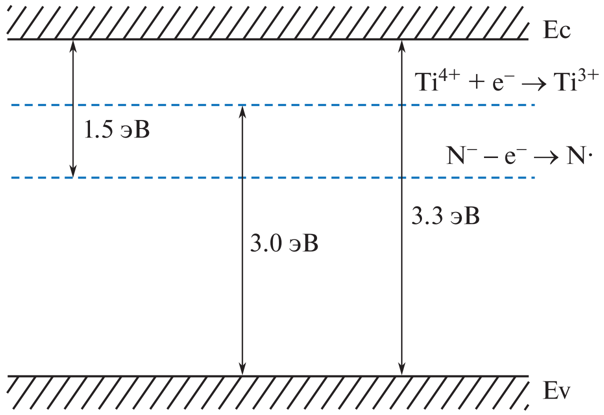


Рис. 2. Зонная диаграмма оксида титана.

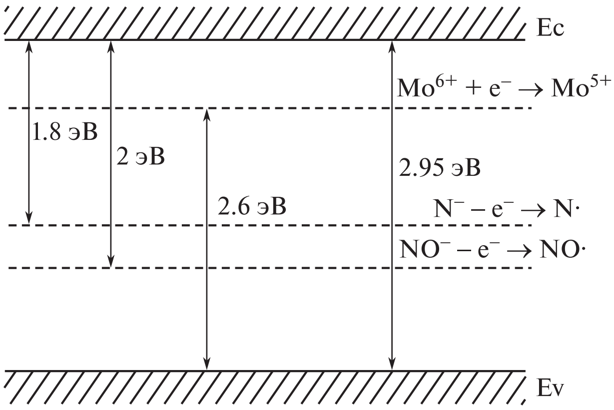


Рис. 3. Зонная диаграмма оксида молибдена.

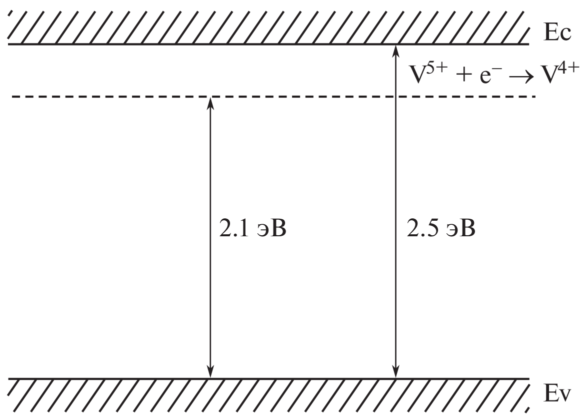


Рис. 4. Зонная диаграмма оксида ванадия.

прещенной зоне TiO_2, как отстоящим от дна зоны проводимости на величину 1.5 эВ. Далее, при освещении с $h\nu \geq 3.0$ эВ, наблюдается рост интенсивности сигнала ЭПР для Ti^{3+}-центров, что можно объяснить переходом электрона из валентной зоны на первоначально непарамагнитные Ti^{4+}/кислородная вакансия центры, которые образуют состояния вблизи дна зоны проводимости TiO_2 (рис. 2) [8]. Таким образом, увеличение интенсивности сигнала ЭПР при изменении энергии фотонов обусловлено перезарядкой азотных центров и ионов титана.

Аналогично, рост интенсивности сигнала ЭПР для центров Mo^{5+} в MoO_3 при освещении с $h\nu \geq 2.6$ эВ можно объяснить переходом электрона из валентной зоны оксида молибдена на первоначально непарамагнитные Mo^{6+}-центры, которые также образуют состояния вблизи дна зоны проводимости MoO_3 (рис. 3). Увеличение интенсивности сигналов ЭПР от $N^{\bullet}$- и $NO^{\bullet}$-радикалов обусловлен перезарядкой указанных центров: $N^- + h\nu \rightarrow N^{\bullet} + e^-$ (в зону проводимости) и $NO^- + h\nu \rightarrow NO^- + e^-$ (в зону проводимости) соответственно. Рост интенсивности сигнала ЭПР для V^{4+}-центров в V_2O_5 при освещении светом с энергией $h\nu \geq 2.1$ эВ, в свою очередь, можно объяснить переходом электронов из валентной зоны V_2O_5 на состояния V^{5+}, не дающие вклад в сигнал ЭПР, локализованные вблизи дна зоны проводимости V_2O_5 (рис. 4).

Поскольку исследуемые образцы представляют собой фотокатализаторы с улучшенными в результате оптимизации параметров синтеза фотокаталитическими свойствами, то на вставке к рис. 1 приведены кинетики фотокатализа для всей серии. Как следует из представленных результатов, наибольшей фотокаталитической активностью среди TiO_2, MoO_3, V_2O_5 обладают образцы TiO_2. Это может быть обусловлено как высокой концентрацией радикалов, создающих уровни в запрещенной зоне (т.е. обеспечивающих эффективное поглощение света в видимом диапазоне) и участвующих в окислительно-восстановительных реакциях на поверхности фотокатализатора, так и более низкой скоростью рекомбинации фотовозбужденных электронов и дырок в TiO_2 по сравнению с другими исследуемыми металлооксидами [4, 9, 10].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе была разработана ЭПР-методика, с помощью которой были идентифицированы радикалы и определены их основные характеристики в наноструктурированных фотокатализаторах TiO_2, MoO_3, V_2O_5, легированных азотом. Установлено, что все образцы характеризуются большой удельной площадью поверхности (порядка 100 м^2/г) и, как следствие, высокими концентрациями радикалов (в диапазоне 10^{17}–7×10^{17} г$^{-1}$). В TiO_2 обнаружены $N^{\bullet}$-радикалы азота и Ti^{3+}-центры, в MoO_3 – зарегистрированы $N^{\bullet}$-, $NO^{\bullet}$-центры и ионы Mo^{5+}, в V_2O_5–V^{4+}-центры. Определено положение энергетических уровней дефектов в запрещенной зоне нанооксидов при освещении их *in situ* фотонами с различной энергией. Изменение величины сигнала ЭПР-радикалов при достижении фиксированной для каждого типа радикалов энергии кванта позволило сделать вывод о том, что при освещении происходит примесное поглощение света дефектами и их перезарядка. Были построены зонные диаграммы всех исследованных образцов. Обнаружена корреляция между фотокаталитической активностью образцов и концентрацией радикалов в них. Полученные результаты могут быть использованы для диагностики фотоиндуцированных реакций радикалов в полупроводниках и построения зонных диаграмм. Кроме того, синтезированные нами материалы представляют интерес для практических применений в качестве фотокатализаторов.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 18-29-23051.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hoffmann M.R., Martin S. T., Choi W., et al.* Environmental Applications of Semiconductor Photocatalysis // Chem. Rev. 1995. V. 95. P. 69–96.
2. *Wu J.C.S., Chen C.H.* A visible-light response vanadium-doped titania nanocatalyst by sol–gel method // J. Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 2004. V. 163. P. 509–515.
3. *Zhao W., Liu S., Zhang S., et al.* Preparation and visible-light photocatalytic activity of N-doped TiO_2 by plasma-assisted sol-gel method // Catalysis Today. 2019. V. 337. P. 37–43.
4. *Chiesa M., Livraghi S., Paganini M.C., et al.* Nitrogen-doped semiconducting oxides. Implications on photochemical, photocatalytic and electronic properties derived from EPR spectroscopy // Chemical Science. 2020. V. 11. P. 6623–6641.
5. *Константинова Е.А., Кушников М.П., Зайцев В.Б. и др.* Наноматериалы на основе диоксида титана с высокой фотокаталитической активностью // Российские нанотехнологии. 2019. Т. 14. № 5–6. С. 8–15.
6. *Tarasov A., Trusov G., Minnekhanov A., et al.* Facile preparation of nitrogen-doped nanostructured titania microspheres by a new method of Thermally Assisted Reactions in Aqueous Sprays // J. Mater. Chem. A. 2014. V. 2. P. 3102–3109.
7. *Tarasov A., Hu Zhi-Yi, Meledina M., et al.* One-Step Microheterogeneous Formation of Rutile@Anatase Core-Shell Nanostructured Microspheres Discovered by Precise Phase Mapping // J. Phys. Chem. C. 2017. V. 121. P. 4443–4450.
8. *Tang H., Lévy F., Berger H., et al.* Urbach tail of anatase TiO_2 // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 7771–7776.
9. *Zaleska-Medynska A.* Metal Oxide-Based Photocatalysis. Elsevier, 2020. 347 p.
10. *Кытина Е.В., Назарова Е.А., Пархоменко Е.Р.* Определение положения уровней энергии радикалов в запрещенной зоне нанокристаллических оксидов титана, молибдена, ванадия с помощью ЭПР-спектроскопии // Сб. тезисов II Всерос. конф. “Квантовые материалы и технологии на нанометровой шкале”. М.: ИОФ РАН, 2020. С. 49–50.

RADICALS ENERGY LEVELS DETERMINATION IN THE BANDGAP OF NANOCRYSTALLINE OXYDES OF TITANIUM, MOLYBDENUM, VANADIUM USING EPR SPECTROSCOPY

E. V. Kytina[a], E. R. Parkhomenko[a], E. A. Nazarova[a], and E. A. Konstantinova[a,b]

[a] *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

[b] *National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS I.A. Scherbakov

Nanocrystalline oxides of titanium, molybdenum, vanadium (TiO_2, MoO_3, V_2O_5) doped with nitrogen with a specific surface area of about 100 m^2/g and an average nanoparticle size of 10–15 nm have been synthesized and studied. $N^\bullet$ nitrogen radicals and Ti^{3+} centers were found in TiO_2, $N^\bullet$, $NO^\bullet$ centers and Mo^{5+} ions were registered in MoO_3, and V^{4+} centers were found in V_2O_5. The defects concentrations were 6.5×10^{17} g^{-1}, 9.8×10^{16} g^{-1}, 2×10^{17} g^{-1}, respectively. The EPR method was used to determine the energy levels positions of radicals in the band gap and to plot the band diagrams of the studied nano-oxides. The obtained results are of interest for the physics of low-dimensional systems, and the unique TiO_2 samples with a high concentration of radicals and photocatalysis rate can be used to create energy-efficient photocatalytic devices operating in the visible spectral range.

Keywords: nanocrystalline oxides of titanium, molybdenum, vanadium, EPR spectra, radicals, defects, zone diagram, photocatalysts

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 12–16

ФИЗИКА

УДК 534.2

ФОНОННЫЕ ТРИАДЫ БОРРОМЕО В МАГНЕТИКЕ

© 2021 г. В. В. Мошкин[1,*], В. Л. Преображенский[2,]**

Представлено академиком РАН О.В. Руденко 28.05.2021 г.
Поступило 28.05.2021 г.
После доработки 28.05.2021 г.
Принято к публикации 03.06.2021 г.

Сообщаются результаты экспериментального наблюдения связанных возбуждений трех попарно не взаимодействующих фононов, два из которых относятся к непрерывному, а третий к дискретному акустическим спектрам. Связь возбуждений регистрируется по генерации обратной акустической волны в поле поперечной электромагнитной накачки в антиферромагнитном кристалле α-Fe_2O_3. Показано, что условием связи прямой и обратной фазосопряженных волн является возбуждение дополнительной акустической моды дискретного спектра подобно резонансу Фешбаха. Механизмом связи является модуляция нелинейного акустического параметра кристалла переменным магнитным полем.

Ключевые слова: трехфононные возбуждения, антиферромагнетик, поперечная накачка, фазосопряженные акустические волны, дискретная мода, резонанс Фешбаха

DOI: 10.31857/S2686740021040088

Связанные состояния трех попарно невзаимодействующих частиц, известные как состояния Ефимова [1], экспериментально реализуются и исследуются в системе ультрахолодных атомов [2]. Топологическим образом подобных состояний являются кольца Борромео, удаление одного из которых из связанной тройки разрывает связь двух других. По этой аналогии трехбозонные связанные состояния также называют и состояниями Борромео [3]. В нелинейных бозонных системах твердого тела (магнонах, фононах, поляритонах, гибридизированных возбуждениях) образование и исследование трехбозонных связанных состояний возможно в нормальных лабораторных условиях. Идея формирования трехбозонных связанных возбуждений в системе гибридизированных фононов и магнонов, предложенная профессором В.И. Ожогиным в 2007 г., была экспериментально реализована в работе [4] на объемной моде акустических колебаний в кристаллическом антиферромагнитном резонаторе α-Fe_2O_3. Выбор объекта исследования был обусловлен гигантской акустической нелинейностью антиферромагнетиков, управляемой внешним магнитным полем [5]. Теоретический анализ [4, 6] показал возможность возникновения взрывной неустойчивости трехфононных связанных возбуждений, которая в последующем наблюдалась экспериментально на кристаллических резонаторах α-Fe_2O_3 и $FeBO_3$ [7, 8]. Тем не менее, продемонстрировать принадлежность исследуемых возбуждений к типу состояний Борромео в указанных экспериментах не представлялось возможным.

В настоящей работе сообщается о прямом наблюдении состояний Борромео при взаимодействии акустической моды дискретного спектра с парой встречных фононов непрерывного спектра. Выбранная схема эксперимента позволяет разделить взаимодействующие возбуждения по частоте и направлению распространения, что дает возможность селективно исключать из взаимодействия отдельные компоненты. Эффекты взаимодействия возбуждений непрерывного и дискретного спектров, известные как резонансы Фано–Фешбаха [9, 10], являются эффективным инструментом исследования в разнообразных областях физики от сверххолодных атомов до фотоники и акустики микроструктур [11–14]. В работе [15] теоретически исследована возможность использования параметрического резонанса Фешбаха для возбуждения фононных триад в магнетике в поле электромагнитной накачки. В соответствии с теоретической моделью, трехфононные связанные возбуждения возникают при выполнении условия синхронизма

$$\omega_p = \omega_k + \omega_{-k} + \Omega,$$

[1] *Российский технологический университет МИРЭА, Москва, Россия*
[2] *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия*
**E-mail: mvv56@inbox.ru*
***E-mail: preobr@newmail.ru*

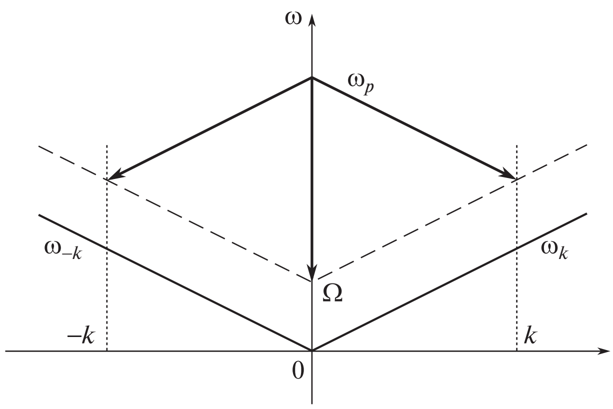


Рис. 1. Диаграмма трехфононного параметрического резонанса Фешбаха: $\omega_p = \omega_k + \omega_{-k} + \Omega$ [15].

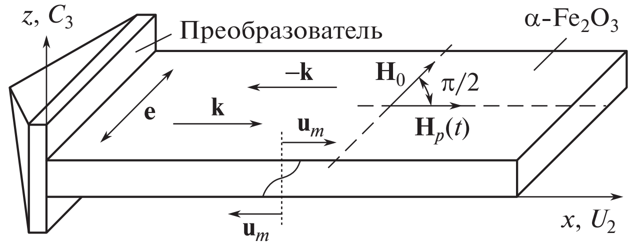


Рис. 2. Схема эксперимента. $\mathbf{u}_m$ – вектор смещения в толщинно-сдвиговой моде упругих колебаний, $\mathbf{e}$ – вектор поляризации фазосопряженных акустических волн с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$, $H_0 = 1.3$ кЭ.

где ω_p – частота переменного поля накачки, Ω – частота дискретной моды упругих колебаний, ω_k и ω_{-k} – частоты встречных фазосопряженных бегущих акустических волн. Условие синхронизма иллюстрируется диаграммой, представленной на рис. 1 [15].

В работе для экспериментальной реализации состояния Борромео в условиях резонанса Фешбаха использовалась пластина антиферромагнетика α-Fe_2O_3 с размерами 34 × 9.3 × 1.4 мм, вырезанная в базисной плоскости, перпендикулярной тригональной кристаллографической оси $C_3 \| \mathbf{z}$. На рис. 2 приведена схема эксперимента. Переменное магнитное поле с частотой $\omega_p/2\pi = 44$ МГц прикладывалось параллельно бинарной оси $U_2 \| \mathbf{x}$ нормально к намагничивающему полю $\mathbf{H}_0 \| \mathbf{y}$ (геометрия поперечной накачки).

Дискретная мода колебаний сдвига по толщине возбуждалась поперечным импульсным переменным полем с частотой $\Omega/2\pi = 1.230$ МГц с помощью катушки индуктивности. Длительность импульса выбиралась достаточной для достижения установившихся колебаний. Амплитуда колебаний моды контролировалась по сигналу U_m, наводимому в катушке колебаниями намагниченности, вызванными переменной деформацией кристалла. Пьезоэлектрический преобразователь возбуждал в кристалле импульсную сдвиговую бегущую волну с поляризацией $\mathbf{e} \| \mathbf{y}$ в плоскости пластины, распространяющуюся вдоль бинарной оси. Для выполнения резонансного условия (рис. 1) частота волны выбиралась равной полуразности частот накачки и дискретной моды: $\omega_k/2\pi = 21.385$ МГц. Длительность излучаемого акустического импульса составляла 5 мкс. Тем же преобразователем регистрировалась генерируемая в процессе параметрического взаимодействия обратная волна, спектр которой обрабатывался численно. К моменту включения импульса электрического напряжения на преобразователе, импульс возбуждения дискретной моды выключался и колебания переходили в режим свободной релаксации. Время релаксации значительно превосходило время регистрации трехфононного взаимодействия. Через 5 мкс после начала возбуждения акустического импульса включался импульс электромагнитной накачки длительностью 6 мкс, амплитуда которого устанавливалась по напряжению U_p на контрольном выходе высокочастотного усилителя.

На рис. 3 приведены данные регистрации спектров обратной волны, принятой преобразователем при возбуждении и в отсутствие колебаний дискретной моды.

В отсутствие возбуждения дискретной моды или прямой акустической волны сигнал обратной волны отсутствовал.

На рис. 4 приведены характерные спектры обратной волны для двух значений амплитуды импульса накачки. Зависимости сигнала обратной волны от амплитуд накачки и дискретной моды колебаний приведены на рис. 5а, 5б.

На зависимости рис. 5б видна тенденция к насыщению сигнала обратной волны с ростом амплитуды дискретной моды, что обусловлено ограниченностью угла поворота переменной намагниченности в поле резонансных деформаций, превышающих деформации спонтанной стрикции. В то же время с ростом амплитуды накачки сигнал обратной волны монотонно и нелинейно нарастает.

Обсуждение полученных результатов проведем в сопоставлении с теоретической моделью работы [15]. В основе механизма наблюдаемого взаимодействия лежит модуляция нелинейного модуля упругости $C_{566}(\mathbf{H})$ переменным магнитным полем накачки $h_p(t)$. Энергия рассматриваемых акустических возбуждений в схеме рис. 2 имеет вид

$$\mathcal{H} = \int d\mathbf{r}\left(\frac{1}{2}\rho\mathbf{v}^2 + 2C_{44}u_{xz}^2 + 2C_{66}u_{xy}^2 + \Psi_p h_p(t) u_{xz} u_{xy}^2\right), \quad (1)$$

где $\mathbf{v}$ – скорость упругого смещения, u_{ij} – тензор переменных деформаций, ρ – плотность кристалла, C_{ij} – линейные модули упругости, Ψ_p – ампли-

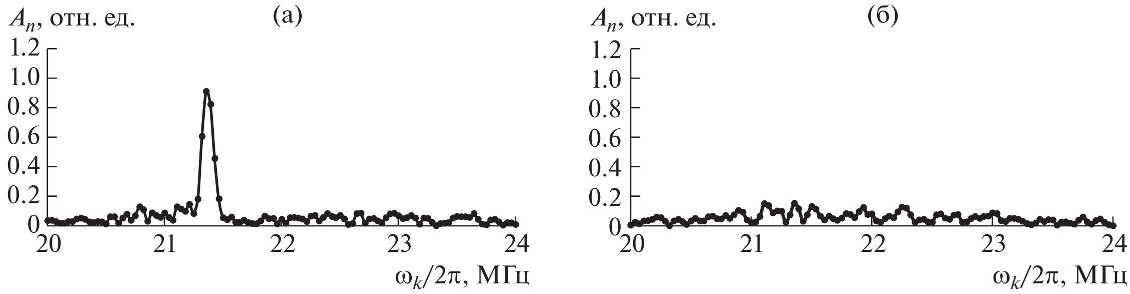


Рис. 3. Спектры обратной волны при возбуждении (а) и в отсутствие (б) колебаний толщинно-сдвиговой моды, амплитуда накачки $U_p = 1.43$ В.

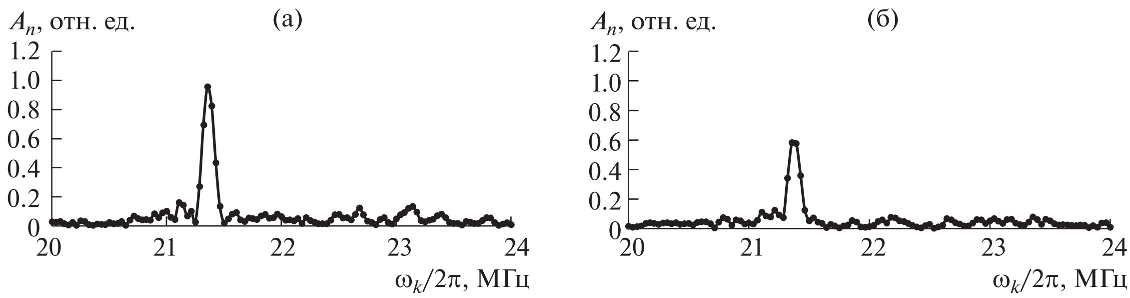


Рис. 4. Спектры обратной волны при максимальной амплитуде колебаний толщинно-сдвиговой моды и двух уровнях электромагнитной накачки: (а) $U_p = 1.53$ В, (б) $U_p = 1.0$ В.

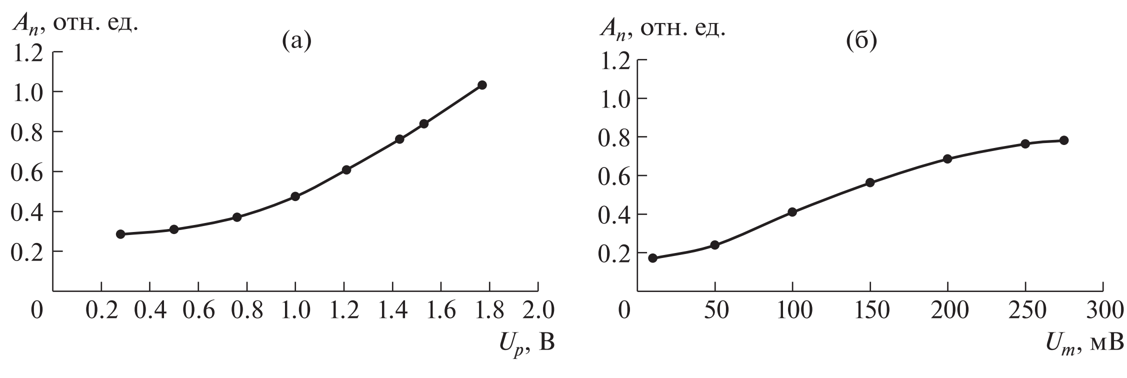


Рис. 5. Зависимость амплитуды сигнала обратной волны от амплитуды накачки U_p при $U_m = 275$ мВ (а) и напряжения U_m, индуцированного колебаниями контурно-сдвиговой моды при U_p =1.44 В (б).

туда нелинейного параметрического взаимодействия:

$$\Psi_p = \frac{\partial}{\partial H_x} C_{566}(\mathbf{H}). \tag{2}$$

Зависимость амплитуды взаимодействия от напряженности намагничивающего поля приведена в [15].

Следуя подходу, развитому в работе [15], представим упругое смещение и скорость деформации в канонических переменных для непрерывных α_k и дискретной β мод с частотами ω_k и Ω соответственно:

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} \cdot \eta(\beta + \beta^*) \cos\left(\frac{\pi}{l} z\right) + \mathbf{y} \sum_k \xi_k (\alpha_k e^{-ikx} + \alpha_k^* e^{ikx}), \tag{3}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{x} \cdot i\Omega\eta(\beta - \beta^*) \cos\left(\frac{\pi}{l} z\right) + $$
$$+ \mathbf{y} \sum_k \xi_k i\omega_k (\alpha_k e^{-ikx} - \alpha_k^* e^{ikx}),$$

где l – толщина пластины,

$$\eta = \sqrt{1/\rho\Omega V}, \quad \xi_k = \sqrt{1/2\rho\omega_k V}.$$

В указанных переменных энергия системы (1) преобразуется к виду

$$\mathcal{H} = \Omega\beta^*\beta + \sum_k \omega_k \alpha_k^* \alpha_k + \mathcal{H}_{\text{int}}, \tag{4}$$

где

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -\frac{\eta}{l} \sum_k \omega_k \frac{\Psi_p}{C_{66}} [h_0 e^{i\omega_p t} \beta^* \alpha_k^* \alpha_{-k}^* + c.c.]. \tag{5}$$

Гамильтониан взаимодействия (5) описывает процесс одновременного рождения трех связанных фононов, один из которых относится к дискретному, а два других к непрерывному спектру. Переменные α_k и β подчинены каноническим уравнениям движения:

$$\dot\beta = i\Omega\beta + i\frac{\partial}{\partial\beta^*}\mathcal{H}_{\text{int}}, \quad \dot\alpha_k = i\omega_k\alpha_k + i\frac{\partial}{\partial\alpha_k^*}\mathcal{H}_{\text{int}}. \tag{6}$$

Соответствующая система уравнений для амплитуд возбуждений $a_k = \alpha_k e^{-i\omega_k t}$, $a_{-k} = \alpha_{-k} e^{-i\omega_k t}$, $b = (\eta/l)\beta e^{-i\Omega t}$ приводится к виду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_k}{\partial t} &= -i\Phi_k h_0 b^* a_{-k}^* e^{i\Delta\omega_p t}, \\ \frac{\partial a_{-k}}{\partial t} &= -i\Phi_k h_0 b^* a_k^* e^{i\Delta\omega_p t}, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= -i\sum_k \frac{1}{2}\Phi_k h_0 a_k^* a_{-k}^* e^{i\Delta\omega_p t}, \end{aligned} \tag{7}$$

где $\Phi_k = 2\omega_k\Psi_p/C_{66}$ – параметр трехфононного взаимодействия, $\Delta\omega_p = \omega_p - 2\omega_k - \Omega$ – расстройка частоты накачки относительно частоты резонанса Фешбаха. Связь возбуждений наиболее эффективна в условиях резонанса $\Delta\omega_p = 0$.

Система уравнений (7) описывает динамические возбуждения типа состояний Борромео. Отсутствие одного из трех возбуждений приводит к разрыву связи двух других. Прямое экспериментальное подтверждение этого свойства у наблюдаемых параметрически связанных фононных триад иллюстрируется спектрограммами сигнала обратной волны, приведенными на рис. 3а, б.

Другой особенностью рассматриваемых возбуждений является их взрывная неустойчивость при достаточно высоких уровнях накачки [14]. Для относительно малых амплитуд волны на входе кристалла неустойчивость начинает развиваться при условии $|\Phi_k h_0 \beta_0| kL/\omega_k > \pi/2$, где L – длина активной зоны действия накачки. Формально аналогичным неравенством определяется порог неустойчивости при двухфононном процессе параметрического обращения волнового фронта. Существенное отличие состоит в том, что в данном случае пороговое условие зависит не только от амплитуды поля накачки, но и от начальной амплитуды β_0 дискретной моды. Отметим, что нелинейный рост амплитуды сигнала обратной волны с ростом амплитуды накачки на экспериментальной кривой рис. 4б указывает на близость экспериментальных условий возбуждения к порогу трехфононной неустойчивости. Динамика системы при более высоких уровнях накачки на временах достаточно больших для развития неустойчивости требует специального экспериментального исследования.

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-52-16001).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Efimov V.* // Sov. J. Nucl. Phys. 1971. V. 12. P. 589.
2. *Kraemer T., Mark M., Waldburger P., Danzl J.G., Chin C., Engeser B., Lange A.D., Pilch K., Jaakkola A., Nägerl H.-C., Grimm R.* // Nature 440. 2006. P. 315–318. https://doi.org/10.1038/nature04626
3. *Faoro R., Pelle B., Zuliani A., Cheinet P., Arimondo E., Pillet P.* // Nature Comm. 2015. V. 6. P. 8173. https://doi.org/10.1038/ncomms9173
4. *Преображенский В.Л., Руденко В.В., Перно Ф., Ожогин В.И.* // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 86. № 5. С. 401–404.
5. *Ожогин В.И., Преображенский В.Л.* // Успехи физ. наук. 1988. Т. 155. № 8. С. 593–621.; J. Magn. Magn. Mater. 100 (1-3), 544–571 (1991). https://doi.org/10.1016/0304-8853(91)90840-7
6. *Preobrazhensky V., Bou Matar O., Pernod P.* // Phys. Rev. E. 2008. V. 78. 046603 , https://doi.org/10.1103/PhysRevE.78.046603]
7. *Yevstafiev O., Preobrazhensky V., Pernod P., Berzhansky V.* // J. Magn. and Magn. Mat. 2011. V. 323. P. 1568–1573. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.01.020
8. *Yevstafiev O., Preobrazhensky V., Pernod P., Berzhansky V.* // J. Magn. and Magn. Mat. 2010. V. 322. № 6. P. 585–588. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2009.09.067
9. *Fano U.* // Phys. Rev . 1961. V. 124. № 6. P. 1866–1878. https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.1
10. *Feshbach H.* //Ann. Phys. 1958. V. 5. № 4. P. 357–390. https://doi.org/10.1016/0003-4916(58)90007-1
11. *Limonov M.F., Rybin M.V., Poddubny A.N., Kivshar Yu.S.* // Nat.Photonics. 2017. V. 11. P. 543–554. https://doi.org/10.1038/nphoton.2017.142
12. *Chin C., Grimm R., Julienne P., and Tiesinga E.* // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82. № 2. P. 1225–1286. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1225
13. *Luk'yanchuk B., Zheludev N.I., Maier S.A., Halas N.J., Nordlander P., Giessen H., Chong Tow Chong* // Nature Materials. 2010. V. 9. P. 707–715. https://doi.org/10.1038/nmat2810
14. *Goffaux C., Snchez-Dehesa J., Levy Yeyati A., Lambin Ph., Khelif A., Vasseur J.O., Djafari-Rouhani B.* // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. № 22. 225502. https://doi.org/10.1103/ PhysRevLett.88.225502
15. *Preobrazhensky V.L., Aleshin V.V., Pernod P.* // Wave Motion. 2018. V. 81. P. 15–24. https://doi.org/10.1016/j.wavemoti.2018.05.002

BORROMEAN TRIADS OF PHONONS IN MAGNET

V. V. Moshkin[a], V. L. Preobrazhensky[b]

[a] *Russian Technological University MIREA, Moscow, Russian Federation*

[b] *Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS O.V. Rudenko

It is shown that the condition for the coupling of the forward and reversed phase conjugate waves is excitation of an additional acoustic mode of the discrete spectrum, similarly to the Feshbach resonance. The mechanism of the coupling is modulation of nonlinear acoustic parameter of the crystal by alternating magnetic field.

Keywords: three-phonon excitations, antiferromagnet, transversal pumping, phase conjugate acoustic waves, discrete mode, Feshbach resonance

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 17–21

ФИЗИКА

УДК 539.23; 539.25; 620.92

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИ НЕТИПИЧНОГО ПЕНТАГОНАЛЬНОГО НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО ПОКРЫТИЯ НА ЛИМИТИРУЮЩУЮ СТАДИЮ ПРОЦЕССА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ТРАНСПОРТА ВОДОРОДА ЧЕРЕЗ Pd–Cu МЕМБРАНЫ

© 2021 г. И. С. Петриев[1,2,*], П. Д. Пушанкина[1], И. С. Луценко[1], М. Г. Барышев[1,2]

Представлено академиком РАН А.Б. Лисицыным 07.04.2021 г.
Поступило 12.04.2021 г.
После доработки 18.06.2021 г.
Принято к публикации 23.06.2021 г.

Продемонстрирован новый подход к ускорению поверхностных процессов транспорта водорода через Pd–40%Cu мембраны, путем нанесения развитого каталитического покрытия, состоящего из наночастиц с совершенно новой кристаллографически нетипичной пентагональной структурой. Благодаря наличию у таких частиц высокоиндексных граней с большим количеством реакционноспособных недокоординированных атомов значительно увеличивается количество локализованных потенциально более активных областей поверхности мембраны. Такая модификация приводит к сдвигу лимитирующей стадии, существенно ускоряя рекомбинативную десорбцию на поверхности, и увеличению влияния стадии диффузии. Это улучшает газотранспортные характеристики мембраны, позволяя достичь проницаемости до 8.9 ммоль с$^{-1}$ м$^{-2}$ в низкотемпературном режиме (до 100°C). Полученное значение превышает до 6 раз соответствующее значение для гладких мембран и до 2 раз для мембран, модифицированных классической палладиевой чернью.

Ключевые слова: палладийсодержащие мембраны, композитные пленки, наноструктурированная поверхность, пентагонально структурированные частицы, водородопроницаемость, поверхностные эффекты

DOI: 10.31857/S268674002104012X

Стремительное развитие водородной энергетики приводит к увеличению спроса на водород высокой степени чистоты. Одним из наиболее востребованных методов для современной промышленности представляется метод мембранного выделения водорода посредством цельнометаллических палладийсодержащих мембран, обладающих рядом преимуществ относительно других существующих аналогов [1–3]. Но в то же время стабильное массовое производство высокоэффективных устройств диффузионной очистки водорода до сих пор не реализовано, поскольку мембраны на основе палладия обладают некоторыми недостатками, например, высокой стоимостью и склонностью к охрупчиванию при термоциклировании в атмосфере водорода [4]. Одним из перспективных решений устранения указанных недостатков является легирование палладия медью, что позволит устранить фазовый переход и преимущественно избавиться от водородного охрупчивания. Также это позволит снизить расход благородного металла, а следовательно, стоимость мембран. Помимо этого, важно отметить, что наименее разработанной остается область низкотемпературных мембранных устройств, способных работать при температурах ниже 200°C. Основной проблемой таких мембран является кинетическое торможение достижения равновесия, вызванное затруднением перехода молекулярного водорода через металлическую поверхность [5].

Поскольку перенос водорода через палладийсодержащую мембрану – процесс многостадийный, то и скорость транспорта определяется кинетикой наиболее медленной стадии. Выделяют два основных лимитирующих режима: поверхностный (проницаемость пропорциональна давлению, $n = 1$) и объемный – диффузия ($n = 0.5$). Выбор стадии ограничения определяется рядом параметров и условий эксперимента: температурой, давлением, толщиной металлической фольги, состоянием поверхности и другими. Так, при использовании достаточно толстых мембран в высокотемпературном режиме работы процесс становится диффузионно-ограниченным и полностью подчиняется закону Сивертса [6–8]. В про-

[1] *Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия*
[2] *Южный научный центр Российской академии наук, Ростов-на-Дону, Россия*
*****E-mail: petriev_iliya@mail.ru*

тивном случае, когда наблюдается отклонение от привычного закона, можно судить о поверхностном лимитировании переноса водорода [9–11]:

$$J = \frac{\sigma k_l}{2} p, \quad (1)$$

где σ – коэффициент шероховатости поверхности, определяемый как отношение реальной площади к геометрической площади поверхности, а k_l – феноменологическая постоянная, известная как постоянная адсорбции.

Частично преодолеть поверхностное ограничение и увеличить проницаемость мембран можно путем их поверхностной активации. Одним из таких способов является модифицирование поверхности наноструктурированным высокодисперсным функциональным слоем палладия, способным хемосорбировать водород [12–14]. Нанесение такого покрытия позволит увеличить количество активных центров и повысить коэффициент шероховатости, что должно значительно ускорить протекание диссоциативно-ассоциативных процессов на поверхности мембраны.

При синтезе подобных функциональных покрытий весьма важным является контроль размера и формы частиц, расположение атомов на поверхности, поскольку перечисленные особенности могут влиять на физико-химические свойства получаемых структур. Так, включение граней с высоким индексом в морфологию поверхности палладийсодержащих наноматериалов повышает их селективность и активность по отношению к реакциям с участием водорода [15]. Такой эффект обусловливается наличием активных поверхностей с большим количеством реакционноспособных недокоординированных атомов, выступающих в роли активных центров [16].

Поэтому основной целью настоящего исследования стала интенсификация процесса низкотемпературного транспорта водорода путем нанесения кристаллографически нетипичного пентагонально структурированного покрытия на поверхность тонкой Pd–40%Cu-пленки, исследование его влияния на лимитирующую стадию, а также сравнение полученных результатов с результатами для немодифицированных мембран и модифицированных классической чернью. Достижение данной цели сделает возможным создание мембран, работоспособных при достаточно низких температурах, вплоть до 25°C. Такие мембраны смогут стать основой для создания устройств, применяемых в процессах диффузионной очистки водорода, электролитического разделения изотопов водорода [17] и др.

Синтез наноструктурированного высокодисперсного покрытия на поверхности Pd–40%Cu-фольги толщиной 30 мкм осуществляли двумя методами:

1. Метод “наночастицы”, или классический метод нанесения палладиевой черни. Перед процессом осаждения производилась подготовка экспериментальных образцов цельнометаллической палладий-медной фольги путем промывания и обезжиривания. Для осуществления процесса синтеза подготовленные пленки закрепляли в электролитической ячейке на инертном держателе. Далее производили анодную в 0.1 М HCl и катодную в 0.05 М H_2SO_4 поляризацию при заданной на потенциостат-гальваностате P-40X плотности тока 10–20 мА/см^2. После чего выполнялось непосредственно осаждение мелкодисперсного покрытия при плотности тока 5–6 мА/см^2 в рабочем растворе H_2PdCl_4 (2%). По окончании осаждения пленка промывалась бидистиллятом. Модифицирование экспериментальных образцов выполнялось с обеих сторон.

2. За основу метода синтеза нового пентагонально структурированного покрытия был взят предыдущий метод, который обладал рядом важных отличий. Наряду с хлоридом палладия в рабочий раствор был добавлен ПАВ тетрабутиламмоний бромид 0.01М и нитрат серебра 0.005М. Скорость осаждения была снижена до 3–4 мА/см^2. После стадии электролитического осаждения образец выдерживался в течение 2–8 ч в рабочем растворе для перекристаллизации.

Электронная микроскопия осуществлялась на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-7500F в режиме вторичных электронов.

Исследования кинетических характеристик транспорта водорода полученных образцов Pd–40%Cu–мембран производили на установке водородопроницаемости по методике, описанной в работе [18].

Микрофотографии поверхности палладий-медных пленок, модифицированных шарообразными частицами по методу классической палладиевой черни и пентагонально структурированными частицами, представлены на рис. 1. К размерному ряду 150–200 нм относились 65% частиц, синтезированных первым методом. К размерному ряду 300–500 нм относились 70% наночастиц, синтезированных вторым методом.

Как видно на рис. 1в, 1г, впервые синтезированные на поверхности палладий-медной пленки кристаллиты обладали пентагональной структурой с высокоиндексными гранями. Достижение подобной морфологии возможно только при сочетании избирательной пассивации поверхности и контроля кинетики реакции. В настоящей работе такое влияние оказало определенное соотношение галогенид-ионов в составе рабочего раствора, где хлорид отвечал за окислительное травление частиц, а бромид стимулировал рост определенных граней.

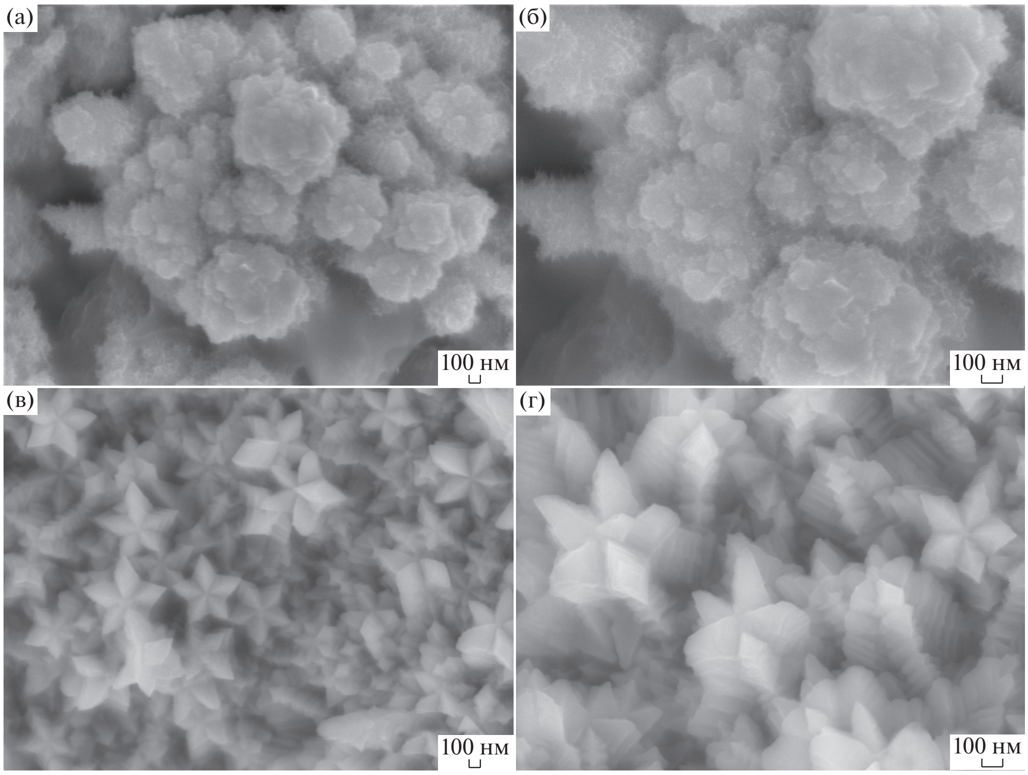


Рис. 1. Микрофотографии поверхности Pd–40%Cu-пленок, модифицированных методом “наночастицы” (а, б) и пентагонально структурированным покрытием (в, г).

Состав поверхностного модифицирующего слоя, оцененный с помощью энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии, демонстрирует 99.99% содержания палладия.

Полученные микрофотографии были проанализированы и обсчитаны в модульной программе Gwyddion (табл. 1). На основании полученных расчетов, у мембраны, модифицированной классической палладиевой чернью, площадь активной поверхности увеличилась в 7 раз относительно не модифицированной фольги, а коэффициент шероховатости составил 11.4. У Pd–40%Cu-мембраны, модифицированной пентагонально структурированным слоем, площадь активной поверхности увеличилась в 10 раз по сравнению с немодифицированной пленкой, коэффициент шероховатости составил 16.1.

Согласно данным, приведенным на рис. 2 и 3, модифицированные мембраны продемонстрировали многократное увеличение до 6 раз плотности потока водорода при давлении 0.3 МПа, по сравнению с гладкими Pd–40%Cu-мембранами. Вероятно, наблюдаемый в ходе эксперимента рост проницаемости обусловливается положительным

Таблица 1. Статистические данные параметров морфологии поверхности пленок, модифицированных двумя различными методами

	Тип модифицирующего покрытия	
	Палладиевая чернь (наночастицы)	Пентагонально структурированное
Среднеквадратичная шероховатость, нм	289.83	388.55
Средняя шероховатость, нм	236.85	328.15
Коэффициент шероховатости	11.4	16.11
Проецируемая площадь поверхности, мкм^2	12	12
Реальная площадь поверхности, мкм^2	136.8	193.33

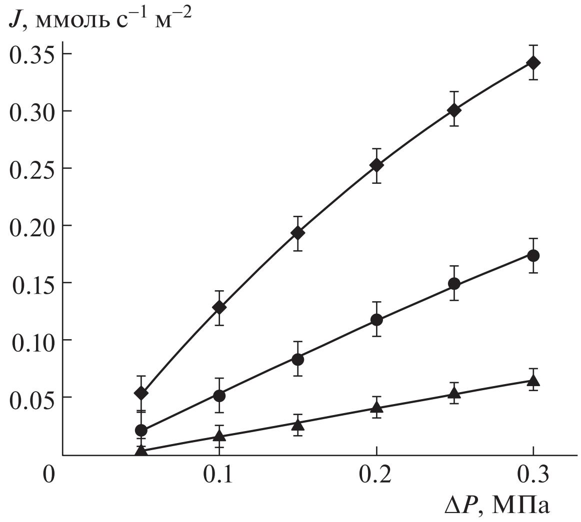


Рис. 2. Зависимость плотности потока от избыточного давления водорода при 25°C на входной стороне Pd–40%Cu-мембраны, модифицированной пентагонально структурированным покрытием (◆), палладиевой чернью (●) и гладкой мембраны (▲).

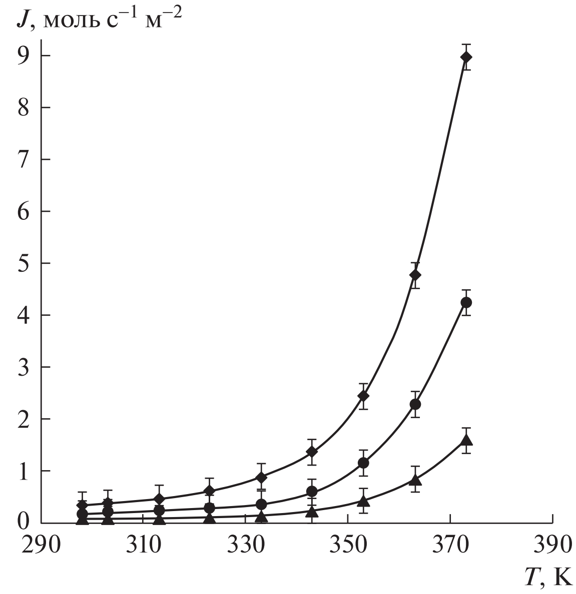


Рис. 3. Температурная зависимость плотности потока водорода при $\Delta p = 0.3$ МПа через Pd–40%Cu-мембрану, модифицированную пентагонально структурированным покрытием (◆), палладиевой чернью (●) и гладкую мембрану (▲).

эффектом от созданных покрытий. Такой результат может достигаться только при условии лимитирования транспорта водорода поверхностными стадиями (рекомбинативной десорбцией), поскольку модификация поверхности, вероятнее всего, не может влиять на процесс диффузии в объеме металлической фольги. Нанесение функционального слоя позволяет контролировать поверхностные эффекты, вследствие чего становится возможным достигнуть достаточно высоких и стабильных показателей водородопроницаемости вплоть до 8.9 ммоль с$^{-1}$ м$^{-2}$ в столь низком температурном диапазоне (25–100°C). О частичном снятии поверхностных ограничений может свидетельствовать нелинейный характер полученных кривых плотности потока для обеих модифицированных мембран (значение показателя степени $n < 1$). Можно заметить уменьшение показателя степени n, стремящегося к 0.5, у мембран с кристаллографически нетипичным пентагональным покрытием. Это позволяет говорить о переходе от полного лимитирования поверхностными стадиями к сочетанию поверхностных процессов и диффузии в объеме и вероятном сдвиге поверхностно-ограниченного режима в диапазон еще более низких температур.

Также важно обратить внимание на разницу в плотности проникающих потоков для мембран, модифицированных двумя разными типами покрытий. Мембраны с пентагонально структурированным покрытием продемонстрировали плотность потока водорода до 2 раз выше, чем мембраны, модифицированные методом “наночастицы”. Достижение подобного результата может объясняться свойствами и структурой разработанного пентагонально структурированного модификатора. В результате нанесения такого модифицирующего слоя увеличивается количество локализованных активных областей на поверхности мембраны. Вероятно, это становится возможным благодаря созданию высокоиндексных граней с большим количеством недокоординированных атомов, реакционноспособных по отношению к водороду.

В результате исследования нами был продемонстрирован новый подход к решению задачи создания цельнометаллических мембран, способных демонстрировать достаточно высокий и при этом стабильный проникающий поток в низкотемпературном диапазоне (<100°C). Этот подход заключается в ускорении лимитирующих поверхностных стадий транспорта водорода путем создания на поверхности палладийсодержащей пленки развитого каталитического покрытия с совершенно новой нетипичной пентагональной структурой поверхности.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Кубанского государственного университета № FZEN-2020-0022, гранта РФФИ и Краснодарского края № 20-42-235001 и Кубанского научного фонда в рамках гранта № НИП-20.1/13.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Филиппов С.П., Ярославцев А.Б.* Водородная энергетика: перспективы развития и материалы // Успехи химии. 2021. Т. 90. № 6. С. 627–643. https://doi.org/10.1070/RCR5014
2. *Sato K., Miyakawa M., Nishioka M.* Rapid control of hydrogen permeation in Pd membrane reactor by magnetic-field-induced heating under microwave irradiation // Int. J. Hydrogen Energy. 2021. V. 46. № 38. P. 20213–20221. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.02.147
3. *Lytkina A.A., Orekhova N.V., Ermilova M.M., et al.* Ru-Rh based catalysts for hydrogen production via methanol steam reforming in conventional and membrane reactors // Int. J. Hydrogen Energy. 2019. V. 44. № 26. P. 13310–13322. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.03.205
4. *Petriev I.S., Bolotin S.N., Frolov V.Y., et al.* Monte Carlo Simulation of Hydrogen Absorption in Palladium and Palladium-Silver Alloy // Russ. Phys. J. 2019. V. 61. № 13. P. 1894–1898. https://doi.org/10.1007/s11182-019-01615-0
5. *Fromm E., Gebhardt E.* Gases and Kohlenstof in Metallen. Heidelberg: Springer-Verlag, 1976. 748 p.
6. *Tosto E., Martinez-Diaz D., Sanz R., et al.* Systematic experimental assessment of concentration polarization and inhibition in Pd-based membranes for hydrogen purification // Fuel Process. Technol. 2021. V. 213. № 106661. https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2020.106661
7. *Iulianelli A., Ghasemzadeh K., Marelli M., et al.* A supported Pd-Cu/Al2O3 membrane from solvated metal atoms for hydrogen separation/purification // Fuel Process. Technol. 2019. V. 195. № 106141. https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2019.106141
8. *Zhao C., Caravella A., Xu H., Brunetti A., et al.* Support mass transfer resistance of Pd/ceramic composite membranes in the presence of sweep gas // J. Membr. Sci. 2018. V. 550. P. 365–376. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2017.12.082
9. *Peters T.A., Carvalho P.A., van Wees J.F., et al.* Leakage evolution and atomic-scale changes in Pd-based membranes induced by long-term hydrogen permeation // J. Membr. Sci. 2018. V. 563. № 1. P. 398–404. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2018.06.008
10. *Байчток Ю.К., Соколинский Ю.А., Айзенбуд М.Б.* // Журнал физической химии. 1976. Т. 50. № 6. С. 1543–1546.
11. *Serra E., Kemali M., Perujo A. et al.* // Metall and Mat Trans A. 1998. V. 29. P. 1023–1028.
12. *Vielstich W.* Brennstoffelemente - Fuel Cells. Weinheim: Verlag Chemie, 1965. 388 p.
13. *Petriev I., Pushankina P., Lutsenko I., et al.* Synthesis, Electrocatalytic and Gas Transport Characteristics of Pentagonally Structured Star-Shaped Nanocrystallites of Pd-Ag // Nanomaterials. 2020. V. 10 (2081). P. 1–19. https://doi.org/10.3390/nano10102081
14. *Petriev I.S., Bolotin S.N., Frolov V.Y., et al.* Synthesis and Gas-Transport Parameters of Membranes Modified by Star-Shaped Palladium Nanocrystallites // Doklady Physics. 2019. V. 64. № 5. P. 210–213. https://doi.org/10.1134/S1028335819050057
15. *Somorjai G.A., Frei H., Park J.Y.* // J. Am. Chem. Soc. 2009. V. 131. № 46. P. 16589–16605.
16. *Zhou Z.-Y., Tian N., Li J.-T. et al.* // Chem. Soc. Rev. 2011. V. 40. P. 4167–4185.
17. *Basov A., Drobotenko M., Svidlov A., et al.* Inequality in the frequency of the open states occurrence depends on single 2H/1H replacement in DNA// Molecules. 2020. V. 25. № 16. 3753. https://doi.org/10.3390/molecules25163753
18. *Petriev I., Pushankina P., Bolotin S., et al.* The influence of modifying nanoflower and nanostar type Pd coatings on low temperature hydrogen permeability through Pd-containing membranes // J. Membr. Sci. 2021. V. 620. № 118894. https://doi.org/10.1016/j.memsci.2020.118894

THE INFLUENCE OF CRYSTALLOGRAPHICALLY ATYPICAL PENTAGONAL NANOSTRUCTURED COATING ON THE LIMITING STAGE OF LOW-TEMPERATURE HYDROGEN TRANSPORT THROUGH Pd–Cu Membranes

I. S. Petriev[a,b], P. D. Pushankina[a], I. S. Lutsenko[a], and M. G. Baryshev[a,b]

[a] *Kuban State University, Krasnodar, Russian Federation*

[b] *Southern Scientific Centre of the Russian Academy of Sciences, Rostov-on-Don, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS A. B. Lisitsyn

A new approach of acceleration surface processes of hydrogen transport through Pd–40%Cu membranes by depositing a developed catalytic coating consisting of nanoparticles with a novel crystallographic atypical pentagonal structure has been demonstrated. The number of localized potentially more active regions of the membrane surface increases significantly due to the presence of high-index facets with a large number of reactive undercoordinated atoms in such particles. This modification leads to the rate-limiting stage shift significantly accelerating the surface recombinative desorption and to the increase in the diffusion stage influence. This improves membrane gas transport characteristics, making it possible to achieve a permeability of up to 8.9 mmol s^{-1} m^{-2} in a low-temperature mode (up to 100°C). The obtained value is up to 6 times higher than the corresponding value for smooth membranes and up to 2 times higher for membranes modified with classical palladium black.

Keywords: palladium-containing membranes, composite films, nanostructured surface, pentagonally-structured particles, hydrogen permeability, surface effects

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 22–24

ФИЗИКА

УДК 537.635; 537.874.3

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ МАГНИТНОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ НАНОКОМПОЗИТНЫХ СРЕД

© 2021 г. Член-корреспондент РАН А. Б. Ринкевич[1,*], Д. В. Перов[1]

Поступило 16.04.2021 г.
После доработки 10.05.2021 г.
Принято к публикации 12.05.2021 г.

Рассматривается метод определения эффективной магнитной проницаемости для композитных сред, содержащих магнитные частицы в виде эллипсоидов вращения общего вида. Приведены примеры расчетов данной величины для ансамблей произвольно ориентированных частиц в зависимости от их формы и объемной доли в нанокомпозитах.

Ключевые слова: нанокомпозитная среда, магнитные частицы, тензор магнитной проницаемости, комплексная эффективная магнитная проницаемость

DOI: 10.31857/S2686740021040106

Рассмотрим вопрос об высокочастотных эффективных магнитных параметрах композитной среды, в которой магнитные частицы помещены в матрицу из немагнитного материала. Обзор результатов для случая, когда внешнее магнитное поле отсутствует, дан в работе [1]. В магнитном поле динамическая магнитная проницаемость – это тензорная величина, и для описания резонансных явлений важны как диагональные, так и недиагональные компоненты этого тензора. Если магнитные частицы по форме отличаются от сферы, то для описания ширины и формы линии необходим учет пространственной ориентации частиц. Эти проблемы решаются в данном сообщении. Рассмотрены частицы в форме эллипсоида, параметры которого изменяются в широких пределах, и предложенный метод позволяет выполнить расчет проницаемости композитов с частицами различной формы, в том числе далекой от сферической.

Будем рассматривать среду, магнитные свойства любого элементарного объема которой будут считаться одинаковыми. Размеры этого объема много меньше таких характерных пространственных масштабов задачи, как длина распространяющейся в среде электромагнитной волны и размеры образца, но много больше размера любой содержащейся в нем магнитной частицы. Намагниченность композитной среды характеризуется количеством магнитного вещества, т.е. его объемной долей θ_v, которая предполагается одинаковой для любого элементарного объема среды. Для такого вида композитной среды могут быть введены определенные усредненные или эффективные параметры.

Предположим, что свойства ферромагнитных частиц в композитной среде описываются тензором магнитной проницаемости $\ddot{\boldsymbol{\mu}}$. Для определения тензора магнитной проницаемости композитной среды $\ddot{\boldsymbol{\mu}}^m$ используем одну из моделей смешения на основе приближения степенными законами. Простейшее из таких приближений основано на использовании линейного закона или формулы Зильберштейна [2], что приводит к соотношению

$$\ddot{\boldsymbol{\mu}}^m = (1-\theta_v)\cdot\ddot{\mathbf{I}} + \theta_v\cdot\ddot{\boldsymbol{\mu}}, \tag{1}$$

где $\ddot{\mathbf{I}} = \delta_{ij}$ – единичный тензор, δ_{ij} – дельта-функция Кронекера. Формула (1) справедлива при $\theta_v \ll 1$, а при учете изменений среднего поля из-за присутствия магнитных частиц, область ее применения может быть расширена в сторону бóльших концентраций, как это показано ниже.

Для частиц в виде эллипсоидов вращения общего вида тензор $\ddot{\boldsymbol{\mu}}$ имеет следующий вид [3]:

$$\ddot{\boldsymbol{\mu}} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & \mu_{xy} & 0 \\ \mu_{yx} & \mu_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

$$\mu_{xx} = 1 + \frac{\omega_M\left[\omega_H + i\omega\alpha - (N_{33}-N_{22})\omega_M\right]}{D},$$

[1] *Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия*
**E-mail: rin@imp.uran.ru*

$$\mu_{xy} = \frac{\omega_M\left[i\omega - N_{12}\omega_M\right]}{D},$$
$$\mu_{yx} = -\frac{\omega_M\left[i\omega + N_{12}\omega_M\right]}{D},$$
$$\mu_{yy} = 1 + \frac{\omega_M\left[\omega_H + i\omega\alpha - (N_{33} - N_{11})\,\omega_M\right]}{D},$$
$$D = (\omega_H + i\omega\alpha - (N_{33} - N_{11})\,\omega_M)\times$$
$$\times(\omega_H + i\omega\alpha - (N_{33} - N_{22})\,\omega_M) - (N_{12}\omega_M)^2 - \omega^2.$$

Здесь используются обозначения: $\tilde{\mathbf{N}}$ – тензор размагничивания с элементами N_{ij}, $\mathrm{tr}\,\tilde{\mathbf{N}} = 1$; $\omega_H = \gamma H_z$, $\omega_M = 4\pi\gamma M_z$, где α – параметр диссипации, ω – круговая частота, γ – гиромагнитное отношение для электрона, H_z – постоянное поле намагничивания, направленное вдоль оси z, M_z – проекция постоянного поля намагничивания на ось z. Заметим, что модуль вектора $\mathbf{M}$ равен намагниченности насыщения материала.

Тензор размагничивания для некоторой магнитной частицы определяет отличие магнитного поля внутри нее от заданного внешнего магнитного поля в окружающей частицу немагнитной среде. Магнитное поле в элементарном объеме однородной композитной среды фактически является результатом усреднения полей внутри и вне магнитных частиц, располагающихся в этом объеме. Если $\theta_v \ll 1$, то среднее поле мало отличается от поля в немагнитной среде. Однако по мере увеличения θ_v отличие этих полей становится все больше. Такого рода изменения в композитной среде при различных значениях объемной доли θ_v должны учитываться посредством введения эффективного тензора размагничивания $\tilde{\mathbf{L}}$, который зависит от θ_v следующим образом: при $\theta_v \to 0$ используется тензор $\tilde{\mathbf{L}} \approx \tilde{\mathbf{N}}$, где тензор $\tilde{\mathbf{N}}$ определен для единственной частицы заданной формы, в то время как при $\theta_v \to 1$ выполняется равенство $\tilde{\mathbf{L}} \approx \tilde{\mathbf{0}}$, что соответствует неограниченной магнитной среде. Согласно [4], соответствующий эффективный тензор размагничивания может быть определен как

$$\tilde{\mathbf{L}} = (\tilde{\boldsymbol{\mu}} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}^m)\cdot(\tilde{\boldsymbol{\mu}}^m\cdot(\tilde{\boldsymbol{\mu}} - \tilde{\mathbf{I}}))^{-1}\cdot\tilde{\mathbf{N}}. \quad (3)$$

Подставляя (1) в (3) и пренебрегая, в первом приближении, влиянием тензора $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ на $\tilde{\mathbf{L}}$, получаем, что

$$\tilde{\mathbf{L}} = (1 - \theta_v)\cdot\tilde{\mathbf{N}}. \quad (4)$$

Таким образом, тензор магнитной проницаемости композитной среды $\tilde{\boldsymbol{\mu}}^m$ будет определяться выражением (1), в котором элементы тензора $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ соответствуют формулам (2), но с заменой соответствующих элементов тензора $\tilde{\mathbf{N}}$ на $\tilde{\mathbf{L}}$, согласно соотношению (4). Окончательно можно записать, что

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}^m = \begin{pmatrix} \mu_{xx}^m & \mu_{xy}^m & 0 \\ \mu_{yx}^m & \mu_{yy}^m & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\mu_{xx}^m = 1 + \theta_v\,\frac{\omega_M[\omega_H + i\omega\alpha - (N_{33} - N_{22})(1-\theta_v)\omega_M]}{\hat{D}},$$
$$\mu_{xy}^m = \frac{\theta_v\omega_M\left[i\omega - N_{12}(1-\theta_v)\,\omega_M\right]}{\hat{D}},$$
$$\mu_{yx}^m = -\frac{\theta_v\omega_M\left[i\omega + N_{12}(1-\theta_v)\,\omega_M\right]}{\hat{D}},$$
$$\mu_{yy}^m = 1 + \theta_v\times$$
$$\times\frac{\omega_M\left[\omega_H + i\omega\alpha - (N_{33} - N_{11})(1-\theta_v)\,\omega_M\right]}{\hat{D}},$$
$$\hat{D} = (\omega_H + i\omega\alpha - (N_{33} - N_{11})(1-\theta_v)\,\omega_M)\times$$
$$\times(\omega_H + i\omega\alpha - (N_{33} - N_{22})(1-\theta_v)\,\omega_M) -$$
$$-(N_{12}(1-\theta_v)\,\omega_M)^2 - \omega^2.$$

При анализе распространения электромагнитных волн в поперечно намагниченной среде, когда поле намагничивания направлено перпендикулярно и переменному магнитному полю, и волновому вектору электромагнитной волны, необходимо использовать скалярную величину – эффективную магнитную проницаемость μ_{eff} [3]. Если мы рассматриваем композитную среду, характеризуемую тензором магнитной проницаемости вида (5), то можно показать, что

$$\mu_{eff} = \mu_{xx}^m - \frac{\mu_{xy}^m\mu_{yx}^m}{\mu_{yy}^m}. \quad (6)$$

Для получения усредненного тензора магнитной проницаемости композитной среды $\langle\tilde{\boldsymbol{\mu}}^m\rangle$ в случае произвольно ориентированных эллипсоидальных частиц нужно провести статистическое усреднение его элементов с учетом различной пространственной ориентации ферромагнитных частиц, которая может быть определена введением параметров $\boldsymbol{\Theta} = (\alpha\ \beta\ \gamma)$ – векторов углов поворота ферромагнитных частиц относительно осей x, y, z на углы α, β, γ соответственно. Он обусловливает, во-первых, изменение тензора размагничивания частицы $\tilde{\mathbf{N}}(\boldsymbol{\Theta})$ при изменении ее ориентации в пространстве, во-вторых, изменение величины M_z, а следовательно, и $\omega_M(\boldsymbol{\Theta})$, при таком изменении. Усредненное значение эффективной магнитной проницаемости $\langle\mu_{eff}\rangle$ композитной среды находится путем усреднения выражения (6) по всем возможным значениям углов ориентации магнитных частиц α, β, γ.

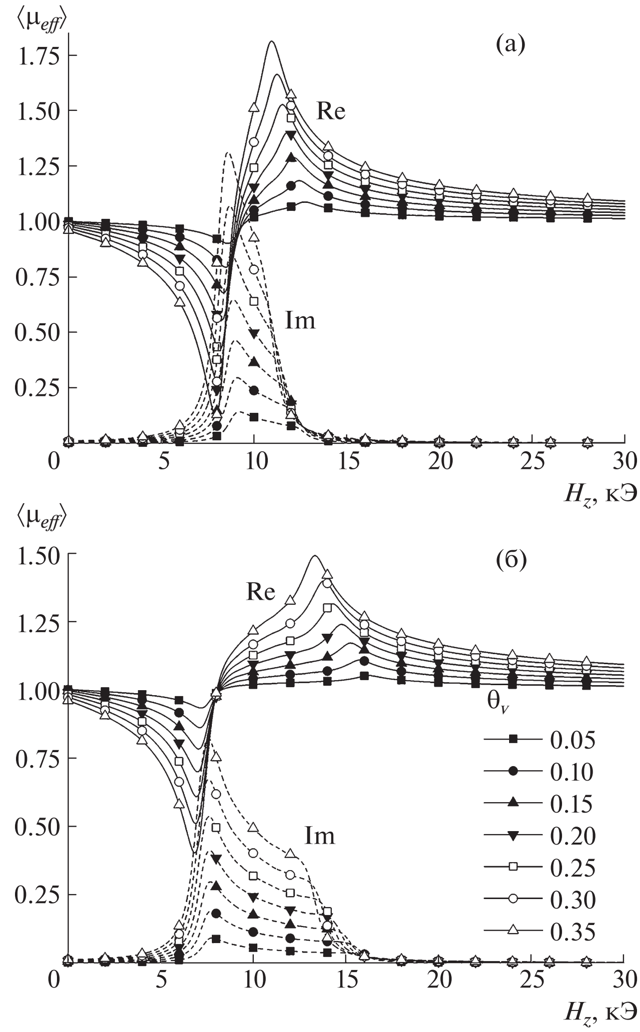


Рис. 1. Полевые зависимости вещественных (сплошные линии) и мнимых (пунктирные линии) частей комплексных эффективных магнитных проницаемостей в зависимости от объемной доли магнитного вещества в нанокомпозитах для наночастиц в форме эллипсоидов с различными соотношениями полуосей: (а) – $a{:}b{:}c$ = 25:25:10; (б) – $a{:}b{:}c$ = 25:25:1.

Результаты расчетов для нескольких значений θ_v и различной формы частиц (с разными отношениями длин полуосей эллипсоидов a, b, c) показаны на рис. 1. Использованные при расчетах формулы для тензоров размагничивания частиц в форме эллипсоидов вращения общего вида приведены в [5]. Расчет эффективной магнитной проницаемости намагниченного композита был выполнен для ансамбля из 10 000 частиц из материала с намагниченностью насыщения $4\pi M_s$ = = 7.04 кГс и постоянной магнитного затухания $\alpha = 0.05$, частота f = 30 ГГц. Наблюдаются изменения эффективной магнитной проницаемости, связанные с ферромагнитным резонансом.

Из рис. 1 видно, что резонанс занимает широкую область магнитных полей, несмотря на малое значение постоянной α. Рассмотренный метод определения эффективной проницаемости использован при анализе прохождения микроволн через композитную среду, содержащую чешуйки из сплава Fe–Si–Nb–Cu–B [6, 7].

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 17-12-01002).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lagarkov A.N., Rozanov K.N.* // JMMM. 2009. V. 321. № 14. P. 2082–2092. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2008.08.099
2. *Sihvola A.* Electromagnetic mixing formulas and applications. London: The Institution of Electrical Engineers, 1999. 284 p.
3. *Гуревич А.Г., Мелков Г.А.* Магнитные колебания и волны. М.: Наука, 1994. 464 с.
4. *Стрэттон Дж.А.* Теория электромагнетизма. М., Л.: ГИТТЛ, 1948. 539 с.
5. *Osborn J.A.* // Phys. Rev. 1945. V. 67. № 11–12. P. 351–357.
6. *Ринкевич А.Б., Рябков Ю.И., Перов Д.В., Пахомов Я.А., Кузнецов Е.А.* // ФММ. 2021. Т. 122. № 4. С. 377–383. https://doi.org/10.31857/S0015323021040082
7. *Rinkevich A.B., Ryabkov Yu.I., Perov D.V., Nemytova O.V.* // JMMM. 2021. V. 529. 167901. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2021.167901

DETERMINATION OF THE EFFECTIVE MAGNETIC PERMEABILITY OF NANOCOMPOSITE MEDIA

Corresponding Member of the RAS A. B. Rinkevich[a] and D. V. Perov[a]

[a] *M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation*

In this work, the method of determination of the effective magnetic permeability is considered for composite media containing magnetic particles in the form of general ellipsoids of revolution. The examples of calculations of this value for ensembles of randomly oriented particles, depending on their shape and volume fraction in nanocomposites, are given.

Keywords: nanocomposite medium, magnetic particles, magnetic permeability tensor, complex effective magnetic permeability

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 25–29

ФИЗИКА

УДК 669.3'24'26'1:539.25

ТЕКСТУРОВАННЫЕ ЛЕНТЫ-ПОДЛОЖКИ ИЗ ТРОЙНЫХ МЕДНО-НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ С ДОБАВКАМИ ТАНТАЛА И ВОЛЬФРАМА ДЛЯ ЭПИТАКСИАЛЬНОГО НАНЕСЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ КОМПОЗИЦИЙ

© 2021 г. Академик РАН В. М. Счастливцев[1], Ю. В. Хлебникова[1,*], Т. Р. Суаридзе[1], Л. Ю. Егорова[1], Ю. Н. Акшенцев[1]

Поступило 16.06.2021 г.
После доработки 24.06.2021 г.
Принято к публикации 29.06.2021 г.

Рассмотрен вопрос о возможности получения совершенной биаксиальной кубической текстуры в тройных сплавах на медно-никелевой основе с добавками тантала или вольфрама, с целью использования тонких деформированных прокаткой и отожженных лент из этих сплавов в качестве эпитаксиальных подложек. Получены опытные образцы текстурованных лент. Из ряда вариантов рекристаллизационного отжига найден оптимальный, позволяющий реализовать в ленте толщиной 100 мкм совершенную кубическую текстуру с долей двойниковых зерен менее 3%. Созданные подложки из тройных сплавов на медно-никелевой основе могут быть предложены как альтернатива применяемому сегодня в технологии производства ленточных подложек сплаву Ni–4.8 ат. %W.

Ключевые слова: эпитаксиальная подложка, медно-никелевые сплавы, холодная прокатка, рекристаллизация, кубическая текстура

DOI: 10.31857/S2686740021040131

Биаксиально текстурированная подложка служит основой для эпитаксиального нанесения на нее буферных и функционального высокотемпературного сверхпроводящего (ВТСП) слоев. Готовая многослойная лента может быть использована для передачи электроэнергии с наименьшими потерями, создания сильных магнитных полей в безгелиевых ВТСП-соленоидах, для проектирования экономичных, с улучшенными массогабаритными характеристиками изделий для электроэнергетики и медицинского оборудования [1]. Кроме того, ВТСП-провод, в котором использована биаксиально текстурированная подложка, является единственным материалом, который позволяет создать сверхвысокие магнитные поля для осуществления реакции термоядерного синтеза в компактных токамаках.

Биаксиальная текстура формируется только в гранецентрированных металлах и сплавах с высоким значением энергии дефектов упаковки (ЭДУ), например, в меди и никеле. Наиболее широко сегодня используется в технологии производства ленточных подложек сплав Ni–4.8%W, но он ферромагнитен при рабочей температуре ВТСП, что приводит к снижению функциональных свойств, в том числе величины критического тока [2]. В работе [3] на основе наиболее используемого бинарного сплава Ni–5%W была создана группа тройных Ni–Cu–W сплавов с содержанием меди от 5 до 15 ат. %. Даже в сплаве, содержащем 15 ат. % Cu, не удалось достичь парамагнитного состояния, точка Кюри выше 100 K. Авторы [4, 5] предприняли попытку создания парамагнитных бинарных сплавов Ni–8–10 ат. %W, но увеличение содержания вольфрама в сплаве привело к снижению степени текстурного совершенства. Если в сплаве Ni–4.8 ат. %W доля ориентировки $\{001\}\langle 100\rangle \pm 5°$ приближается к 100%, то в сплавах с 8 и более ат. %W доля ориентировки $\{001\}\langle 100\rangle \pm 5°$ менее 90%.

Возможности легирования при создании никелевых сплавов для текстурованных подложек существенно ограничены, поскольку легирование всегда снижает ЭДУ сплава, что приводит к изменению компонентного состава текстуры деформации в сторону увеличения объемной доли компоненты $\{110\}\langle 112\rangle$ за счет снижения объемной доли суммы компонент $\{123\}\langle 634\rangle$ и $\{112\}\langle 111\rangle$,

[1] *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия*

**E-mail: Yulia_kh@imp.uran.ru*

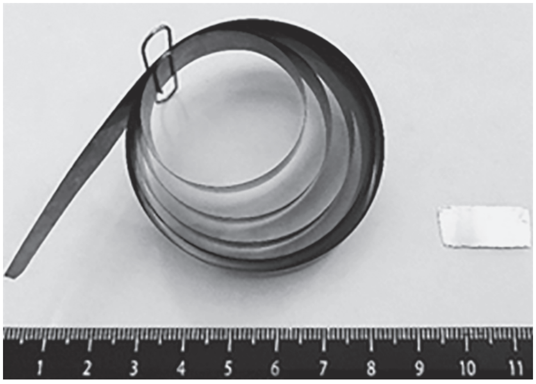


Рис. 1. Макрофотография протяженной ленты из тройного сплава Cu–40%Ni–3%Ta.

а это не позволяет в дальнейшем реализовать острую кубическую текстуру рекристаллизации [6].

Парамагнитные медно-никелевые сплавы с содержанием никеля до 45 ат. % – перспективный материал для изготовления биаксиально текстурированных подложек, поскольку при их создании не происходит снижения ЭДУ сплава и совершенная биаксиальная кубическая текстура реализуется в любом концентрационном диапазоне [7–9]. Однако существует необходимость повышения механических и антикоррозионных свойств бинарного медно-никелевого сплава, что можно достичь при добавлении в сплав третьего элемента [10, 11]. Еще более эффективными с точки зрения упрочнения являются тугоплавкие элементы, такие как вольфрам, тантал, рений, молибден и ниобий.

Один из самых тугоплавких элементов – тантал обладает одновременно высокой прочностью и пластичностью. Его прочность до 1000°C выше, чем у более тяжеловесного вольфрама, при этом он легко деформируется прокаткой. Наиболее характерной особенностью этого элемента является его необычайно высокая устойчивость против воздействия различных кислот и щелочей. Вольфрам и тантал, вводимые в жаропрочные никелевые или кобальтовые сплавы, способствуют повышению их коррозионной стойкости, на основании чего может быть дан положительный прогноз относительно антиокислительных свойств тройных медно-никелевых сплавов с этими элементами. Однако на сегодняшний день нет достоверных данных о темпах снижения ЭДУ при введении тантала в медно-никелевую матрицу и, соответственно, сложно спрогнозировать возможные изменения компонентного состава текстуры деформации сплава при прокатке и текстуры рекристаллизации при последующем отжиге.

Задача исследования состояла в оценке возможности получения совершенной биаксиальной кубической текстуры в тонких лентах из новых тройных сплавов на медно-никелевой основе с танталом и вольфрамом, а также в выборе оптимального режима рекристаллизационного отжига.

Объектами исследования служили протяженные ленты из тройных сплавов Cu–40%Ni–3%Ta и Cu–40%Ni–3.2%W (в ат. %) (рис. 1). Выплавку осуществляли в вакуумной индукционной печи в инертной атмосфере из особо чистых элементов: бескислородной меди чистотой 99.95%, никеля чистотой 99.99%, а также вольфрама и тантала чистотой не ниже 99.94%. Полученные слитки весом около 500 г после удаления усадочной раковины были прокованы при температуре от 1100 до 900°C на прутки сечением 10 × 10 мм. Прутковые заготовки отжигали при температуре 650–680°C в течение 1.5 ч с целью формирования однородной структуры.

Холодную прокатку заготовок осуществляли до толщины ~100 мкм с обязательным окончательным подкатом ленты на прокатном стане с полированными валками, степень деформации составляла 98.9–99.1%. Рекристаллизационные отжиги деформированных образцов проводили в атмосфере $Ar+4\%H_2$ при избыточном давлении 1.3 атм. Продолжительность отжига при температурах: 1000, 1050 и 1100°C составляла 1 ч.

Качество сформировавшейся текстуры рекристаллизации в лентах исследуемых сплавов оценивали по количеству зерен с ориентацией ⟨001⟩{100} на поверхности текстурованной ленты. Ориентацию зерен определяли методом дифракции обратно отраженных электронов (EBSD), с использованием специализированной приставки фирмы EDAX к сканирующему электронному микроскопу FEI “Quanta-200”. Сканирование ориентационных данных осуществлялось с шагом 1 мкм с поверхности площадью 3 × 3 мм.

При всех режимах рекристаллизационного отжига в лентах исследуемых сплавов формируется кубическая текстура. Однако степень совершенства полученной текстуры существенно возрастает с повышением температуры отжига с 1000 до 1050°C. Количество зерен с кубической ориентацией {001}⟨100⟩ ± 5° после отжига при 1000°C в течение 1 ч для обоих сплавов составляет около 90%. Кроме кубических зерен в структуре присутствует 7–8% двойников с ориентацией {221}⟨122⟩, которым соответствует пик в области угла 60° и небольшая доля 2–3% зерен с промежуточной разориентировкой от 27° до 48° на рис. 2 (кривые *1* и *3*). Результаты EBSD-анализа можно считать надежным критерием оценки качества кристаллографической текстуры, поскольку доля проиндексированных точек из общего их количества для каждого образца составляет более 99.8%. Например, для сплава Cu–40%Ni–3.2%W после рекристаллизационного отжига 1000°C это значение 99.84%

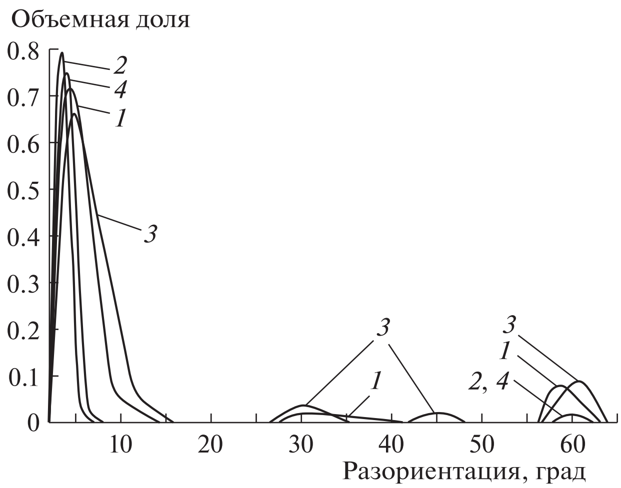


Рис. 2. Гистограмма разориентировки границ зерен по данным EBSD-анализа для текстурованных лент из сплавов Cu–40%Ni–3.2%W (линии *1*, *2*) и Cu–40%Ni–3%Ta (линии *3*, *4*) после часового рекристаллизационного отжига при 1000°C (линии *1*, *3*) и 1050°C (линии *2*, *4*).

(общее число точек: 108594, число идентифицированных точек: 108419).

Совершенная кубическая текстура за счет резкого снижения количества двойников формируется при 1050°C, доля зерен с ориентацией $\{001\}\langle 100\rangle \pm 5°$ составляет более 96%, при этом зерен с промежуточными ориентациями в структуре нет совсем. На графике распределения углов разориентировки границ зерен остается, кроме основного, слабый пик в области углов 60°, соответствующий зернам с двойниковой ориентацией, доля которых не превышает 2–3% (рис. 2, кривые *2* и *4*). Для достоверного набора статистических данных для каждого сплава анализировали несколько разных участков по длине текстурованной ленты. Все проанализированные участки характеризуются равноценной степенью текстурного совершенства.

Средний размер рекристаллизованного зерна после отжига при 1000°C в сплаве с вольфрамом составляет $d_{ср} = 35 \pm 5$ мкм, в сплаве с танталом – чуть выше $d_{ср} = 40 \pm 5$ мкм, в обоих сплавах наблюдается незначительная разнозернистость. С повышением температуры отжига до 1050°C структура становится более однородной, а средний размер зерна остается на прежнем уровне. При дальнейшем повышении температуры отжига до 1100°C степень совершенства кубической текстуры сохраняется. Однако количество зерен двойниковой ориентации остается на прежнем уровне 2–3%, а не снижается, как можно было бы ожидать, основываясь на данных работы [8] о совершенствовании кубической текстуры в бинарном сплаве Cu–40%Ni в температурном интервале отжига от 1050 до 1100°C вплоть до 99.5% кубической составляющей. Кроме того, средний размер рекристаллизованного зерна после отжига при 1100°C в обоих сплавах заметно увеличивается до $d_{ср} = 55 \pm 5$ мкм, что является косвенным свидетельством начала развития вторичной рекристаллизации. Можно считать, что для тройных медно-никелевых сплавов с тугоплавкими элементами текстурообразующий отжиг при 1050°C является оптимальным.

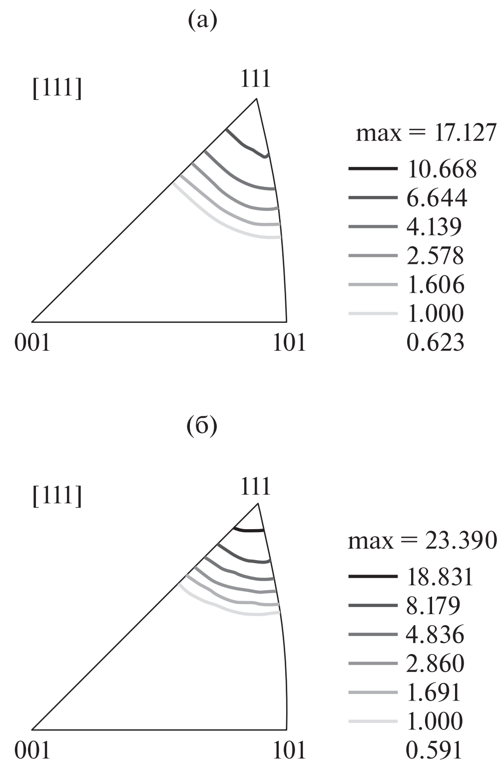


Рис. 3. Положение текстурного максимума в стандартном стереографическом треугольнике по данным EBSD-анализа для текстурованных лент из сплава Cu–40%Ni–3.2%W после часового рекристаллизационного отжига при 1000°C (а) и 1050°C (б).

На рис. 3 приведен стандартный стереографический треугольник инверсной полюсной фигуры {111} для сплава Cu–40%Ni–3.2%W после часового отжига при 1000 и 1050°C. Основная масса проиндексированных точек расположена в области полюса 111, что соответствует зернам с кубической ориентацией. Контуры интенсивности в стандартном стереографическом треугольнике расположены плотнее для образца после отжига при 1050°C, а также меньше площадь области, очерченная контуром наибольшей интенсивности. Кроме того, заметно выше уровень интенсивности текстурного максимума на ~30% (рис. 3б).

Для текстурованных лент-подложек основной характеристикой механических свойств является предел текучести ($\sigma_{0.2}$), определяемый при испытаниях на растяжение при комнатной температуре предварительно отожженных образцов толщиной 100 мкм, длиной 120 мм и шириной 10 мм. При испытаниях текстурованных образцов следует учитывать, что тонкие деформированные образцы с совершенной кубической текстурой рекристаллизации фактически являются ленточным ГЦК квазимонокристаллами, в которых значения предела текучести в направлении ⟨001⟩ будет наименьшим, по сравнению с любым другим кристаллографическим направлением [12]. Следовательно, чем совершеннее текстура рекристаллизации сплава при данной температуре, тем ниже $\sigma_{0.2}$. Поэтому предварительный отжиг образцов для механических испытаний следует осуществлять при температуре формирования наиболее совершенной текстуры, в данном случае при 1050°C. Уровень прочностных свойств зависит и от размера рекристаллизованного зерна, и от технологических параметров изготовления ленты: дробности прокатки, степени чистоты металлов, используемых при выплавке сплавов и т.д. Для изученной ранее ленты из чистой бескислородной меди, которую используют для сравнения, оптимальная температура рекристаллизационного отжига 600°C, а величина $\sigma_{0.2} = 21$ MPa [9]. Для исследованных сплавов с танталом и вольфрамом средняя величина $\sigma_{0.2}$ составляет 114 и 116 ± 3 МПа соответственно. Ранее в [10] для группы тройных медно-никелевых сплавов с добавками ряда 3*d*-переходных металлов: Fe, Cr, V были получены значения предела текучести 96, 98 и 100 МПа соответственно. Ленты из тройных сплавов с танталом и вольфрамом на ~15% прочнее наиболее близких к ним по составу тройных сплавов. Даже незначительное упрочнение подложки позволяет уменьшить ее толщину и вес конструкции, а также снизить расход металла при выплавке сплавов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, показана принципиальная возможность создания высокотекстурованных подложек из новых тройных сплавов на медно-никелевой основе с танталом и вольфрамом, получены опытные образцы лент с содержанием кубических зерен более 96% и двойников менее 3%. Определен оптимальный температурный режим рекристаллизационного отжига (1050°C) для формирования совершенной биаксиальной текстуры в лентах из этих сплавов. Величина предела текучести полученных лент на ~15% выше, чем у ближайших по составу аналогов – тройных сплавов на медно-никелевой основе с добавками 3*d*-металлов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Структурные исследования проведены на микроскопе FEI “Quanta-200” в отделе электронной микроскопии ЦКП “Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов” Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН.

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме “Структура” (№ г.р. АААА-А18-118020190116-6) при частичной финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 20-43-660034 р_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Токонесущие ленты второго поколения на основе высокотемпературных сверхпроводников / Под ред. А. Гояла. Пер. с англ. под ред. проф. А.Р. Кауля. М.: Изд. ЛКИ, 2010. 432 с. (Second-Generation HTS Conductors, Amit Goyal (ed.), Springer Science & Business Media Inc., 2005, 345 p.).
2. *Bhattacharjee P.P., Ray R.K., Tsuji N.* Cold rolling and recrystallization textures of a Ni–5 at. % W alloy // Acta Mater. 2009. V. 57. P. 2166–2179.
3. *Wulff A.C., Mishin O.V., Andersen N.H., Zhao Y., Grivel J.-C.* Microstructure, texture and magnetic properties of Ni–Cu–W substrates for coated conductors // Materials Letters. 2013. V. 92. P. 386–388.
4. *Tian H., Wang Y., Ma L., Liu M., Suo H.* Evolutions of the texture and microstructure of a heavily cold-rolled Ni–9W alloy during recrystallization // J. Mater. Res. 2016. V. 31. P. 2438–2444.
5. *Ji Y., Suo H., Zhang Z., Ma L., Wu X., Zhang C., Wu X., Zhang C., Li J., Cui J., Li C., Kausar S., Liu M., Wang Y., Wang Q.* Strong cube texture of super-high tungsten Ni–W alloy substrates used in REBCO coated conductors // J. Alloys and Compounds. 2020. V. 820. 153430. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.153430
6. *Гервасьева И.В., Родионов Д.П., Хлебникова Ю.В.* Текстура деформации прокатанных лент из сплавов на основе меди как условие получения острой кубической текстуры при рекристаллизации // ФММ. 2015. Т. 116. № 7. С. 729–736.
7. *Tian H., Suo H.L., Mishin O.V., Zhang Y.B., Juul Jensen D., Grivel J.-C.* Annealing behavior of a nanostructured Cu–45 at. %Ni alloy // J Mater. Sci. 2013. V. 48. P. 4183–4190.
8. *Tian H., Suo H.L., Liang Y.R., Zhao Y., Grivel J.C.* Effect of surface shear on cube texture formation in heavy cold-rolled Cu-45 at % Ni alloy substrates // Mater. Lett. 2015. V. 141. P. 83–87.
9. *Хлебникова Ю.В., Родионов Д.П., Гервасьева И.В., Суаридзе Т.Р., Казанцев В.А.* Условия формирования острой кубической текстуры в тонких лентах из сплавов Cu–Ni для высокотемпературных сверхпроводников второго поколения // ПЖТФ. 2015. Т. 41. № 7. С. 73–80.
10. *Родионов Д.П., Акшенцев Ю.Н., Гервасьева И.В., Хлебникова Ю.В., Суаридзе Т.Р.* Способ изготовле-

ния биаксиально текстурированной подложки из тройного сплава на медно-никелевой основе. Патент RU № 2 624 564. Гос. рег. от 04.07.2017.

11. *Счастливцев В.М., Хлебникова Ю.В., Родионов Д.П., Гервасьева И.В., Суаридзе Т.Р., Егорова Л.Ю.* Текстурованные ленты-подложки из тройных сплавов на основе константана Cu–40%Ni–Me для эпитаксиального нанесения буферных и сверхпроводящих слоев // ДАН. 2016. Т. 469. № 2. С. 181–184. https://doi.org/10.7868/S0869565216200123

12. *Штремель М.А.* Прочность сплавов. Ч. II. Деформация. М.: МИСиС, 1997. 526 с.

TEXTURED TAPES – SUBSTRATES MADE OF TERNARY COPPER-NICKEL ALLOYS WITH TANTALUM AND TUNGSTEN ADDITIVES FOR EPITAXIAL DEPOSITION OF MULTILAYER COMPOSITIONS

Academician of the RAS V. M. Schastlivtsev[a], Yu. V. Khlebnikova[a], T. R. Suaridze[a], L. Yu. Yegorova[a], and Yu. N. Akshentsev[a]

[a] *The M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation*

The article considers possibility of obtaining a perfect biaxial cubic texture in ternary alloys on a copper-nickel base with additions of tantalum and tungsten, in order to use thin, deformed by rolling and annealed tapes from these alloys as epitaxial substrates. Prototypes of textured tapes were obtained. Among all the of recrystallization annealing, the optimal annealing, which makes it possible to realize a perfect cubic texture with a fraction of twin grains of less than 3% in a tape with a thickness of 100 microns, was found. The created substrates made of ternary alloys on copper-nickel base can be offered as an alternative to the Ni–4.8 at. %W alloy currently used in the technology of production of tape substrates.

Keywords: epitaxial substrate, copper-nickel alloys, cold rolling, recrystallization, cubic texture

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 30–35

МЕХАНИКА

УДК 539.3

ФРАКТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА БЛОЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И НОВЫЙ УНИВЕРСАЛЬНЫЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

© 2021 г. Академик РАН В. А. Бабешко[1,2,*], О. В. Евдокимова[1], О. М. Бабешко[2]

Поступило 30.03.2021 г.
После доработки 30.03.2021 г.
Принято к публикации 12.05.2021 г.

Исследования авторов последнего времени по разработке теории и приложений блочных элементов в задачах механики и физики неожиданно привели к возможности трактовки еще одной особенности этих механико-математических объектов. Следуя идее Бенуа Мандельброта о фрактальности, т.е. самоподобии, в природе, проведено исследование блочных элементов как объектов, обладающих фрактальными свойствами. Показано, что известные природные явления, процессы и объекты, описываемые граничными задачами для дифференциальных уравнений в частных производных и системами таких уравнений, имеют в качестве решений самоподобные упакованные блочные элементы. Более того, выделяется особая роль упакованных блочных элементов, порождаемых граничными задачами для простейших волновых уравнений, или уравнений Гельмгольца. В множестве упакованных блочных элементов, для граничных задач природных процессов, они являются объектами дискретного топологического пространства, обладают максимальной топологией, представляя своими объединениями все остальные блочные элементы множества. В то же время волновое уравнение или уравнение Гельмгольца являются аналогами уравнения Шрёдингера, лежащего в основе квантовой механики. Уравнение Шрёдингера описывает состояния элементарных частиц квантовой механики. В связи с этим складывается ситуация, в которой первоосновой как квантового мира, так и оговоренных природных процессов являются самоподобные названные уравнения, выполняющие свои функции в соответствующих масштабах. Упакованные блочные элементы, порождаемые граничными задачами для таких же уравнений, как и для уравнения Шрёдингера, выполняют свои функции в сплошной среде, а состояния элементарных частиц описываются подобными уравнениями в квантовой механике.

Ключевые слова: метод блочного элемента, граничные задачи, системы дифференциальных уравнений, преобразование Галёркина, нелинейные задачи, квантовые аналогии

DOI: 10.31857/S2686740021040039

ВВЕДЕНИЕ

1. Через посредство дифференциальных уравнений, достаточно точно описывающих реальные процессы, обнаруживаются некоторые фрактальные свойства блочных элементов, которые в природе впервые были введены Мандельбротом [1].

Ограничим круг рассматриваемых природных объектов и происходящих в реальности процессов теми из них, которые описываются системами линейных дифференциальных уравнений в частных производных с постоянными коэффициентами, для которых применимо преобразование Галёркина. К ним добавляются уравнения с переменными коэффициентами, допускающие такое дробление области их задания на подобласти, при котором в каждой подобласти можно считать коэффициенты постоянными, с указанными свойствами. Добавляются нелинейные системы дифференциальных уравнений в частных производных, обладающие свойствами, требуемыми условиями применения метода Ньютона–Канторовича, а линеаризованное уравнение обладает описанными выше свойствами линейных уравнений [2]. Доказывается, что по крайней мере для этого класса процессов и явлений упакованные блочные элементы являются фракталами, т.е. самоподобными по своим свойствам, при описании решений граничных задач для всех оговоренных систем дифференциальных уравнений. Описанные выше дифференциальные уравнения относятся к механике сплошных сред, гидромеханике, теории поля, математической физике и смежным областям.

[1] *Южный научный центр Российской академии наук, Ростов-на-Дону, Россия*
[2] *Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия*
**E-mail: babeshko41@mail.ru*

2. В настоящее время опубликовано достаточное количество работ по применению метода блочного элемента, анализ которых позволил авторам сделать некоторые общие заключения о свойствах блочных элементов, не заметных, при анализе лишь отдельных работ. Для этого вначале кратко изложим один из способов построения блочных элементов, останавливаясь на наиболее важных моментах при их создании.

В основе метода блочного элемента лежат факторизационные методы. Наиболее обще, опираясь на теорию нормированных колец, они были исследованы и описаны в работах Н. Винера, М.Г. Крейна, И.Ц. Гохберга, Б. Нобла [3–6]. Более узкий круг задач решался методом сингулярного интеграла, базировавшегося на формуле Сохоцкого [7]. Их исследования посвящены анализу интегральных уравнений и порождаемых ими функциональных уравнений для функций одного комплексного переменного. В работах авторов этот подход был назван интегральным методом факторизации. Блочные элементы возникли в результате проникновения факторизационных методов непосредственно для анализа свойств граничных задач механики сплошной среды и их решений. Этот подход был назван дифференциальным методом факторизации.

Он позволяет строить решения ряда граничных задач как для отдельных уравнений, так и для их систем. Теория блочных элементов для анализа и решения граничных задач для систем линейных дифференциальных уравнений развивалась в работе авторов [7]. Их построение включает такие этапы, как внешняя алгебра, внешний анализ, фактор-топология. Для случая граничной задачи для дифференциальных уравнений или их систем в частных производных с постоянными коэффициентами, рассматриваемых на носителе, этап внешней алгебры включает построение внешних форм. Для этого осуществляется погружение граничной задачи в топологическое пространство и построение внешних форм, формируемых рассматриваемыми дифференциальными уравнениями граничной задачи [9–11]. На этом этапе применением интеграла Стокса, преобразующего объемный интеграл от внешней формы в интеграл по границе, получаются функциональные уравнения, эквивалентные исходной граничной задаче:

$$K\Phi = \int\limits_{\partial\Omega} \omega. \tag{1}$$

Левые части соотношения имеют коэффициент функционального уравнения K в форме матрицы-функции для системы, или одной функции для отдельного уравнения. Правые части функционального уравнения содержат внешние формы, в которые входят, как неизвестные, все типы граничных условий, допустимых в рассматриваемой области дифференциальными уравнениями. Заданные на границе граничные условия вносятся во внешние формы, остальные выражения для граничных условий являются неизвестными и нуждаются в определении. Следующий этап называется внешним анализом, поскольку связан с преобразованием внешних форм и поиском способа нахождения названных неизвестных.

Способ их нахождения опирается на факторизационный прием. Он был построен и обоснован в ряде работ авторов. Для этого необходимо преобразование автоморфизма, состоящего в требовании расположения вектора решения граничной задачи в области, в которой поставлена граничная задача, т.е. эта область обязана быть носителем решения граничной задачи.

Выполнив это действие, получаем для вектора Φ удовлетворение дифференциальным уравнениям во внутренности носителя, а при замыкании – и заданным граничным условиям поставленной задачи. Достижение требования автоморфизма сводится к факторизации некоторых матриц-функций, реализуемых вычислением форм-вычетов Лере [9]. Для правильного выбора полюсов, в которых необходимо найти формы-вычеты Лере, требуется осуществить дифференциальную факторизацию матрицы-функции коэффициента функционального уравнения. Способ ее построения описан в [4, 5] и ряде работ авторов. Вычисленные формы-вычеты Лере формируют псевдодифференциальные уравнения, решения которых дают необходимые составляющие, которые обеспечивают представление внешней формы только от заданных граничных условий. Воздействие на функциональное уравнение (1) обратной матрицей-функцией коэффициента K функционального уравнения позволяет получить точное решение исходной граничной задачи в аналитическом виде упакованного блочного элемента. Таким образом, упакованный блочный элемент – это топологический объект, имеющий вектор решения на носителе, внутреннее, открытое множество которого удовлетворяет дифференциальным уравнениям, а замыкание – граничным условиям граничной задачи. Совокупности упакованных блочных элементов могут появляться в результате объединения реально или фиктивно отделенных их носителей вместе с решениями. Фиктивно – означает условное дробление носителя на более мелкие части. Топологическое пространство является дискретным хаусдорфовым пространством, его формируют только внутренности блочных элементов, являющиеся отделенными открытыми множествами. Всевозможные объединения его элементов также являются объектами этого топологического пространства, а каждый элемент имеет замыкание [12]. Для осуществления объединения блочных элементов таким образом, чтобы получить связные элементы, необходимо построить топологическое пространство фактортопологий, приняв в качестве отношений эквивалентности граничные условия решений контактирующих блочных элементов. Это достигается сопряжением открыто-замкнутых окрестностей границы как носителей, так и решений граничных задач на носителях [12].

В результате объединения получается новый упакованный блочный элемент, содержащий объединенный носитель.

МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Опыт построения и преобразований блочных элементов опубликован в значительном числе работ авторов. Удобными областями для исследования, с учетом вышесказанного, являются в качестве компактной – квадрат в двумерной области и плоской квадрант, как не компактная область. Все результаты без труда переносятся на трехмерные случаи. Здесь принято во внимание, что сложные области и переменные коэффициенты могут быть описаны квадратами или кубами малых размеров, а некомпактные области рассматриваются для описания областей с границами, уходящими на бесконечность. Будем считать, что в этих областях поставлены граничные задачи для указанных выше систем дифференциальных уравнений с некоторыми граничными условиями, например, условиями Дирихле. Будем считать, что рассматривается корректно поставленная в одной из названных областей, обозначаемых Ω, граничная задача для системы из M дифференциальных уравнений с некоторым набором граничных условий, удовлетворяющих условиям дополнительности Шапиро–Лопатинского.

Запишем эти уравнения по аналогии с [13] в следующем виде:

$$L_{mn}(u_n) = 0, \quad m, n, = 1,\, 2,\, \ldots,\, M, \quad \partial_m^h = \frac{\partial^h}{\partial x_m^h}. \qquad (2)$$

Здесь L_{mn} – дифференциальные операторы, к примеру, для системы уравнений Ламе они имеют вид $L_{mn} = \delta_{mn}\Delta + \sigma\partial_m^2\partial_n^2$, где Δ – оператор Лапласа.

Допустив, что дифференциальные операторы L_{mn}, например, имеют четный порядок производных $2s$, тогда дифференциальный оператор L будет иметь порядок производных $2Ms$, и для корректности постановки граничной задачи в области Ω должны быть заданы, как минимум, Ms граничных условий $\Gamma_k(u_n)$, $k = 1, 2, \ldots, Ms$, линейно зависящих от u_n и их производных.

Построение решения векторной граничной задачи в области Ω можно осуществлять прямым применением метода блочного элемента к этой системе дифференциальных уравнений, что приводит к функциональному уравнению с матричным коэффициентом, и необходимости факторизации матрицы-функции. Решение получается компактным, но достаточно сложным. Значительно более простая форма представления решения векторной граничной задачи получается предложенным ниже новым достаточно универсальным методом блочного элемента, сводящим векторную граничную задачу к скалярным, заведомо приводящим сложное компактное решение граничной задачи разложенным по решениям более простых скалярных граничных задач [14].

Осуществим преобразование Галёркина, положив

$$u_1 = \begin{vmatrix} \chi_1 & L_{12} & \mathrm{L} & L_{1M} \\ \chi_2 & L_{22} & \mathrm{L} & L_{2M} \\ \mathrm{M} & \mathrm{M} & \ldots\mathrm{M} & \mathrm{M} \\ \chi_M & L_{2M} & \mathrm{L} & L_{MM} \end{vmatrix},$$

$$u_2 = \begin{vmatrix} L_{11} & \chi_1 & \mathrm{L} & L_{1M} \\ L_{12} & \chi_2 & \mathrm{L} & L_{2M} \\ \mathrm{M} & \mathrm{M} & \ldots\mathrm{M} & \mathrm{M} \\ L_{1M} & \chi_M & \mathrm{L} & L_{MM} \end{vmatrix} \mathrm{L}, \qquad (3)$$

$$u_M = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & \mathrm{L} & \chi_1 \\ L_{12} & L_{22} & \mathrm{L} & \chi_2 \\ \mathrm{M} & \mathrm{M} & \ldots\mathrm{M} & \mathrm{M} \\ L_{1M} & L_{2M} & \mathrm{L} & \chi_M \end{vmatrix}.$$

В результате вычислений и упрощений для определения функций χ_2 получается следующая система M независимых дифференциальных уравнений

$$L\chi_m = 0, \quad L = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & \mathrm{L} & L_{1M} \\ L_{12} & L_{22} & \mathrm{L} & L_{2M} \\ \mathrm{M} & \mathrm{M} & \ldots\mathrm{M} & \mathrm{M} \\ L_{1M} & L_{2M} & \mathrm{L} & L_{MM} \end{vmatrix}. \qquad (4)$$

Раскрыв определитель и осуществив возможные преобразования, получаем дифференциальные уравнения, не зависящие от порядка его вычисления, поскольку все элементы – дифференциальные операторы с постоянными элементами, коммутируют.

Следуя описанному выше алгоритму метода блочного элемента, строится с применением преобразований Фурье внешняя форма ω для дифференциального оператора L, которая позволяет систему дифференциальных уравнений привести к функциональным (1) с помощью интеграла Стокса [10]. Иногда оказывается, что дифференциальный оператор L расщепляется на совокупность дифференциальных операторов более низких порядков производных, т.е.

$$L = L_1 L_2 \ldots L_v.$$

В этом случае задача облегчается тем, что достаточно построить решения граничных задач методом блочного элемента в области Ω для более простых граничных задач

$$L_k \varphi_{km} = 0$$

при произвольных граничных условиях. Затем, по теореме Боджно [13], решения χ_m представляются в виде

$$\chi_m = \sum_1^v \varphi_{km}.$$

Решения φ_{km} разнятся произвольными граничными условиями.

После этого построенные решения χ_m скалярных граничных задач в форме упакованных блочных элементов, имеющих произвольные граничные условия, исследуются на предмет устранения произвола за счет удовлетворения заданным граничным условиям $\Gamma_k(u_n)$ исходной граничной задачи.

Этот результат достигается сведением проблемы к линейной алгебраической системе с помощью разработанных в работах [13, 14] интегродифференциального и координатного методов удовлетворения граничных условий упакованными блочными элементами.

О СОВОКУПНОСТЯХ БЛОЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

При исследовании граничных задач для дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами, когда носитель граничной задачи дробится на более мелкие части, на которых решаются граничные задачи, проблема сводится к рассмотрению совокупности блочных элементов, которые должны представлять решение на исходном носителе с граничными условиями на его границе. Как отмечено выше, совокупности блочных элементов представляют дискретное топологическое пространство [10]. Любые их объединения вновь являются элементами этого же топологического пространства. Это же относится и к последующим дроблениям носителей блочных элементов.

Свойством дискретных топологических пространств является существование замыканий каждого элемента пространства. Это позволяет строить новые дискретные фактор-топологические пространства путем сопряжения границ носителей и векторов решений граничных задач на носителях.

Для последних отношениями эквивалентности являются граничные условия.

В работе [13] обсуждаются построения таких пространств.

ОБ ОСОБЫХ СВОЙСТВАХ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ, ОПИСЫВАЮЩИХ РЕАЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ

Системы дифференциальных уравнений граничных задач механики сплошных сред, физики, термоэлектроупругости, магнитоупругости, теории поля и ряда других наук, достаточно высокоточно описывающих происходящие в природе процессы, характеризуются наличием дифференциальных операторов L_{mn} только второго и ниже порядков производных, входящих в состав дифференциального оператора L.

В условиях на границе для этого типа систем дифференциальных уравнений, в принятом выше обозначении, для граничных условий берется $s = 1$, т.е.

$$\Gamma_k(u_n), \quad k = 1, 2, \ldots, M.$$

В случае задачи Дирихле на границах задаются векторы перемещений, а в задаче Неймана – некоторые дифференциальные операторы от этих векторов. Однако самая главная особенность, которую вскрывает новый метод моделирования, – это расщепление оператора L на простейшие, описываемые волновыми уравнениями или уравнениями Гельмгольца вида

$$L_{mn} : \partial_m^1; \quad \partial_t^1; \quad \partial_t^1\partial_n^1; \quad \Delta; \quad \Delta - c_1;$$
$$\Delta - c_1\partial_t^1; \quad \Delta - c_2\partial c_t^2$$

и их подобными комбинациями. Это означает, что в макропроцессах, как и в квантовой механике, большинство природных процессов описывается уравнениями, подобными уравнению состояния элементарных частиц, Шрёдингера. Наверно в этом нет ничего удивительного, поскольку, как сказано в [15, с. 37], “квантовая механика содержит в себе классическую механику в качестве предельного случая”. Учитывая, что граничные задачи для всех указанных систем дифференциальных уравнений описываются разложениями по конечному числу упакованных блочных элементов волновых уравнений или уравнений Гельмгольца, открывается возможность унифицировать все решения этих граничных задач, а также конструировать новые. Важным является возможность рассмотрения граничных задач в неограниченных неклассических областях, недоступных для исследования другими методами.

МЕТОД БЛОЧНОГО ЭЛЕМЕНТА В НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧАХ

Нелинейные граничные задачи рассматриваемых природных процессов, не обязательно с малыми нелинейностями, могут исследоваться и решаться применением блочных элементов методом Ньютона–Канторовича.

Ниже приводится один из вариантов применения этого метода, опирающегося на вариант, изложенный в [2]. Пусть рассматривается операторное уравнение, представляющее систему дифференциальных уравнений в частных производных природных процессов с нелинейными составляющими, для которой поставлена граничная задача с линейными, ради простоты, граничными условиям, которая записана в векторном операторном виде

$$P(x) = 0.$$

Метод Ньютона–Канторовича позволяет при определенных требованиях к оператору $P(x)$ организовать итерационный процесс, который сходится к точному решению операторного уравнения по итерационной схеме

$$x_{n+1} = x_n - \left[P'(x_n)\right]^{-1}(P(x_n)).$$

Здесь $P'(x_n)$ – производная Фреше нелинейного оператора, x_0 – начальное приближение. Имеется ряд требований к оператору $P(x)$, которые обеспечивают сходимость итерационного процесса, являющегося аналогом метода касательных, причем даже при значительных нелинейностях. Условия можно найти в [2]. Приняв в качестве начального приближения упакованный блочный элемент линеаризованной граничной задачи и вычислив производную Фреше оператора $P(x)$, которая представляет граничную задачу для системы линейных дифференциальных уравнений, можно, сделав преобразования для обеспечения постоянства коэффициентов, если требуется, применить к ним преобразование Галёркина и прийти, как и выше, к решению последовательности скалярных граничных задач. В результате получим последовательность приближений, представляющих разложение по упакованным блочным элементам. Таким образом, для этого класса нелинейных граничных задач также получается разложение в виде последовательности упакованных блочных элементов волновых уравнений или уравнений Гельмгольца. Для получения приближенного решения нелинейной граничной задачи понадобится конечное число приближений, а для получения точного решения нелинейной граничной задачи решение будет представлено в виде бесконечного ряда упакованных блочных элементов.

Требование постоянства коэффициентов в системе дифференциальных уравнений не является непреодолимым. Оно связано с типом применяемых при переходе к функциональным уравнениям интегральных преобразований. В данном случае – преобразований Фурье. Например, в осесимметричных граничных задачах может применяться преобразование Бесселя, имеющее уравнения с переменными коэффициентами, тем не менее дальнейшее исследование проводится по уже описанному алгоритму, но для другого вида упакованных блочных элементов.

ВЫВОД

Изложенный в работе новый метод моделирования является обобщением и следствием уже опубликованных авторами работ, а также новых результатов, вызванных изучением подхода. Он же позволил выявить новые свойства упакованных блочных элементов, обобщающих некоторые природные процессы, что, возможно, приведет к применению этих результатов в иных областях. Построение точных решений граничных задач сложных дифференциальных уравнений является важным. Практика показала, что именно они ухватывают многие упущенные особенности решений, а потому и свойств природных процессов и явлений, которые по разным причинам “не замечают” численные методы.

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Отдельные фрагменты работы выполнены в рамках реализации Госзадания на 2021 г. Минобрнауки России (проект FZEN-2020-0020), ЮНЦ РАН (проект 00-20-13) № госрег. 01201354241, и при поддержке грантов РФФИ (19-41-230003, 19-41-230004, 19-48-230014, 18-05-80008).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Мандельброт Б.* Фрактальная геометрия природы. М.: Институт компьютерных исследований, 2002. 656 с.
2. *Канторович Л.В., Акилов Г.П.* Функциональный анализ. М.: Наука, 1977. 742 с.
3. *Wiener N., Hopf E.* Uber eine Klasse singularer Integralgleichungen. S. B. Preuss. Acad. Wiss. 1932. P. 696–706.
4. *Гохберг И.Ц., Крейн М.Г.* Системы интегральных уравнений на полупрямой, зависящие от разности аргументов // УМН. 1958. Т. 13. Вып. 2. С. 3–72.
5. *Rawlins A.D., Williams W.E.* Matrix Wiener-Hopf factorization // Quart. J. Mech. and Appl. Math. 1981. V. 34. № 1. P. 1–8.
6. *Нобл Б.* Метод Винера–Хопфа. М.: ИЛ, 1962. 280 с.
7. *Мусхелишвили Н.И.* Сингулярные интегральные уравнения. М., 1962. 600 с.
8. *Бабешко В.А., Бабешко О.М., Евдокимова О.В.* К теории блочного элемента // ДАН. 2009. Т. 427. № 2. С. 183–186. https://doi.org/10.1134/S1028335809070064
9. *Шабат Б.В.* Введение в комплексный анализ. Ч. I. М.: Наука, 1985, 336 с. Ч. II. М.: Наука, 1985. 464 с.
10. *Ефимов Н.В.* Введение в теорию внешних форм. М.: Наука, 1977. 88 с.
11. *Зорич В.А.* Математический анализ. Часть 2. М. МЦНМО, 2002. 788 с.

12. *Голованов Н.Н., Ильютко Д.П., Носовский Г.В., Фоменко А.Т.* Компьютерная геометрия. М.: Академия, 2006. 512 с.
13. *Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М.* Блочные элементы в граничных задачах для систем дифференциальных уравнений механики и физики в неклассических областях // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2021. Т. 498.
14. *Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М.* Метод блочного элемента в разложении решений сложных граничных задач механики // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2020. Т. 495. С. 34–38. https://doi.org/10.31857/S2686740020060048
15. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Т. 3. М.: Физматлит, 2001. 808 с.

FRACTAL PROPERTIES OF BLOCK ELEMENTS AND A NEW UNIVERSAL MODELING METHOD

Academician of the RAS V. A. Babeshko[a,b], O. V. Evdokimova[a], and O. M. Babeshko[b]

[a] *Southern Scientific Center Russian Academy of Science, Rostov-Don, Russian Federation*

[b] *Kuban State University, Krasnodar, Russian Federation*

Recent research by the authors on the development of the theory and applications of block elements in problems of mechanics and physics unexpectedly led to the possibility of interpreting another feature of these mechanical and mathematical objects. Following the idea of Benoit Mandelbrot about fractality, that is, self-similarity, in nature, the study of block elements as objects with fractal properties is carried out. It is shown that known natural phenomena, processes, and objects described by boundary value problems for partial differential equations and systems of such equations have self-similar packed block elements as solutions. Moreover, the special role of packed block elements generated by boundary value problems for the simplest wave equations, or Helmholtz equations, is highlighted. In the set of packed block elements, for boundary problems of natural processes, they are objects of a discrete topological space, have a maximum topology, representing all the other block elements of the set by their unions. At the same time, the wave equation or the Helmholtz equation are analogs of the Schrodinger equation, which is the basis of quantum mechanics. The Schrodinger equation describes the states of elementary particles in quantum mechanics. In this regard, there is a situation in which the primary basis of both the quantum world and the specified natural processes are self-similar named equations that perform their functions at the appropriate scales. Packed block elements generated by boundary value problems for the same equations as Schrodinger perform their functions in a continuous medium, and the states of elementary particles are described by similar equations in quantum mechanics.

Keywords: block element method, boundary value problems, systems of differential equations, Galerkin transform, nonlinear problems, quantum analogs

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 36–42

МЕХАНИКА

УДК 517.958:539.3(1):517.956.328

ВОЛНЫ РЭЛЕЯ В ОДНОРОДНОЙ ИЗОТРОПНОЙ ПОЛУПЛОСКОСТИ С ПЕРИОДИЧЕСКИМ КРАЕМ

© 2021 г. С. А. Назаров[1,*]

Представлено академиком РАН Н.Ф. Морозовым 05.05.5021 г.
Поступило 24.05.2021 г.
После доработки 24.05.2021 г.
Принято к публикации 31.05.2021 г.

Доказано существование волн Рэлея, распространяющихся вдоль периодической границы однородной изотропной полуплоскости с любым профилем края. Показано, что периодическое семейство трещин, перпендикулярных прямой границе полуплоскости, при возвастании их длин способно образовать любое наперед заданное количество линейно независимых локализованных волн в низкочастотном диапазоне спектра, в том числе и стоячих, не переносящих энергию вдоль края. Результаты получены при помощи вариационных и асимптотических методов спектрального анализа модельной задачи в полуполосе с искривленным торцом и с условиями квазипериодичности на боковых сторонах.

Ключевые слова: локализованные волны рэлеевского типа, периодический край изотропной полуплоскости, семейство краевых трещин

DOI: 10.31857/S268674002104009X

1. МОТИВИРОВКА

Изучению волн Рэлея [1] и Лэмба [2] посвящено большое количество публикаций (ср. обзор [3]), что в первую очередь вызвано их широким практическим применением в сейсмологии и сейсморазведке (см. монографии [4–6] и др.). Свойство локализации таких волн около поверхностей тел или продолговатых инородных включений (сварных или клеевых швов, рядов заклепок и пр.) породило разнообразные методы неразрушающего контроля накопления приграничных или внутренних дефектов и целостности соединений (см. работы [7–9] и многие другие).

Проверка наличия поверхностных волн и выявление их спектральных характеристик обычно проводится путем аналитического или численного решения краевых задач для канонических объектов – полупространства, полуслоя и т.п. В данном сообщении, как и в публикациях [10, 11], при помощи вариационных методов спектральной теории операторов (см., например, книгу [12]) установлено, что распространяющаяся рэлеевская волна существует при любом (разумеется, в том числе и прямом) профиле свободного периодического края однородной изотропной полуплоскости (рис. 1а), в частности, для периодического семейства краевых трещин (рис. 1б). Предложенный подход позволяет обнаружить низкочастотные локализованные волны; при этом установлено, что посредством удлинения трещин можно добиться возникновения любого числа подобных рэлеевских волн. Более того, прием постановки вспомогательных (искусственных) краевых условий (ср. статьи [13, 14]) позволил показать, что даже при нулевом угле падения семейство трещин способно производить захват упругих волн, т.е. порождать локализованные стоячие, не переносящие энергию, волны и опять-таки в любом заданном наперед количестве.

В рамках теории Флоке–Блоха–Гельфанда задача в полуплоскости сводится к (модельной) задаче в полуполосе с искривленным торцом и с условиями квазипериодичности на ее боковых сторонах, причем параметр Флоке $\alpha \in [-\pi, \pi]$ определяется по заданному углу падения φ. Если $\varphi \neq 0$, т.е $|\alpha| \in (0, \pi]$, то у модельной задачи может появиться дискретный спектр ниже точки отсечки $\kappa_\dagger$ непрерывного спектра σ_c^α. Точкам дискретного спектра σ_d^α отвечают исчезающие на бесконечности с экспоненциальной скоростью собственные моды, которые в свою очередь порождают локализованные волны Флоке–Рэлея (11). Найти частоты собственных колебаний полуполосы на интервале $(0, \kappa_\dagger)$ удалось путем построения пробной вектор-функции, у которой дробь Рэлея не превосходит $\kappa_\dagger^2$, и

[1] *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
**E-mail: srgnazarov@yahoo.co.uk*

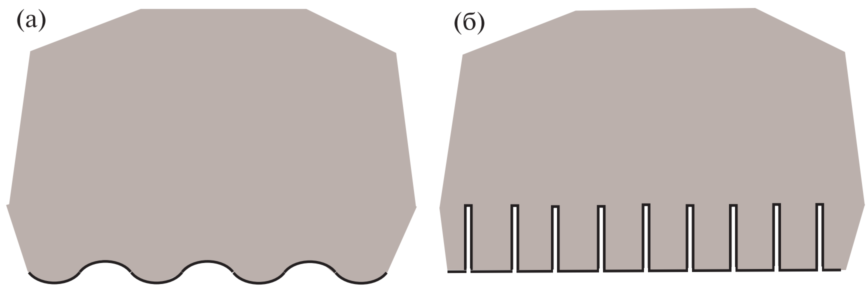


Рис. 1. Полуплоскости с периодическим краем (а) и с периодическим семейством трещин (б).

применения классического минимального принципа [12, теорема 10.2.1]. В случае длинных краевых трещин привлекаются асимптотические анзацы теории Кирхгофа тонких балок, которые позволяют установить множественность волн Рэлея.

Поскольку $\kappa_\dagger = 0$ и $\sigma_d^\alpha = \varnothing$ в случае $\varphi = 0$, при нулевом угле падения приходится искать собственные частоты, вкрапленные в непрерывный спектр. Это сделано посредством постановки новых искусственных краевых условий на продолжениях трещин, обеспечивающих положительную – созданную специально – точку отсечки, и при помощи необычных продолжений обнаруженной прежним способом затухающей собственной моды на всю поврежденную полуплоскость построить локализованные периодические (т.е. не переносящие энергии вдоль семейства трещин) волны Рэлея.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОПИСАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Изучается падение плоской поперечной упругой волны

$$u^{in}(x) = ae^{ik(x_1\cos\varphi + x_2\sin\varphi)}b^\varphi,\quad b^\varphi = (-\sin\varphi, \cos\varphi),\quad a \in \mathbb{R} \tag{1}$$

под углом $\varphi \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ на периодическую границу $\Gamma_H = \partial\Omega_H$ однородной изотропной полуплоскости

$$\Omega_H = \{x = (x_1, x_2)\colon x_1 \in \mathbb{R}, x_2 > H(x_1)\}. \tag{2}$$

При этом H – гладкая (для простоты; ср. п. 4–6 и рис. 1б) периодическая профильная функция. Масштабированием сведем период к единице и тем самым сделаем декартовы координаты x_j и все геометрические параметры безразмерными. Суммарное (падающая плюс отраженная волны) поле смещений $u = (u_1, u_2)$ ищется как решение системы уравнений теории упругости в полуполосе $\Pi_H = \{x \in \Omega_H\colon x_1 \in (0, 1)\}$

$$-\mu\Delta u(x) - (\lambda + \mu)\nabla\nabla\cdot u(x) = \rho\kappa^2 u(x),\quad x \in \Pi_H, \tag{3}$$

с условиями свободного края на искривленном торце $\varpi_H = \{x : x_1 \in (0, 1), x_2 = H(x_1)\}$

$$\sigma_j^{(n)}(u; x) = 0,\quad x \in \varpi_H,\quad j = 1, 2, \tag{4}$$

и условиями квазипериодичности Флоке, которым удовлетворяет и сама падающая волна (1),

$$\partial_1^p u(1, x_2) = e^{i\alpha}\partial_1^p u(0, x_2),\quad x_2 > H(0),\quad p = 0, 1. \tag{5}$$

Здесь $\partial_j = \frac{\partial}{\partial x_j}$, $\nabla = \mathrm{grad}$, $\nabla\cdot = \mathrm{div}$, $\Delta = \nabla\cdot\nabla$ – оператор Лапласа, $\lambda \ge 0$ и $\mu > 0$ – постоянные Ламе упругого материала, $\rho > 0$ – его плотность, а $\kappa > 0$ – частота колебаний. Кроме того, $\sigma_j^{(n)}$ и $n = (n_1, n_2)$ – компонента вектора нормальных напряжений единичный вектор внешней нормали на торце ϖ_H соответственно,

$$\sigma_j^{(n)}(u) = n_1\sigma_{1j}(u) + n_2\sigma_{2j}(u),\quad \sigma_{jk}(u) = \mu(\partial_j u_k + \partial_k u_j) + \lambda\delta_{j,k}\nabla\cdot u,\quad j, k = 1, 2. \tag{6}$$

При этом $\delta_{j,k}$ – символ Кронекера. Наконец, показатель $\alpha = k\cos\varphi$ включает волновое число $k = \kappa\sqrt[4]{\mu^{-1}\rho} > 0$, а замена $\alpha \mapsto \alpha - 2\pi m$ с целым сомножителем m не сказывается на условиях квазипериодичности (5). Далее зафиксируем параметр Флоке

$$\alpha \in (-\pi, \pi] \tag{7}$$

и освободим параметр κ, считая его спектральным.

Изучаются захваченные волны в полосе Π_ϖ, т.е. собственные вектор-функции $u \in H^{1,\alpha}_{per}(\Pi_H)$ задачи (3)–(5), удовлетворяющие интегральному тождеству

$$E(u, v; \Pi_H) = \rho\kappa^2(u, v)_{\Pi_H}\quad \forall v \in H^{1,\alpha}_{per}(\Pi_H), \tag{8}$$

где $H^{1,\alpha}_{per}(\Pi_H)$ – пространство Соболева вектор-функций, подчиненных устойчивому ($p = 0$) условию квазипериодичности (5), $(\cdot,\cdot)_{\Pi_H}$ – натуральное скалярное произведение в пространстве Лебега $L^2(\Pi_H)$, а $\frac{1}{2}E(u,u;\Pi_H)$ — упругая энергия, запасенная полуполосой, т.е.

$$E(u,u;\Pi_H) = \frac{\mu}{2}\sum_{j=1,2}\|\partial_j u_k + \partial_k u_j; L^2(\Pi_H)\|^2 + \\ + \lambda\|\nabla\cdot u; L^2(\Pi_H)\|^2,$$

$$E(u,v;\Pi_H) = \frac{1}{4}\big(E(u+v,u+v;\Pi_H) - \\ - E(u-v,u-v;\Pi_H)\big).$$

В силу ограничения (7) непрерывный спектр σ_c^α оператора задачи (8) — луч $[\kappa_\dagger^\alpha, +\infty)$ с точкой отсечки

$$\kappa_\dagger^\alpha = |\alpha|\sqrt{\frac{\mu}{\rho}}, \tag{9}$$

в частности, потому, что стоячая при $\kappa = \kappa_\dagger^\alpha$ и распространяющаяся при при $\kappa > \kappa_\dagger^\alpha$ волна

$$e^{i\beta x_2}B^\alpha(x_1), \tag{10}$$

где

$$\beta = \sqrt{\frac{\rho\kappa^2 - \mu\alpha^2}{\lambda + 2\mu}}, \quad B^\alpha(x_1) = e^{i\alpha x_1}b^0,$$

удовлетворяет системе (3) и условиям (5). На интервале $(0, \kappa_\dagger^\alpha)$ может располагаться дискретный спектр σ_d^α задачи (8), а отвечающие собственным частотам $\kappa_\bullet \in \sigma_d^\alpha$ собственные вектор-функции $u_\bullet^\alpha \in H_{per}^{1,\alpha}(\Pi_H)$ как раз и представляют собой захваченные волны. Если такая волна найдена, то формула

$$\mathcal{U}_\bullet^\alpha(x_1,x_2) = e^{i\alpha}u_\bullet^\alpha(x_1 - k, x_2), \\ x \in \Omega_H, \quad k \in \mathbb{Z} := \{0, \pm1, \pm2, \dots\} \tag{11}$$

представляет экспоненциально затухающую при $x_2 \to +\infty$ волну $\mathcal{U}_\bullet^\alpha$ во всей полуплоскости (2), т.е. локализованная около периодической границы и обладающая свойствами волн Рэлея и Лэмба. Вектор-функции (11) гладкие благодаря условиям квазипериодичности (5).

В п. 3 показано, что при ненулевом угле падения φ, т.е. при

$$\alpha \neq 0 \tag{12}$$

у задачи (3)–(5) обязательно есть нетривиальное решение $u_\bullet^\alpha \in H_{per}^{1,\alpha}(\Pi_H)$ на некоторой частоте $\kappa_\bullet \in (0, \kappa_\dagger^\alpha)$ из дискретного спектра σ_d^α.

В п. 4 рассматривается полуплоскость $\Omega_\perp^l$ с краевыми трещинами

$$T_j^l = \{x : x_1 = m/N, x_2 \in [0,l]\}, \\ j \in \mathbb{Z} = \{0, \pm1, \pm2, \dots\}, \quad N \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}, \tag{13}$$

и, в частности, показано, что при $\alpha \neq 0$ для всякого периода $1/N$ путем увеличения длин $l > 0$ трещин (13) можно поместить на интервал $(0, \omega_\dagger^\alpha)$ любое заданное наперед количество собственных частот. Иными словами, в полуплоскости с периодическим краевым повреждением существует множество поверхностных волн Рэлея в низкочастотном диапазоне спектра.

Случай $\alpha = 0$ (угол падения φ равен нулю) особый по нескольким причинам. Во-первых, непрерывный спектр σ_c^0 приобретает нулевую точку отсечки (9), и поэтому дискретный спектр σ_d^0 пуст. Во-вторых, если при $\varphi \neq 0$ волна (11) распространяется вдоль границы Γ_H, затухая в перпендикулярном направлении, то в случае $\varphi = 0$ найденное поле смещений (11) зависит периодически от переменной x_1 и исчезает с экспоненциальной скоростью при $x_2 \to +\infty$, т.е. оказывается стоячей волной, не переносящей энергию в направлении оси x_1.

В п. 5 при $\varphi = 0$ получен совершенно новый результат: при $N = 4$ доказано существование собственных частот, причем их количество неограниченно возрастает при удлинении трещин. Эти собственные частоты вкраплены в непрерывный спектр $\sigma_c^0 = [0, +\infty)$ и обладают природной неустойчивостью: сколь угодно малое возмущение оператора способно вывести их из спектра и тем самым превратить в точки комплексного резонанса. Именно поэтому в случае $\alpha \neq 0$ трещины $T_1^{l_N}, \dots, T_N^{l_N}$, вообще говоря, могут иметь разные длины $l_1, \dots, l_N$ при сохранении периодичности всего семейства, но в случае $\alpha = 0$ у трещин с четными и нечетными номерами длины обязательно равны l_{ev} и l_{od} соответственно.

В последнем разделе обсуждаются смежные вопросы.

3. ЗАХВАЧЕННЫЕ ВОЛНЫ

Согласно минимальному принципу [12, теорема 10.2.1] нижняя грань $\underline{\sigma}^\alpha$ всего спектра $\sigma^\alpha = \sigma_d^\alpha \cup \sigma_c^\alpha$ оператора A^α задачи (3)–(5) вычисляется по формуле

$$(\underline{\sigma}^\alpha)^2 = \inf_{u \in H_{per}^{1,\alpha}(\Pi_H)\setminus\{0\}} \frac{E(u,u;\Pi_H)}{\rho\|u; L^2(\Pi_H)\|^2} \tag{14}$$

с классической дробью Рэлея в правой части. Таким образом, $\kappa_\bullet \underline{\sigma}^\alpha$ — собственная частота из дискретной компоненты σ_d^α спектра в том и только в том случае, если при какой-то пробной вектор-функции $v \in H^{1,\alpha}_{per}(\Pi_H)$ выполнено неравенство

$$E(v, v; \Pi_H) < \rho(\omega^\alpha_\dagger)^2 \|v; L^2(\Pi_H)\|^2, \qquad (15)$$

а значит, инфимум из правой части (14) становится строго меньше $\kappa^2_\dagger$ и действительно оказывается первым (наименьшим) изолированным собственным числом задачи (8).

Построим требуемую пробную вектор-функцию. Положим

$$v^\varepsilon(x) = e^{-\varepsilon x_2} B^\alpha(x_1) + \sqrt{\varepsilon}\psi(x), \qquad (16)$$

где $\varepsilon > 0$ – малый параметр, а ψ – гладкая вектор-функция с малым носителем около некоторой точки $P \in \overline{\omega}_H$. Непосредственные вычисления показывают, что

$$\Big| E(v^\varepsilon, v^\varepsilon; \Pi_H) - \rho(k^\alpha_\dagger)^2 \|v^\varepsilon; L^2(\Pi_H)\|^2 + \\ + 2\sqrt{\varepsilon}\operatorname{Re} I(B^\alpha, \psi) \Big| \le c_\psi \varepsilon,$$

$$I(B^\alpha, \psi) = E(B^\alpha, \psi; \Pi_H) - \rho(\omega^\alpha_\dagger)^2 (B^\alpha, \psi)_{\Pi_H} = \\ = \int_{\overline{\omega}_H} \sigma^{(n)}(B^\alpha; x) \cdot \overline{\psi(x)} ds_x.$$

Здесь была применена формула Грина и использованы следующие факты: вектор-функция B^α удовлетворяет системе дифференциальных уравнений (3) и носитель $\operatorname{supp}\psi$ удален от боковых сторон полуполосы. Поскольку в силу соотношений (6) и (10) верны равенства

$$\sigma_{11}(B^0; x) = \sigma_{22}(B^0; x) = 0, \quad \sigma_{12}(B^0; x) = i\alpha\mu B^0(x_1),$$

всегда найдется точка $P \in \overline{\omega}_H$, в которой $\sigma^{(n)}(B^\alpha; P) \neq 0$. В итоге можно добиться неравенства $\operatorname{Re} I(B^\alpha, \psi) < 0$ путем подбора слагаемого $\sqrt{\varepsilon}\psi$ в пробной вектор-функции (16). Для нее выполнено соотношение (15), т.е. в случае (12) дискретный спектр σ^α_d заведомо не пуст при любом профиле H, и в полуплоскости Ω_H с периодическим краем существует хотя бы одна поверхностная волна Рэлея.

4. О МНОЖЕСТВЕННОСТИ ВОЛН РЭЛЕЯ В ПОЛУПЛОСКОСТИ С СЕМЕЙСТВОМ КРАЕВЫХ ТРЕЩИН

Приведенные в п. 3 рассуждения не требуют гладкости границы Γ_H, которая к тому же не обязана быть графиком. Рассмотрим задачу (8) в полуполосе $\Pi^l_\perp$ с трещинами T^l_0 и T^l_1 при $N = 1$, попадающими на границу $\partial\Pi^l_\perp$, т.е. условия квазипериодичности (5) назначены только при $x_2 > l$ и

$$H^{1,\alpha}_{per}(\Pi^l_\perp) = \{u \in H^1(\Pi_0): u(1, x_2) = e^{i\alpha} u(0, x_2), x_2 > l\}. \qquad (17)$$

В случае (12) для оценки кратности $\#\sigma^\alpha_d$ непустого дискретного спектра σ^α_d применим классический максиминимальный принцип

$$(\kappa^l_m)^2 = \max_{\mathcal{R}^l_m} \inf_{u \in \mathcal{R}^l_m \setminus \{0\}} \frac{E(u, u; \Pi^l_\perp)}{\rho \|u; L^2(\Pi^l_\perp)\|^2}. \qquad (18)$$

Здесь $\mathcal{R}^l_m$ – любое подпространство в $H^{1,\alpha}_{per}(\Pi^l_\perp)$ с коразмерностью $m-1$, в частности, $\mathcal{R}^l_1 = H^{1,\alpha}_{per}(\Pi^l_\perp)$. Известно [12, теорема 10.2.2]: если величина (18) строго меньше $(\kappa^\alpha_\dagger)^2$, то $\kappa^l_m \in \sigma^\alpha_d$ – собственная частота и $\#\sigma^\alpha_d \ge m$.

Рассмотрим вспомогательную одномерную задачу, описывающую продольные колебания балки с малой относительной толщиной $1/\ell$

$$\begin{gathered} -\mu\partial^2_2 W_l(x_2) = \rho K^2_l W_l(x_2), \quad x_2 \in (0, l), \\ W_l(0) = W_l(l) = 0. \end{gathered} \qquad (19)$$

Ее собственные частоты

$$0 < K^{(1)}_l < K^{(2)}_l < \ldots < K^{(m)}_l < \ldots \to +\infty \qquad (20)$$

имеют вид $K^{(m)}_l = l^{-1} K^{(m)}_1$, где $K^{(m)}_1$ – собственная частота той же задачи (19) при $l = 1$, а соответствующие собственные функции можно подчинить условиям ортогональности и нормировки

$$(W^{(p)}_l, W^{(q)}_l)_{(0,l)} = \delta_{p,q}, \quad p, q \in \mathbb{N}.$$

Обозначим R^l_m линейную оболочку вектор-функций $w^{(p)}_{(l)} = (0, W^{(p)}_l)$, $p = 1, \ldots, m$, продолженных нулем с прямоугольника $(0,1)\times(0,l)$ на полуполосу $\Pi_\perp$. Ясно, что $R^m_l \subset H^{1,\alpha}_{per}(\Pi^l_\perp)$ и в силу равенств $\dim R^l_m = m$ и $\operatorname{codim}\mathcal{R}^l_m = m-1$ всякое подпространство $\mathcal{R}^l_m$ в пространстве (17) содержит нетривиальную линейную комбинацию $\mathbf{w}^{(m)}_{(l)}$ вектор-функций $w^{(1)}_{(l)}, \ldots, w^{(m)}_{(l)}$, построенную по линейной комбинации $\mathbf{W}^{(m)}_{(l)}$ собственных функций $W^{(1)}_l, \ldots, W^{(m)}_l$. Таким образом,

$$\max_{\mathcal{R}^l_m} \frac{E(\mathbf{w}^{(m)}_{(l)}, \mathbf{w}^{(m)}_{(l)}; \Pi^l_\perp)}{\rho \|\mathbf{w}^{(m)}_{(l)}; L^2(\Pi^l_\perp)\|^2} = \\ = \max_{\mathcal{R}^l_m} \frac{\mu \|\partial_2 \mathbf{W}^{(m)}_{(l)}; L^2(0,l)\|^2}{\rho \|\mathbf{W}^{(m)}_{(l)}; L^2(0,l)\|^2} \le (K^{(m)}_l)^2 = \frac{1}{l^2}(K^m_1)^2.$$

Итак, при большом l величина (18) попадает на интервал $(0,(\kappa_{\dagger}^{\alpha})^2)$, а значит, $\#\sigma_d^{\alpha} \geq m$ для длин l, превосходящих некоторую величину $l_m > 0$. Иными словами, при увеличении длин трещин количество линейно независимых волн Рэлея неограниченно возрастает.

Полученная оценка кратности $\#\sigma_d^{\alpha}$, обеспечившая объявленный результат, весьма приблизительна по нескольким причинам. Во-первых, в задаче (19) условие $W_l(0) = 0$ можно заменить условием $\partial_2 W_l(0) = 0$, уменьшив тем самым каждый член последовательности (20). Во-вторых, вместо одномерной модели (19) продольной деформации балки можно оперировать задачей об ее изгибе

$$D\partial_2^4 W_l(x_2) = \rho K_l^2 W_l(x_2), \quad x_2 \in (0,l),$$

$$W_l(0) = \partial_2 W_l(0) = 0, \quad W_l(l) = \partial_2 W_l(l) = 0.$$

Здесь $D = \dfrac{\mu}{3}\dfrac{\lambda+\mu}{\lambda+2\mu}$ – приведенная жесткость балки на изгиб. Понятно, что собственные частоты $K_l^{(m)} = l^{-2}K_1^{(m)}$ этой задачи убывают при $l \to +\infty$ быстрее, чем собственные частоты прежней задачи (19).

5. ЗАХВАЧЕННЫЕ ВОЛНЫ, НЕ ПЕРЕНОСЯЩИЕ ЭНЕРГИЮ

При $\alpha = 0$ рассмотрим зауженную полуполосу $\Pi_{\sharp}^l = \left(\dfrac{1}{4},\dfrac{1}{2}\right)\times\mathbb{R}$ с трещинами T_1^l и T_2^l, заданными формулой (13) с $N = 4$, на ее боковых сторонах. Вместо условий периодичности (5), $\alpha = 0$, назначим на лучах $\Upsilon_j = \left\{x\colon x_1 = \dfrac{j}{4}, x_2 > l\right\}, j = 1, 2$, искусственные краевые условия

$$u_1^{\sharp}\left(\frac{1}{4},x_2\right) = 0, \quad \sigma_{11}\left(u^{\sharp};\frac{1}{4},x_2\right) = 0, \quad x_2 > l, \qquad (21)$$

$$u_2^{\sharp}\left(\frac{1}{2},x_2\right) = 0, \quad \sigma_{12}\left(u^{\sharp};\frac{1}{2},x_2\right) = 0, \quad x_2 > l. \qquad (22)$$

Эти условия обладают замечательными свойствами. Во-первых, непрерывный спектр оператора аналогичной (8) задачи

$$E(u^{\sharp},v^{\sharp};\Pi_{\sharp}^l) = \rho(\kappa^{\sharp})^2(u^{\sharp},v^{\sharp})_{\Pi_{\sharp}^l} \quad \forall v^{\sharp} \in H_0^1(\Pi_{\sharp}^l) \quad (23)$$

на функциональном пространстве, включающем первые (устойчивые – в смещениях) краевые условия из групп (21) и (22),

$$H_0^1(\Pi_{\sharp}^l) = \left\{u \in H^1(\Pi_{\sharp}^l)\colon u_1\left(\frac{1}{4},x_2\right) = \right. \\ \left. = u_2\left(\frac{1}{2},x_2\right) = 0,\ x_2 > l,\ j = 1, 2\right\} \qquad (24)$$

приобретает положительную точку отсечки $\kappa_{\dagger}^{\sharp} > 0$ непрерывного спектра, так как только тривиальное $(c_0 = c_1 = c_2 = 0)$ жесткое смещение $(c_1 - c_0x_2, c_2 + c_0x_1)$ удовлетворяет обоим краевым условиям (21) и (22) (ср. конструкции из работы [14]). Во-вторых, нечетное для $u_1^{\sharp}$ и четное для $u_2^{\sharp}$ продолжения по переменной $x_1 - \dfrac{1}{4}$ сохраняет гладкость поля u на линии $\left\{x\colon x_2 = \dfrac{1}{4}\right\}$ и уравнения (3) для него в соседней полуполосе $\left(0,\dfrac{1}{4}\right)\times\mathbb{R}_+$. То же самое верно в случае нечетного для $u_2^{\sharp}$ и четного для $u_1^{\sharp}$ продолжений через прямую $\left\{x\colon x_2 = \dfrac{1}{2}\right\}$. Таким образом, комбинируя указанные способы продолжений, переделываем решение $u^{\sharp}$ задачи (23) из пространства (24) в решение $u \in H_{per}^{1,0}(\Pi_{\perp}^l)$ задачи (8), 1-периодическое по переменной x_1 благодаря наличию четырех трещин (также можно взять $N = 8,12,16,\ldots$ в определении (13)).

Осталось применить к задаче (23) аналогичный (18) максиминимальный принцип, по прежней схеме соорудив пространство R_m^l пробных вектор-функций из собственных функций одномерной задачи (19). В результате при достаточно большом размере l обнаруживаем любое заданное наперед количество точек дискретного спектра задачи (23) в полуполосе $\Pi_{\sharp}^l$, которые оказываются вкрапленными в непрерывный спектр σ_c^0 собственными частотами задачи (8) при $\alpha = 0$ в единичной полуполосе $\Pi_{\perp}^l$ с четырьмя трещинами. Соответственно в полуплоскости $\Omega_{\perp}^l$ с периодическим семейством краевых трещин (13) при $N = 4$ найдены m стоячих (1-периодических по переменной x_1 и потому не переносящих энергию) волн с экспоненциальным затуханием при $x_2 \to +\infty$.

Подчеркнем, что выбранное число $N = 4$ – некая условность, поскольку изменением масштаба в единичную полосу можно поместить любое количество трещин (13), изменив при этом их длину ℓ.

6. ДОСТУПНЫЕ ОБОБЩЕНИЯ И ОТКРЫТЫЕ ВОПРОСЫ

Двумерная задача теории упругости в полуплоскости (2) получается исключением координаты x_3 из декартовой системы в пространстве $\mathbb{R}^3$ и деплакации u_3 из вектора смещений. При этом требуется, чтобы фронт плоской волны (1) был параллелен образующей периодической в направлении x_1 поверхности, т.е. волновое число k_3 в направлении оси x_3 равно нулю. Вместе с тем предложенные подходы с мелкими изменениями годятся и в случае системы трех дифференциальных уравнений теории упругости при $k_3 \neq 0$. Кроме того, результаты из п. 2 без особого труда приспосабливаются к анизотропным средам с периодическими неоднородностями, стабилизирующимися на бесконечности с экспоненциальной скоростью.

Результаты из п. 2 остаются в силе и при периодической приграничной перфорации полуплоскости $\mathbb{R}^2_+$ отверстиями

$$\omega_j = \{x\colon (x_1 - j, x_2) \in \omega\}, \quad j \in \mathbb{Z}, \tag{25}$$

где ω – область внутри полуполосы Π_0, ограниченная кусочно-гладким контуром. Более того, в случае $\alpha \neq 0$ непустота дискретного спектра сохраняется и для мягких тяжелых включений (25), однако при жеском, но легком инородном материале вариационное методы не дают искомого соотношения $\sigma_d^\alpha \neq \varnothing$.

Продольная волна (вектор $b^\varphi = (\cos\varphi, \sin\varphi)$ в формуле (1)) распространяется на частоте

$$\kappa_\ddagger = \alpha\sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} \tag{26}$$

выше точки отсечки (9). Внутри непрерывного спектра σ_c^α оператора задачи (8) применение вариационных методов невозможно, а при создании искусственной точки отсечки (ср. п. 5) классификация продольные/поперечные бесполезна. Вместе с тем в случае $H = 0$, $\lambda = 0$ на пороге (26) имеется ограниченное решение $(e^{i\alpha x_1}, 0)$ задачи (3)–(5) при $\kappa = \kappa_\ddagger$ в полуполосе Π_0, т.е. реализуется пороговый резонанс [15, 16], провоцирующий разнообразные спектральные аномалии (см. обзор [17]). В частности, возможно образование околопороговой собственной частоты путем точной настройки пологого (ε – малый параметр) периодического профиля $H(x_1) = \varepsilon h(x_1)$. Остался открытым вопрос о возможности появления порогового резонанса в точке отсечки (9) при каком-то профиле H торца $\overline{\omega}_H$, т.е. образования у задачи (3)–(5) ограниченного решения – почти стоячей или захваченной волны.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 17–11–01003).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Rayleigh J.W.S.* On waves propagated along the plane surface of an elastic solid // Proc. London Math. Soc. 1885. V. 17. 253. P. 4–11.
2. *Lamb H.* On waves in an elastic plate // Proc. Roy. Soc. 1917. V. A93. P. 114–128.
3. *Lawrie J., Kaplunov J.* Edge waves and resonance on elastic structures: An overview // Math. Mech. of Solids. 2012. V. 17. 1. P. 4–16.
4. *Викторов И.А.* Звуковые поверхностные волны в твердых телах. М.: Наука, 1981. 287 с.
5. *Kaplunov J.D., Kossovich L.Y., Nolde E.V.* Dynamics of thin walled elastic bodies. SanDiego: Academic Press, 1997. 226 p.
6. *Михасев Г.И., Товстик П.Е.* Локализованные колебания и волны в тонких оболочках. Асимптотические методы. М: Физматлит, 2009. 292 с.
7. *Коненков Ю. К.* Об изгибной волне "рэлеевского" типа // Акустический журнал. 1960. Т. 6. С. 124–126.
8. *Kim J.-Y., Rokhlin S.I.* Surface acoustic wave measurements of small fatigue cracks initiated from a surface cavity // Intern. J. of Solids and Structures. 2002. V. 39. P. 1487–1504.
9. *Krushynska A.A.* Flexural edge waves in semi-infinite elastic plates // J. of Sound and Vibration. 2011. V. 330. P. 1964–1976.
10. *Камоцкий И.В., Назаров С.А.* Упругие волны, локализованные около периодических семейств дефектов // ДАН. 1999. Т. 368. № 6. С. 771–773.
11. *Камоцкий И.В., Киселев А.П.* Энергетический подход к доказательству существования волн Релея в анизотропном упругом полупространстве // Прикл. матем. и механика. 2009. Т. 73. № 4. С. 645–654.
12. *Бирман М.Ш., Соломяк М.З.* Спектральная теория самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве. Л.: Изд-во Ленингр. ун–та, 1980.
13. *Evans D.V., Levitin M., Vasil'ev D.* Existence theorems for trapped modes // J. Fluid Mech. 1994. V. 261. P. 21–31.
14. *Назаров С.А.* Ловушечные моды для цилиндрического упругого волновода с демпфирующей прокладкой // ЖВМиМФ. 2008. Т. 48. № 5. С. 863–881.
15. *Molchanov S., Vainberg B.* Scattering solutions in networks of thin fibers: small diameter asymptotics // Comm. Math. Phys. 2007. V. 273. № 2. P. 533—-559.
16. *Назаров С.А.* Пороговые резонансы и виртуальные уровни в спектре цилиндрических и периодических волноводов // Известия РАН. Серия матем. 2020. Т. 84. № 6. С. 3–60.
17. *Назаров С.А.* Аномалии рассеяния акустических волн вблизи точек отсечки непрерывного спектра (обзор) // Акустический журнал. 2020. Т. 66. № 5. С. 489–508.

REYLEIGH WAVES IN A HOMOGENEOUS ISOTROPIC HALF-PLANE WITH A PERIODIC EDGE

S. A. Nazarov[a]

[a] *Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS N.F. Morozov

The existence is proved for Reyleigh's waves propagating along a periodic edge of a homogeneous isotropic half-plane with arbitrary profile. It is demonstrated that a periodic family of cracks which are perpendicular to the half-plane boundary and have a sufficiently large length, is able to provide any given number of linearly independent localized waves, in particular, standing waves that do not drive energy along the edge. These results are obtained by means of variational and asymptotic methods in the spectral analysis of a model problem in a half-strip with a curved end and with quasi-periodicity conditions at its lateral sides.

Keywords: localized waves of Rayleigh's type, periodic edge of isotropic half-plane, family of edge cracks

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 43–47

МЕХАНИКА

УДК 532.6

МОСТИКОВЫЙ РЕЖИМ ТЕЧЕНИЯ В МИКРОКАНАЛАХ

© 2021 г. Ф. В. Роньшин[1,*], Е. А. Чиннов[1], Ю. А. Дементьев[1], О. А. Кабов[1]

Представлено академиком РАН С.В. Алексеенко 28.05.2021 г.
Поступило 28.05.2021 г.
После доработки 28.05.2021 г.
Принято к публикации 03.06.2021 г.

В результате исследований двухфазных потоков в щелевых микроканалах обнаружен и изучен новый режим течения – мостиковый. Мостики представляют собой вертикальные перемычки между пленками жидкости, расположенными на нижней и верхней сторонах канала. Установлено, что с увеличением расходов газа и жидкости мостики начинают деформироваться, а затем разрушаться. Определены критические числа Вебера, характерные для деформации и разрушения жидкостных мостиков. Предложена новая классификация режимов двухфазного течения в микроканалах на основе полученных экспериментальных данных.

Ключевые слова: мостиковый режим течения, плоский микроканал, двухфазный поток

DOI: 10.31857/S2686740021040118

В настоящее время разрабатывается значительное количество микрофлюидных устройств: датчики расхода, клапаны, системы обработки жидкостей для химического анализа, насосы, разделительные и смешивающие каналы, детекторы химических веществ. Устройства микрофлюидики создаются для генерации и контроля монодисперсных капель и пузырьков. Данная область является одной из наиболее быстроразвивающихся благодаря широкому применению в биологии [1, 2], химии [3] и нанотехнологиях [4, 5]. Кроме того, в настоящее время происходит миниатюризация теплообменных устройств, вследствие чего микроканальные системы охлаждения получают широкое применение благодаря высокой эффективности [6].

Обзор работ по исследованию двухфазного течения в микроканальных системах представлен в [7, 8]. Показано, что в микроканальных системах капиллярные силы оказывают существенное влияние на двухфазное течение, появляются новые режимы и неустойчивости. В работе [9] показано, что с уменьшением размеров канала наблюдается тенденция образования капель в каналах. Детальный обзор работ по динамике капель в различных условиях в двухфазных системах недавно опубликован в [10]. В трубах диаметром более 1 мм при высоких скоростях газа (более 10 м/с) капли формируются при переходе от кольцевого режима к дисперсно-кольцевому. С уменьшением размеров каналов капли начинают формироваться и при меньших скоростях вследствие преобладания капиллярных сил. В плоских микроканалах обнаружен режим, в котором наблюдаются вертикальные мостики жидкости между верхней и нижней стенками микроканала. Данный режим наблюдается только в условиях хорошей смачиваемости, когда контактный угол близок к нулю. Целью данной работы является детальное изучение мостиков, представляющих вертикальные жидкостные перемычки, и режимов течения, в которых они формируются.

Рабочий участок, используемый в эксперименте, состоит из двух пластин (стекла и нержавеющей стали), между которыми зажимаются прокладки, регулирующие высоту микроканала. В нижней пластине из нержавеющей стали создано плоское сопло для ввода жидкости. При исследовании газожидкостного течения по каналу движется газ, а снизу под небольшим углом (11°, плавный смеситель) подводится жидкость. Таким образом, создается плоский микроканал с соотношением сторон более 100. В работе использовались микроканалы следующего поперечного сечения: 0.13 × 20 мм, 0.1 × 30 мм и 0.16 × 20 мм. В качестве газа использовался азот высокой чистоты. В качестве рабочих жидкостей использовались вода, изопропиловый спирт и FC-72. Перед экспериментом через микроканал длительное время прокачивалась жидкость для обеспечения условий хорошей смачиваемости. Газ поступает в микроканал из баллона, расход контролируется при по-

[1] *Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия*

**E-mail: f.ronshin@gmail.com*

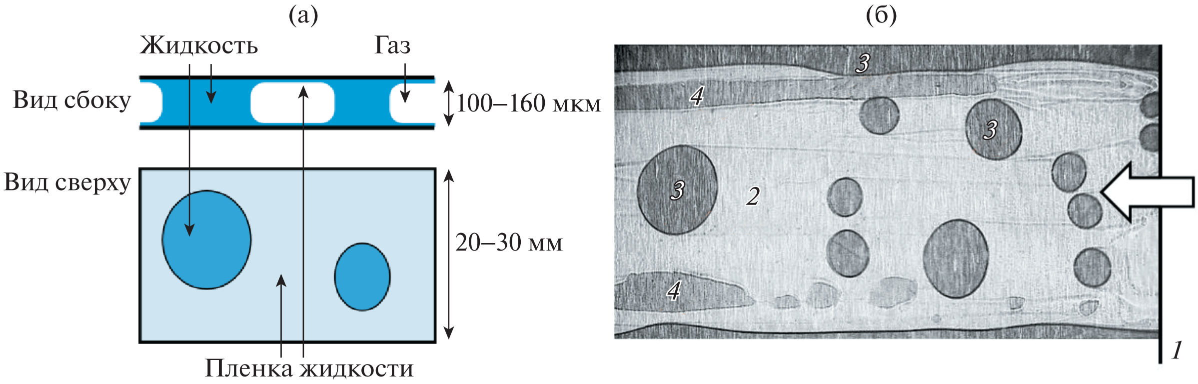


Рис. 1. Мостиковый режим течения: (а) схематическое изображение (б) шлирен-фотография в микроканале сечением 0.13 × 20 мм, жидкость – изопропиловый спирт, газ – азот. Обозначения: *1* – жидкостное сопло, *2* – пленки жидкости на верхней и нижней стенках микроканала, *3* – области, заполненные жидкостью, *4* – осушенные области.

мощи высокоточных регуляторов расхода Bronkhorst в диапазоне от 20 до 10 000 мл/мин. Жидкость подается в микроканал при помощи высокоточного шприцевого насоса Cole-Parmer EW-74905-54. Визуализация двухфазного течения происходит при помощи модификации шлирен-метода, описанной в работе [11]. Для визуализации быстропротекающих процессов в микроканале шлирен-система была модернизирована при помощи скоростной камеры Vision Research Phantom v.7.0 со скоростью съемки 1000 кадров в секунду с пространственным разрешением 50 мкм/пиксель. Далее полученные изображения обрабатываются и вычисляются параметры двухфазного течения.

Выполнено экспериментальное исследование газожидкостного течения. Обнаружена широкая область режимов течения, когда по микроканалу движутся жидкостные мостики (плоские “капли”). Верхняя и нижняя стенка микроканала при этом смочены, жидкостные перемычки движутся по пленкам жидкости. Характерный диаметр таких жидкостных мостиков может быть порядка ширины микроканала (несколько миллиметров), при этом их высота соответствует высоте микроканала (100, 130 и 160 мкм). Таким образом, в данном исследовании мостики предполагаются плоскими и исследуется плоское течение. На рис. 1 показан мостиковый режим течения (а) схематически и (б) шлирен-фотография в канале 0.13 × 20 мм, где в качестве жидкости используется изопропиловый спирт, а в качестве газа – азот. Формирование мостиков жидкости, как правило, происходит непосредственно возле жидкостного сопла вследствие фронтальной неустойчивости [12]. Далее мостики скользят по пленкам жидкости, оставляя за собой характерные следы (утолщение пленки жидкости). Также мостики могут отделяться от жидкости, движущейся вдоль боковых стенок канала вследствие развития волновой неустойчивости (Кельвина–Гельмгольца) [12]. Скорость жидкости, движущейся вдоль боковых стенок канала, меньше скорости газового потока в центральной части канала, за счет этого наблюдаются характерные волны. Когда амплитуда волн возрастает, наблюдаются выбросы жидкости в газовый поток, которые затем приобретают характерную эллипсоидальную форму. При этом форма мостиков, образованных вследствие этих двух различных механизмов (боковая и фронтальная неустойчивости) не отличается.

При небольших расходах газа и жидкости мостики имеют форму, близкую к кругу. С увеличением расходов мостики начинают деформироваться, приобретая эллипсоидальную форму. При дальнейшем увеличении расходов газа и жидкости мостики большого размера начинают разрушаться, формируя два мостика меньшего размера. Таким образом, можно выделить третий механизм формирования мостиков – вследствие разрушения крупных мостиков при достижении критического значения деформации. Исследована деформация мостиков жидкости, когда они имеют эллипсоидальную форму, в зависимости от числа Вебера смеси. Деформация определялась следующим образом:

$$\mathrm{Def} = \frac{a}{b}, \tag{1}$$

где a соответствует большой полуоси эллипсоидального мостика, а b – малой полуоси. Число Вебера определялось следующим образом:

$$\mathrm{We} = \frac{\rho D U_M^2}{\sigma}, \tag{2}$$

где ρ – плотность газа, $D = \sqrt{ab}$ – эквивалентный диаметр, $U_M = U_{SL} + U_{SG}$ – приведенная скорость смеси, σ – поверхностное натяжение. Приведенные скорости газа U_{SG} и жидкости U_{SL} определялись как объемный расход газа и жидкости соответственно, деленный на площадь поперечного

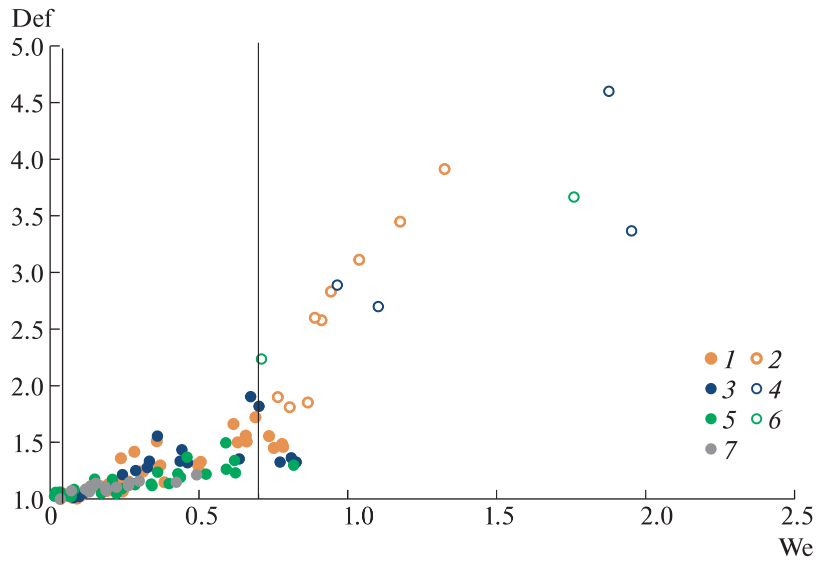


Рис. 2. Зависимость деформации мостиков от числа Вебера смеси. (*1*, *2*) – микроканал сечением 0.16 × 20 мм, жидкость FC-72, газ – азот, *1* – деформация мостиков; *2* – разрушение мостиков; (*3*, *4*) – микроканал сечением 0.13 × 20 мм, жидкость – изопропиловый спирт, газ – азот, *3* – деформация мостиков; *4* – разрушение мостиков; (*5*, *6*) – микроканал сечением 0.13 × 20 мм, жидкость FC-72, газ – азот; *5* – деформация мостиков; *6* – разрушение мостиков; *7* – микроканал сечением 0.1 × 30 мм, жидкость – вода, газ – азот, деформация мостиков.

сечения канала. На рис. 2 показаны значения деформации мостиков жидкости в зависимости от числа Вебера смеси для всех используемых рабочих жидкостей (вода, изопропиловый спирт, FC-72) и всех исследуемых в работе микроканалов (сечения 0.1 × 30 мм, 0.13 × 20 мм и 0.16 × 20 мм). Можно выделить три характерные области на графике. Первая, при небольших числах Вебера (We < 0.1), когда мостики имеют форму близкую к кругу. Деформация в этом случае не превышает 1%. С увеличением числа Вебера мостики начинают деформироваться. В диапазоне чисел Вебера 0.1 < We < 0.7 наблюдаются эллипсоидальные мостики жидкости, с ростом числа Вебера деформация возрастает. При этом, когда мостики формируются непосредственно возле жидкостного сопла, значение их деформации незначительное и возрастает по мере движения по каналу, пока не достигнет постоянного значения. Измерения проводились в тот момент, когда форма мостика переставала меняться. При больших значениях деформации разброс значений на графике выше за счет того, что форма мостика может незначительно изменяться со временем. При числах Вебера We > 0.7 деформация мостиков становится настолько большой, что возрастает со временем, а затем мостики разрушаются на два мостика меньшего размера. В этом случае деформация мостиков измерялась в момент перед распадом, когда они имеют форму, близкую к эллипсу. На графике мостики, которые после деформации распадались, указаны незакрашенными маркерами. Большой разброс на графике объясняется тем, что перед разрушением деформация мостика существенно изменяется.

Поперечные размеры таких мостиков существенно зависят от скоростей газа и жидкости. На рис. 3 представлены распределения размеров мостиков в микроканале сечением 0.16 × 20 мм, газ – азот, жидкость – FC-72 в зависимости от приведенных скоростей газа и жидкости. С увеличением приведенной скорости газа интенсивность формирования мостиков возрастает, а их характерный размер уменьшается. Связано это с тем, что при высоких расходах газа мостики большего размера, как правило, разрушаются, формируя мостики меньшего размера. При фиксированной приведенной скорости газа с увеличением приведенной скорости жидкости наблюдается обратная тенденция. С увеличением приведенной скорости жидкости наблюдается тенденция формирования мостиков большего размера. Связано это с тем, что газосодержание в потоке уменьшается и мостики начинают сливаться, формируя мостики большего размера. Механизмы этого процесса близки к механизмам коалесценции пузырей при пузырьковом режиме течения, когда с увеличением газосодержания пузыри начинают сливаться.

На рис. 4 представлена режимная карта двухфазных течений в микроканале сечением 0.13 × 20 мм, газ – азот, жидкость – FC-72. Маркерами на графике показаны классические режимы, характерные для плоских микроканалов: струйный, пузырьковый, вспененный, раздельный и кольцевой. Подробно методика определения границ режимов двухфазных течений описана в работе [10]. Результаты измерений показывают, что в плоских микроканалах в условиях хорошей смачиваемости необходима новая классификация

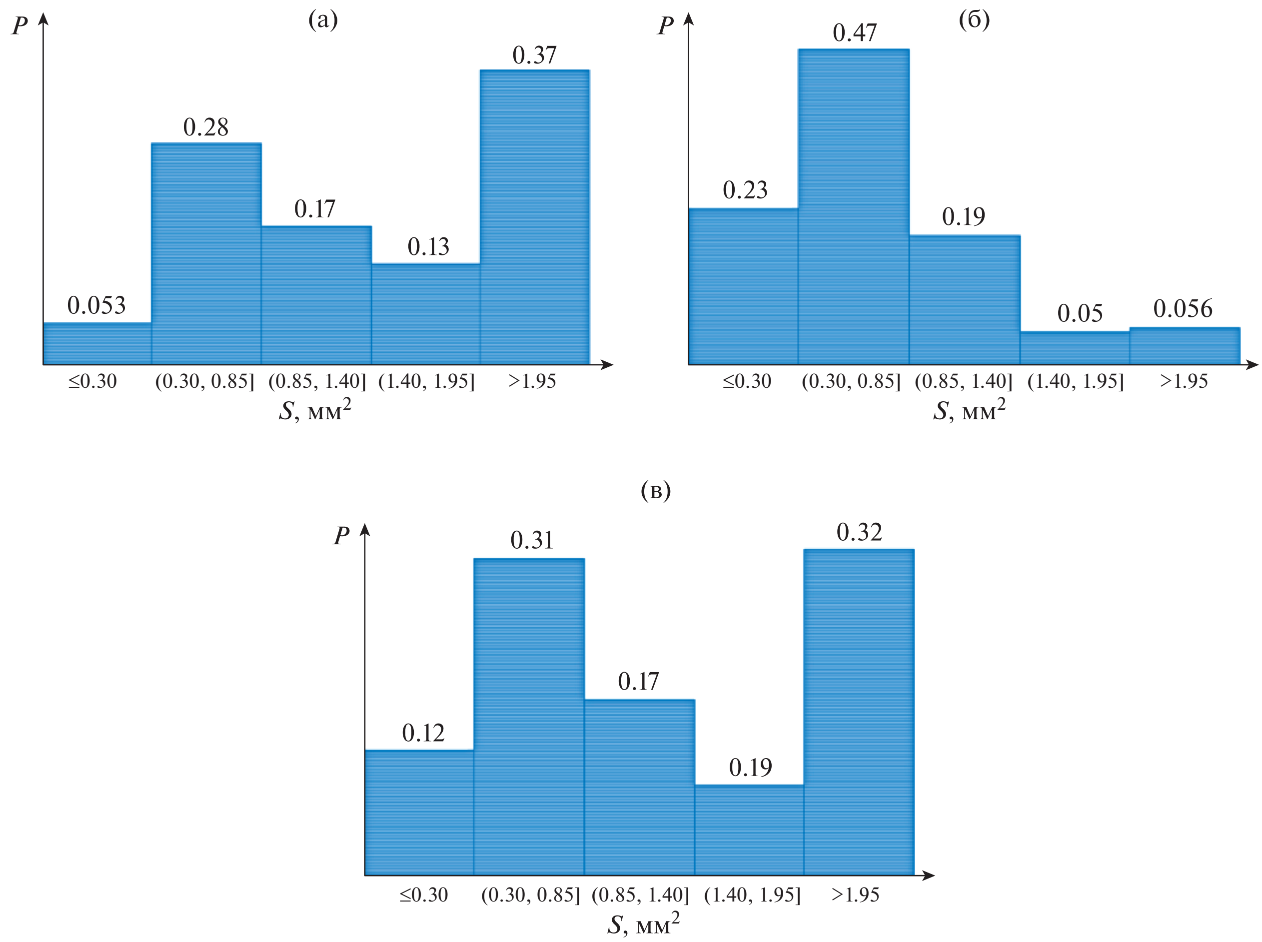


Рис. 3. Распределение площади мостиков в микроканале сечением 0.16 × 20 мм, газ – азот, жидкость – FC-72. (а) U_{SL} = = 0.0056 м/с; U_{SG} = 0.28 м/с; (б) U_{SL} = 0.0056 м/с; U_{SG} = 1.11 м/с; (в) U_{SL} = 0.028 м/с; U_{SG} = 1.11 м/с. S – интервал размеров мостиков; P – вероятность нахождения размера мостика в заданном интервале.

режимов двухфазных течений. Пузырьковый режим течения наблюдается, когда по микроканалу движутся пузыри газа, характерный размер которых меньше ширины микроканала. Мостиковый режим течения, или инверсионный, наблюдается, когда вертикальные перемычки жидкости между верхней и нижней стенками канала движутся по пленкам жидкости. Если рассматривать течение плоским, мостиковый режим течения напоминает инвертированный пузырьковый режим течения, когда вместо газовых пузырей наблюдаются вертикальные жидкостные перемычки (мостики). Область мостикового режима течения существенно зависит от высоты микроканала и смачиваемости поверхности, так как данный режим формируется только, когда обе стенки микроканала смочены. На рис. 4 зона мостикового режима течения закрашена. При использовании воды в качестве рабочей жидкости мостики впервые появляются в микроканале высотой 440 мкм [9] только при высоких расходах газа и жидкости. При уменьшении высоты канала интенсивность образования мостиков возрастает. В канале высотой 56 мкм такие мостики формируются практически во всем диапазоне расходов газа и жидкости [11]. В плоских микроканалах мостиковый режим течения можно разделить на три подрежима: струйный, вспененный и кольцевой. При высоких приведенных скоростях газа и небольших приведенных скоростях жидкости наблюдается раздельный режим, когда по нижней стенке канала движется пленка жидкости, увлекаемая потоком газа. Мостиков жидкости в таком режиме не наблюдается, так как верхняя стенка микроканала остается осушенной.

Таким образом, в настоящей работе проведено комплексное экспериментальное исследование нового режима двухфазных течений – мостикового, характерного для плоских микроканалов. Обнаружено три механизма формирования мостиков жидкости: отделение мостиков от жидкости, движущейся по боковым сторонам канала вследствие развития неустойчивости Кельвина–Гельмгольца; формирование непосредственно возле сопла жидкости (фронтальная неустойчивость); и вследствие разрушения вертикальных жидкостных перемычек

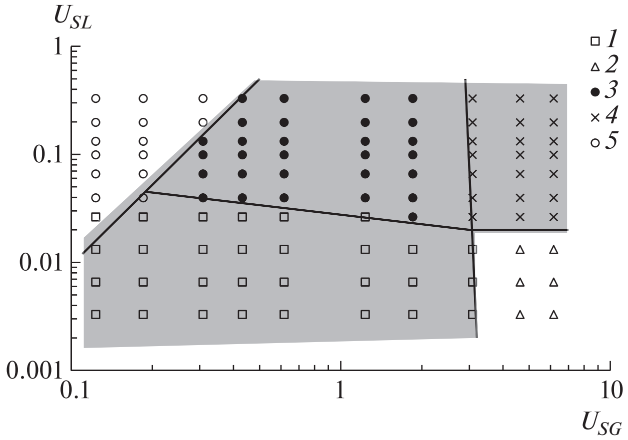


Рис. 4. Карта режимов двухфазных течений в микроканале сечением 0.13 × 20 мм^2, газ – азот, жидкость – FC-72. Режимы течения: *1* – струйный, *2* – раздельный, *3* – вспененный, *4* – кольцевой, *5* – пузырьковый. Закрашенная область соответствует области мостикового режима течения.

при деформации. Определены критические числа Вебера, при которых мостики начинают деформироваться и разрушаться. Предложена новая классификация режимов: пузырьковый (по каналу движутся пузырьки газа), инверсионный, или мостиковый (когда в классических режимах наблюдается движение мостиков жидкости, представляющих из себя вертикальные жидкостные перемычки) и раздельный режим, не содержащий мостики.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (соглашение 19-79-00256). Шлирен-система предоставлена в рамках государственного задания ИТ СО РАН (Номер гос. регистрации 121031800213-0).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sackmann E.K., Fulton A.L., Beebe D.J.* The present and future role of microfluidics in biomedical research // Nature. 2014. V. 507. № 7491. P. 181.
2. *Deng Y. et al.* An integrated microfluidic chip system for single-cell secretion profiling of rare circulating tumor cells // Scientific reports. 2014. V. 4. P. 7499.
3. *Zhu Y., Fang Q.* Analytical detection techniques for droplet microfluidics – A review // Analytica chimica acta. 2013. V. 787. P. 24–35.
4. *Kim J.H. et al.* Droplet microfluidics for producing functional microparticles // Langmuir. 2013. V. 30. № 6. P. 1473–1488.
5. *Zhang M. et al.* Controllable microfluidic strategies for fabricating microparticles using emulsions as templates // Particuology. 2016. V. 24. P. 18–31.
6. *Jaeseon L., Mudawar I.* Low-temperature two-phase microchannel cooling for high-heat-flux thermal management of defense electronics // Components Packaging Technol. IEEE Trans. 2009. V. 32. № 2. P. 453.
7. *Чиннов Е.А., Роньшин Ф.В., Кабов О.А.* Режимы двухфазного течения в микро-и миниканалах (обзор) // Теплофизика и аэромеханика. 2015. Т. 22. №. 3. С. 275–297.
8. *Ghiaasiaan S.M., Abdel-Khalik S.I.* Two-phase flow in microchannels // Advances in heat transfer. 2001. V. 34. P. 145–254.
9. *Чиннов Е.А., Кабов О.А.* Образование капель в микроканалах // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. № 14. С. 47–53.
10. *Ajaev V.S., Kabov O.A.* Levitation and Self-Organization of Droplets // Annual Review of Fluid Mechanics. 2021. V. 53. P. 203–225.
11. *Ronshin F., Chinnov E.* Experimental characterization of two-phase flow patterns in a slit microchannel // Experimental Thermal and Fluid Science. 2019. V. 103. P. 262–273.
12. *Chinnov E.A., Ron'shin F.V., Kabov O.A.* Two-phase flow patterns in short horizontal rectangular microchannels // Int. J. Multiphase Flow. 2016. V. 80. P. 57–68.

BRIDGE FLOW REGIME IN MICROCHANNELS

F. V. Ronshin[a], E. A. Chinnov[a], Yu. A. Dementyev[a], and O. A. Kabov[a]

[a] *Kutateladze Institute of Thermophysics Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS S.V. Alekseenko

As a result of studies of the two-phase flow in slit microchannels, a new flow regime – bridge flow has been discovered and studied. The bridges are vertical bridges between liquid films located on the lower and upper walls of the channel. It was found that with an increase in the flow rate of gas and liquid, the bridges begin to deform and then collapse. The critical Weber numbers characteristic of the deformation and destruction of bridges are determined. A new classification of two-phase flow regimes in microchannels is proposed on the basis of the obtained experimental data.

Keywords: bridge flow regime, slit microchannel, two-phase flow

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 48–57

МЕХАНИКА

УДК 532.5

ФОРМИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ НАКЛОННЫХ ПЕТЕЛЬ В ТЕЧЕНИЯХ ИМПАКТА КАПЛИ

 Ю. Д. Чашечкин[1,*], А. Ю. Ильиных[1,**]

Представлено академиком РАН Д.М. Климовым 13.05.2021 г.
Поступило 13.05.2021 г.
После доработки 13.05.2021 г.
Принято к публикации 24.05.2021 г.

Методами высокоразрешающей фото- и видеорегистрации впервые прослежен процесс формирования и реструктуризации регулярной системы наклонных петель, содержащих вещество свободно падающей окрашенной капли, в толще принимающей жидкости. Петли длиной до 1.5 см, внедряющиеся в жидкость в режиме формирования всплеска, вытягиваются из небольших вихорьков, деформирующих стенку растущей каверны в узлах первичной сетки – областях накопления вещества капли. Существующие до 60 мс петли деформируются и переносятся интенсивными приповерхностными течениями в начальной фазе развития всплеска. Изменение общей структуры течения сопровождается образованием новых типов волокнистых структур распределения вещества капли. Быстро развивающиеся системы окрашенных волокон, существующие на всех этапах эволюции процессов импакта капли, вплоть до образования каскада колец, нарушают осевую симметрию течений.

Ключевые слова: окрашенная капля, распространение вещества, волокна, эксперимент

DOI: 10.31857/S2686740021040052

Фундаментальность процессов и разнообразие приложений объясняют расширение исследований импакта капли – последовательности физических и гидродинамических процессов при слиянии с покоящейся жидкостью. Сложность явления иллюстрирует факт отсутствия математической модели образования волокон, замеченных еще в первых опытах [1]. Появление новых инструментов – искровых источников света [2], фоторегистраторов [3], ламп-вспышек [4], источников ультрафиолетового и рентгеновского излучения [5], быстродействующих фото- и видеокамер [6], импульсных лазеров, позволяет регистрировать картину течения с субмикронным разрешением и долями микросекунд по времени (в [7] частота съемки до 10^7 к/с). Расчеты, выполненные для осесимметричных течений [7, 8], согласуются с данными экспериментов “на просвет”, визуализирующими контуры течения.

Новые методики, показывающие трехмерную природу течений импакта капли [9], выделяют быстрые плоские струйки [10], группы брызг (мелких капель), циклически вылетающих наружу [11] и внутрь течения, где они попадают на поверхность сливающейся капли [12]. Прослежена последовательность процессов генерации различных волн: капиллярных – вне и внутри каверны и акустических – высокочастотных пакетов первичного контакта и более низкочастотных запаздывающих [13]. Картина течений быстро эволюционирует вследствие эффектов нелинейного взаимодействия и диссипации как собственно волн [14], так и сопутствующих тонких течений – лигаментов [15].

Отдельный интерес представляет изучение распределения вещества падающей капли в принимающей жидкости [16], необходимое для уточнения механизмов взаимного проникновения и смешения жидкостей, совершенствования химических, биохимических и нефтегазовых технологий. Исследования капельного обмена биоматериалами между атмосферой и гидросферой помогают определить механизмы распространения вирусов и бактерий, вызывающих инфекционные заболевания растений и животных [17], нарушения экологического баланса, особенно в средах, загрязненных нефтепродуктами [18]. Динамика течений на масштабах порядка нано- и микрометров зависит от формы бактерий, наличия и длины бактериальных нитей [19], параметров тонкой структуры течения.

[1] *Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук, Москва, Россия*
**E-mail: chakin@ipmnet.ru*
***E-mail: ilynykh@ipmnet.ru*

Системы тонких волокон, содержащих вещество капли, зарегистрированы на дне каверны в окрестности линии контакта сливающихся жидкостей [16], в фазах расплывания венца [20] и начала образования всплеска, а также при формировании каскада вихревых колец [2]. Группы мелких вихрей, возникающих на стенке растущей каверны, воспроизведены в численных моделях [21, 22]. Однако последующая картина эволюции вихрей и переноса вещества капли в толщу жидкости с высоким разрешением не изучалась. В данной работе впервые прослежена трансформация неоднородностей поверхности каверны в систему наклонных петель в толще жидкости. Опыты выполнены в диапазоне параметров формирования всплеска.

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ТЕЧЕНИЙ

В набор физических величин, определяющих динамику и структуру капельных течений, входят параметры контактирующих сред (индексами обозначены капля d, принимающая t жидкость, воздух a): плотности ρ_d, ρ_t и ρ_a (далее $\rho_{d,t,a}$), кинематические $\nu_{d,t,a}$ и динамические $\mu_{d,t,a}$ вязкости; полные σ_d^a, σ_t^a и нормированные коэффициенты поверхностного натяжения $\gamma = \dfrac{\sigma_d^a}{\rho_d}$, $\gamma = \dfrac{\sigma_t^a}{\rho_t}$ [см^3/с^2]; ускорение свободного падения g, диаметр D, площадь поверхности S_d, объем V, масса M, скорость капли U в момент контакта. Для оценки влияния конверсии внутренней энергии при уничтожении или формировании свободной поверхности [20] оцениваются кинетическая энергия капли $E_d = \dfrac{MU^2}{2}$ и доступная потенциальная поверхностная энергия (ДППЭ) $E_\sigma = \sigma S_d$, сосредоточенная в тонком шаровом слое толщиной порядка размера молекулярного кластера $\delta_c \sim 10^{-6}$ см и объемом V_σ (плотности энергий $W_E = \dfrac{E_k}{V_d}$, $W_\sigma = \dfrac{E_\sigma}{V_\sigma}$). При этом в число безразмерных чисел, использующихся для описании капельных течений, в дополнение к числам Рейнольдса $\mathrm{Re} = \dfrac{UD}{\nu}$; Фруда $\mathrm{Fr} = \dfrac{U^2}{gD}$; Бонда $\mathrm{Bo} = \dfrac{gD^2}{\gamma}$; Онезорге $\mathrm{Oh} = \dfrac{\nu}{\sqrt{\gamma D}}$; Вебера $\mathrm{We} = \dfrac{U^2 D}{\gamma}$, входят отношения энергий $E_R = \dfrac{E_k}{E_\sigma}$ и их плотностей $W_R = \dfrac{E_k V_\sigma}{E_\sigma V_D}$. Время передачи кинетической энергии капли принимающей жидкости составляет $\tau_E = \dfrac{D}{U} \sim 1$ мс, а поверхностной энергии в зоне первичного контакта – $\tau = \dfrac{\delta_c}{U} \sim 3$ нс.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Опыты выполнены на стенде ТБП, входящем в состав комплекса УИУ “ГФК ИПМех РАН” [23]. Отдельные капли частично дегазированной воды диаметром $D = 0.42$ см, окрашенные ализариновыми чернилами (разбавленными в концентрации 1:200), свободно падали из дозатора, установленного на высоте $H = 53$ и 200 см в воду глубиной $h_l = 3$ см, налитую в квадратную кювету размером 10 × 10 см. Область падения капли освещалась студийным софитом ReyLab Xenos RH-1000 мощностью 1 кВт и светодиодными источниками Optronis MultiLED со световым потоком 7700 лм. Картина течения регистрировалась высокоскоростной видеокамерой Optronis CR3000x2 с частотой съемки 5000 кадр/с. Линия визирования камеры располагалась в диапазоне углов от 0° (съемка “на просвет”) до 75° к горизонту. Выбор положения осветителей определялся критерием максимальной контрастности тонких структур картины регистрируемого течения.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Картина капельных течений зависит от свойств сред, диаметра и скорости капли в момент контакта. При малой скорости, когда ДППЭ капли больше кинетической энергии $E_R = 0.53$ ($D = 0.43$ см, $U = 0.34$ м/с при $H = 1$ см, $E_\sigma = 4.2$ мкДж, $E_k = 2.24$ мкДж, $W_R = 2 \times 10^{-5}$), слияние проходит в интрузивном режиме, общая поверхность сливающихся жидкостей окрашена однородно [24]. При больших скоростях капли в момент контакта ($U = 3.1$ м/с, $E_k = 200$ мкДж , $E_\sigma = 4.2$ мкДж, $E_R = 48$, $W_R = 1.7 \times 10^{-3}$) вещество капли в принимающей жидкости распределяется в отдельных волокнах, образующих линейные решетки и сетки [24]. Распад равномерно окрашенной капли на волокна на линии контакта сливающихся жидкостей прослежен в [16].

Фотограммы картины переноса окрашенной жидкости с границы каверны в толщу принимающей жидкости приведены на рис. 1. В процессе роста каверны волокна, образовавшиеся на ее поверхности, начинают стягиваться в компактные пятна. При этом стенка каверны теряет гладкость, на отдельных окрашенных участках образуются выступы и мелкие вихри диаметром $0.6 < d_r < 1.7$ мм (рис. 1, $t = 8$ мс, как и в [22]). Остаток венца покрыт короткими капиллярными волнами длиной $\lambda = 0.76$ мм.

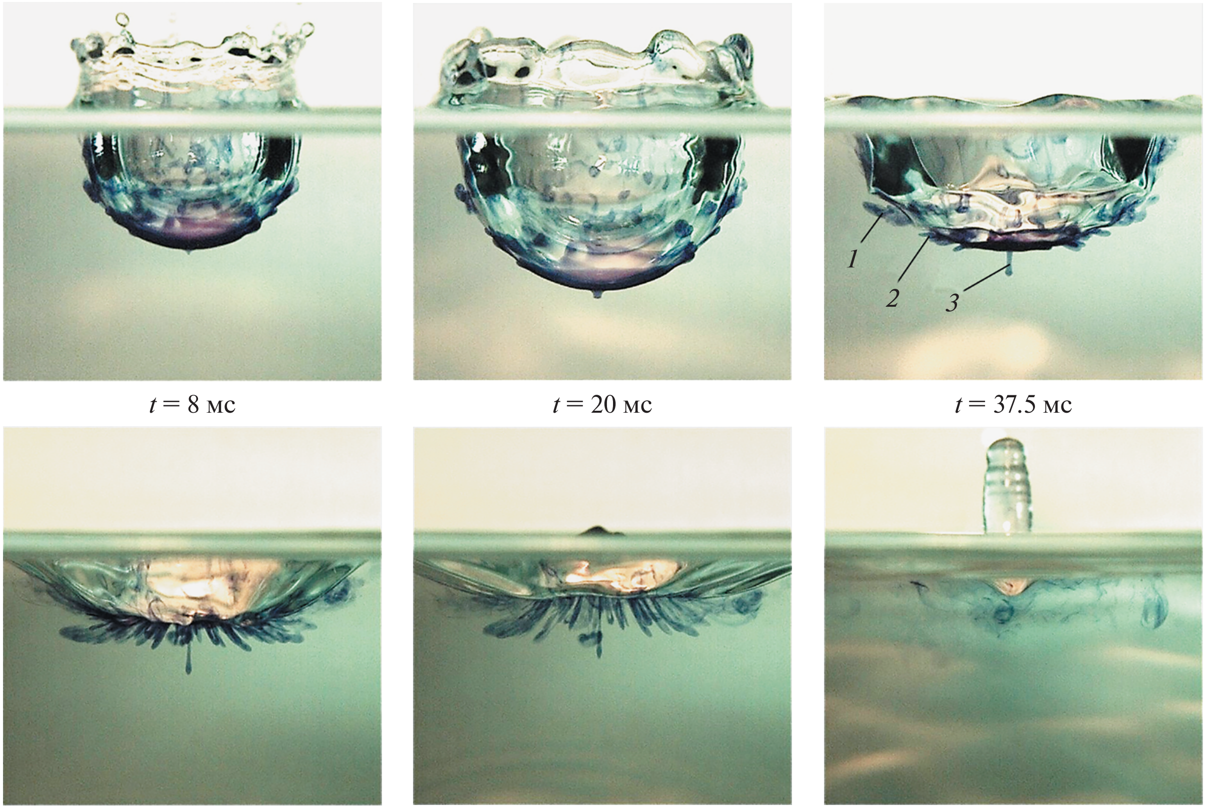


Рис. 1. Эволюция вихревых петель импакта капли разбавленных ализариновых чернил (разведение 1:200) в воде: $D = 0.43$ см, $U = 3.1$ м/с, Re = 13300, We = 570, Fr = 228, Bo = 2.5, Oh = 0.0018, $E_k = 200$ мкДж, $E_\sigma = 4.2$ мкДж.

С заостренных вершин зубцов вылетают отдельные капли диаметром $0.4 < d_s < 1.1$ мм.

По мере роста каверны краска перераспределяется, на стенках каверны появляются вихорьки – кольца в центре изображения и полные образования на краях каверны (рис. 1, $t = 20$ мс).

С началом фазы стягивания (коллапса), когда поверхность каверны покрывается большими капиллярными волнами, приграничные течения вытягивают неоднородности стенки в наклонные петли *1*, *2* (наиболее длинные *1* – в приповерхностном слое). Одновременно вниз растет центральная струйка *3* – след первичного контакта капли с принимающей жидкостью – области с максимальной эффективностью конверсии ДППЭ (рис. 1, $t = 37.5$ мс). Картина теней и каустик визуализирует кольцевые волны с острыми гребнями (в контуре на рис. 1, $t = 37.5$ мс два гребня на расстоянии 1.5 и 4 мм от дна каверны) и глубокие впадины.

С уменьшением высоты каверны плоскости петель медленно отклоняются к центру течения. Число петель растет (рис. 1, $t = 45$ мс), их концы движутся по сложным траекториям.

Длины петель достигают максимальных значений к началу формирования всплеска (рис. 1, $t = 50$ мс). В каверне выражены вертикальные деформации с острыми гребнями и плавными впадинами, сменившие горизонтальные кольцевые волны при $t = 37.5$ мс (рис. 1). При этом центральный оголовок отрывается от поддерживающей струйки и образует колечко ($d_r = 1.6$ мм) с ярко окрашенным контуром.

В фазе погружения центральной части всплеска кромка опускающегося пьедестала формирует узкую кольцевую впадину, охватывающую более узкую центральную часть всплеска. Внутренние течения поворачивают центральное вихревое колечко, окруженное системой из шести спиральных волокон, на 90° – из горизонтального к близкому к вертикальному. Волокна вытягиваются и медленно растворяются. Далее они сохраняются в картине течения в форме тонких нитей толщиной $\delta_f \sim 0.1$ мм. Вершина погружающегося всплеска скругляется. От перешейка вниз бегут три капиллярных волны ($\lambda_s = 0.42$, 0.67 и 1 мм).

Начальные кадры процесса растекания капли анализируются в [11, 16]. Фотограммы, иллю-

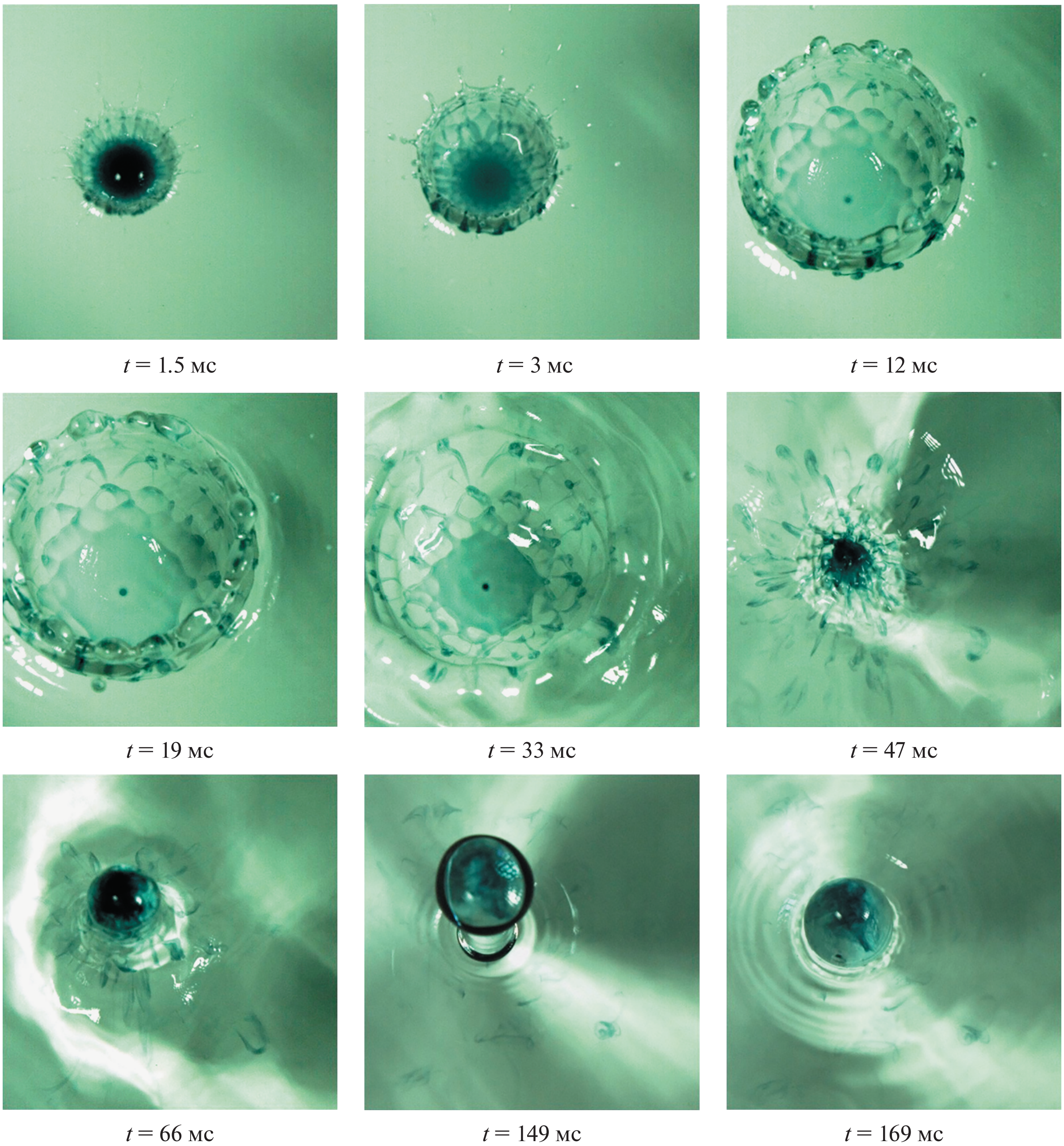
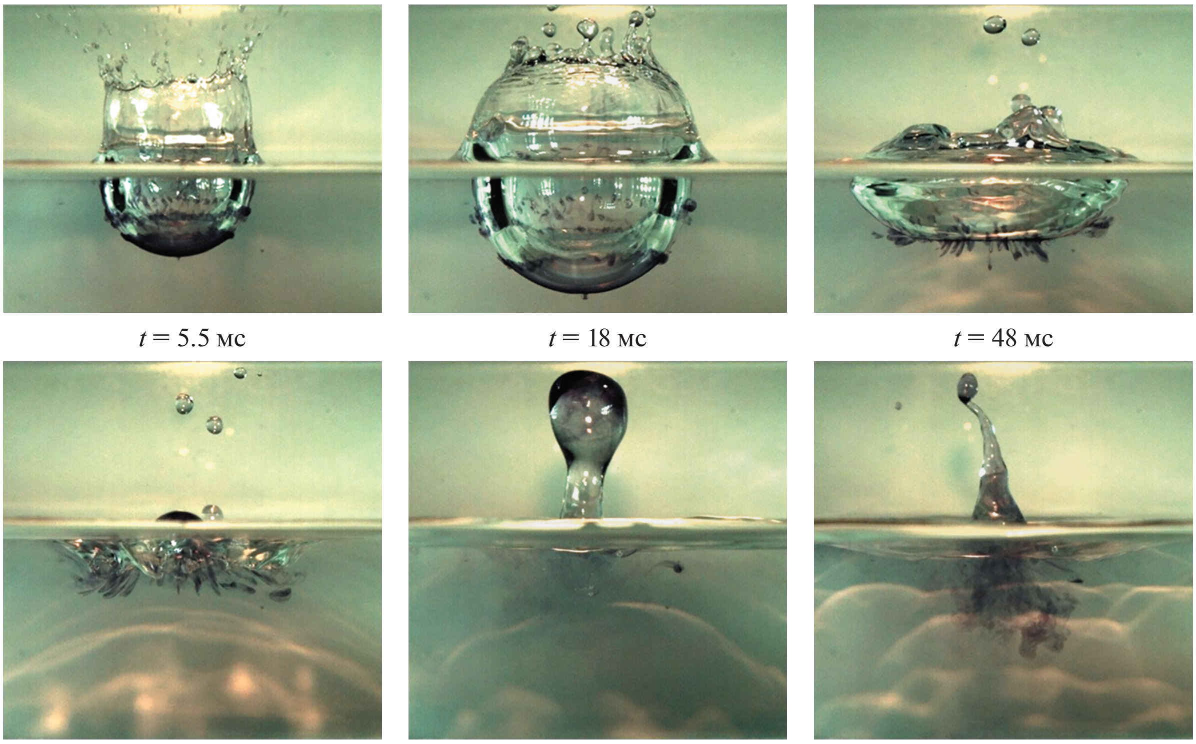


Рис. 2. Фронтальная картина течений импакта капли раствора ализариновых чернил (условия опытов как и на рис. 1, угол визирования 70° к горизонту).

стрирующие дальнейшую эволюцию фронтальной картины распределения вещества капли, приведены на рис. 2 (линия визирования под углом 70° к горизонту). В режиме формирования всплеска ($E_k > E_\sigma$) вещество погружающейся капли переносится от линии контакта капли по поверхности каверны и венца в радиальных волокнах – лигаментах толщиной $0.1 < \delta_l < 0.3$ мм, которые разделены принимающей жидкостью с шагом $9° < \Delta\varphi < 18°$ (рис. 2, $t = 1.5$ мс). Окрашенный остаток капли сохраняется на дне каверны. На вершине венца формируется шеврон с зубцами и шипами длиной $l_s = 4$ мм.

После полного растекания капли на поверхности каверны и венца остается многоуровневая сетка из ячеек с заостренными углами (рис. 2, $t = 3$ мс). С вершин системы шипов синхронно вылетают группы мелких капель ($d_s < 0.7$ мм). Окрашенные выступы на стенке каверны (рис. 2, $t = 3$ мс в направлении на 6 ч) со временем преобразуются



$t = 5.5$ мс $t = 18$ мс $t = 48$ мс

$t = 60.5$ мс $t = 173$ мс $t = 260.5$ мс

Рис. 3. Вихревые петли импакта капли разбавленных ализариновых чернил (разведение 1:200) в воде: $D = 0.43$ см, $U = 5.2$ м/с, Re = 22300, We = 1600, Fr = 640, Bo = 2.5, Oh = 0.0018, $E_k = 562$ мкДж, $E_\sigma = 4.2$ мкДж, $E_R = 134$, $W_R = 4.7 \cdot 10^{-3}$.

в вихревые кольца ($0.5 < d_r < 0.7$ мм, рис. 2, $t = 12$ мс) и далее – в вытянутые петли. Диаметр капель, вылетающих с шипов венца, достигает $d_s \sim 1$ мм.

Темной точке в центре каверны соответствует центральная струйка (на рис. 1 видна при $20 < t < 45$ мс). Сетчатая структура поверхности каверны образована тремя ярусами треугольных ячеек высотой $h_n \sim 3$ мм, число которых уменьшается, а верхняя часть сглаживается (рис. 2, $t = 19$ мс).

Постепенно общая контрастность окрашенной картины течения падает, что указывает на диффузионное расплывание чернил. Максимальная концентрация красителя наблюдается на вершинах зубцов и примыкающим к ним окрашенным волокнам на стенках в нижней части рисунка (рис. 2, $t = 19$ мс). В жидкость выступают мелкие вихорьки ($d_r \sim 0.6 \pm 0.1$ мм).

С началом коллапса продолжается рост горизонтального размера каверны. Центральное пятно, оконтуренное линией с острыми гребнями, уменьшается и просветляется. В нем проявляется сетчатая структура с кольцевыми элементами (рис. 2, $t = 33$ мс). В венце остаются отдельные окрашенные волокна.

Тонкая структура дна остатка каверны усложняется с появлением всплеска, вершина которого покрыта мелкими впадинами с острыми стенками, образующими кольцевые структуры с шагом $\delta_r \sim 0.7$ мм. Одновременно радикально перестраивается картина распределения вещества капли. Основная часть окрашенной жидкости стягивается в оголовок растущего всплеска, остальная поверхность жидкости просветляется. При этом видны короткие петли длиной $1.8 < l_l < 4.8$ мм, внутренние концы которых закрывает кромка растущего пьедестала всплеска ($d_p = 1.78$ см). К пьедесталу примыкают группы длинных петель ($l_l = 1.2$ см), расположенных с угловым шагом $10° < \Delta\varphi < 20°$.

Оголовок растущего всплеска быстро сглаживается, и в картине течения остаются выраженными только капиллярные волны на вершине пьедестала ($\lambda_c = 0.3$, 0.35 мм, рис. 2, $t = 66$ мс). Остатки вихревых петель в центре заключены в кольце ($d_c = 2.5$ см) и за его пределами ($l_l = 1.4$ см справа внизу).

Со временем мелкомасштабные компоненты сглаживаются, петли размываются, и выраженным остается всплеск ($d_s = 3.8$ мм) с оголовком

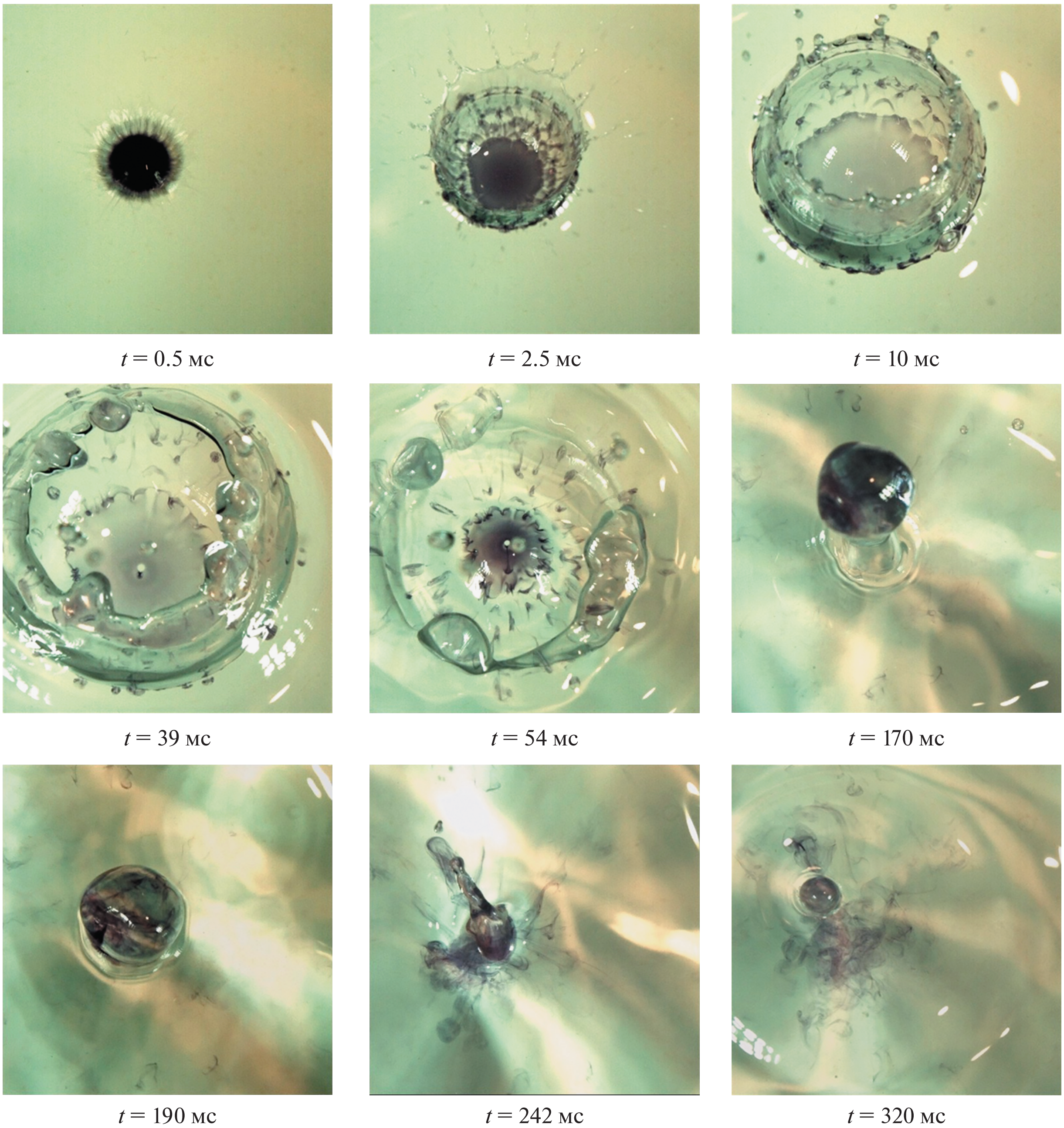


Рис. 4. Фронтальная картина течений импакта капли раствора ализариновых чернил (условия опытов как и на рис. 3, угол визирования 70° к горизонту).

(d_o = 8.4 мм), отделенный от принимающей жидкости узкой кольцевой впадиной (d_v = 5.3 мм) – следом погрузившегося пьедестала. От ее внешней границы разбегаются капиллярные волны (λ_c = 0.6, 0.82, 1.6 мм). У поверхности остаются окрашенные колечки ($d_f \sim 2$ мм).

Контакт оголовка с поверхностью жидкости сопровождается образованием группы капиллярных волн (в жидкости λ_c = 0.78, 0.97, 1.34, 2.1 мм, на оголовке λ_c = 0.23 мм) и радиальных течений, искажающих их гребни. Отдельные окрашенные волокна, их сборки, пятна встречаются и в оголовке всплеска, и во всем объеме жидкости (рис. 2, t = = 169 мс).

Отмеченные особенности картины течения сохраняются и при большей скорости контакта капли (рис. 3, U = 5.2 м/с). Однако венец здесь тонкий, его кромка сильнее изрезана, с вершин коротких шипов выбрасывается большое число

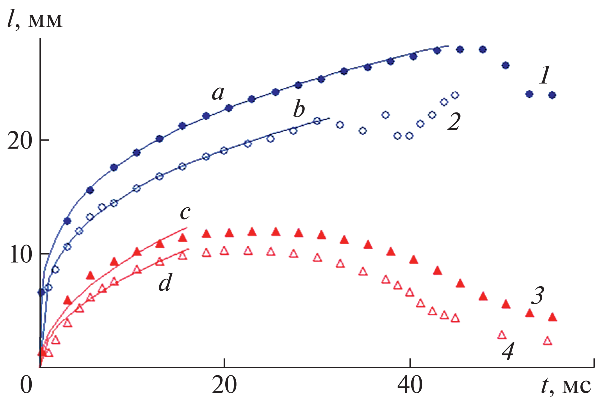


Рис. 5. Изменения ширины (*1*, *2*) и глубины (*3*, *4*) каверн импакта капли (D = 0.43 см): (кривые *1*, *3*) – U = = 5.2 м/с; (*2*, *4*) – U = 3.1 м/с; участки *a*–*d* – аппроксимации функциями вида $l(t) = mt^n$.

мелких брызг (рис. 3, t = 5.5 мс). На стенках каверны выражены окрашенные горизонтальные кольца на расстоянии h_c = 1.6 и 2.7 мм от дна каверны.

Окрашенная жидкость собирается в отдельные пятна на стенках каверны, на горизонтах h = 3.6 и 9.1 мм от дна каверны, порождающие мелкие вихорьки (рис. 3, t = 18 мс). Центральная донная струйка здесь присутствует, но выражена слабее.

Группы коротких наклонных петель формируются к началу схлопывания каверны (рис. 3, t = 48 мс). Более четкие волокна длиной $3 < l_f < 3.5$ мм и петли образуются к началу роста всплеска, когда стенки каверны покрыты вертикальными впадинами, разделенными острыми гребнями (рис. 3, t = 60.5 мс).

К началу спадания всплеска интенсивные внутренние течения размывают четкие петли в толще жидкости, формируя слабо окрашенную область с клочковатой структурой (рис. 3, t = 173 мс). Окрашенная вершина всплеска (d_s = 8.5 мм) располагается на прозрачной ножке (d_o = 4.3 мм). Каустики в нижней части рисунка прорисовывают гребни капиллярных волн.

Погрузившийся всплеск вносит порцию окрашенной жидкости с волокнистой структурой в толщу жидкости. Сформировавшаяся впадина, прорисованная яркими каустиками (рис. 3, t = = 260.5 мс), заполняется жидкостью и образует конический стример (h_s = 1.46 см) с оголовком (d_s = 2.7 мм).

Таблица 1. Параметры интерполяций размеров каверн

	a	*b*	*c*	*d*
m	9.8	7.8	3.1	2.6
n	0.28	0.3	0.5	0.5
Δt, мс	43	30	15.5	15.5

Во фронтальной проекции (рис. 4) на фоне более выраженной диффузной окраски каверны и растущего венца выделяются тонкие волокна, радиально отходящие от линии слияния остатка капли, как и в [16, 24]. Тонкие плотно окрашенные волокна длиной до l_f = 3 мм находятся в пелене венца (рис. 4, t = 2.5 мс). Вылетающие брызги содержат обе контактирующие жидкости.

На утолщенной кромке венца выражены отдельные зубцы с шагом $2.0 < \delta_\varphi < 5.4$ мм, и кольцевые волны (λ_c = 0.27 мм). Контур толщиной δ_b = 0.9 мм ограничивает неоднородно окрашенную центральную часть дна каверны. Пятна ($0.6 < d_p < 0.8$ мм) с шагом $\delta_\varphi \sim 3$ мм на его нижней части – след формирующихся мелких вихрей, которые видны и в верхней части каверны. Динамика пузырьков (d_b = 2.2 мм, угловое положение – на 5 ч) у стенки венца также изучалась в [25].

Плотность окраски спадающего венца с крупными зубцами плавно уменьшается, однако вихревые колечки ($d_r < 0.75$ мм) остаются контрастными (рис. 4, t = 39 мс).

Окраска центра течения становится более плотной к началу формирования всплеска (рис. 4, t = 54 мс). Основание пьедестала оконтуривают яркие волокна, дно каверны покрывают отдельные колечки ($d_r \sim 2$ мм) и петли ($3.0 < l_l < 15$ мм).

Значительная часть краски собирается в оголовке всплеска, цилиндрическая струйка прозрачная (рис. 4, t = 170 мс). Коническое основание пьедестала (d_s = 4.8 мм) окружает узкая кольцевая впадина диаметром d_c = 6.3 мм и шириной δ_w = 0.35 мм, от внешней кромки которой разбегаются кольцевые волны (λ_c = 0.48, 0.74 мм), искажающие радиальные течения. Отдельные волокна окрашенной жидкости разбросаны по всему полю наблюдения.

Погружение всплеска сопровождается образованием новой группы коротких волн (λ_c = 0.3 мм, t = 190 мс, рис. 4). Стример в этом опыте состоит из цилиндрического основания, конической центральной части и оголовка (d_s = 1.4 мм).

Погружение оголовка стримера сопровождается генерацией новой группы капиллярных волн (λ_c = 0.4 мм). Из области его падения вытягиваются окрашенные волокна и разбегаются мелкие вихри (на 7 ч при t = 242 мс). Окрашенные волокна сохраняются в областях причудливой формы (рис. 4, t = 320 мс).

Размеры каверн в опытах, представленных на рис. 1–4, приведены на рис. 5. Наборы эксперимен-

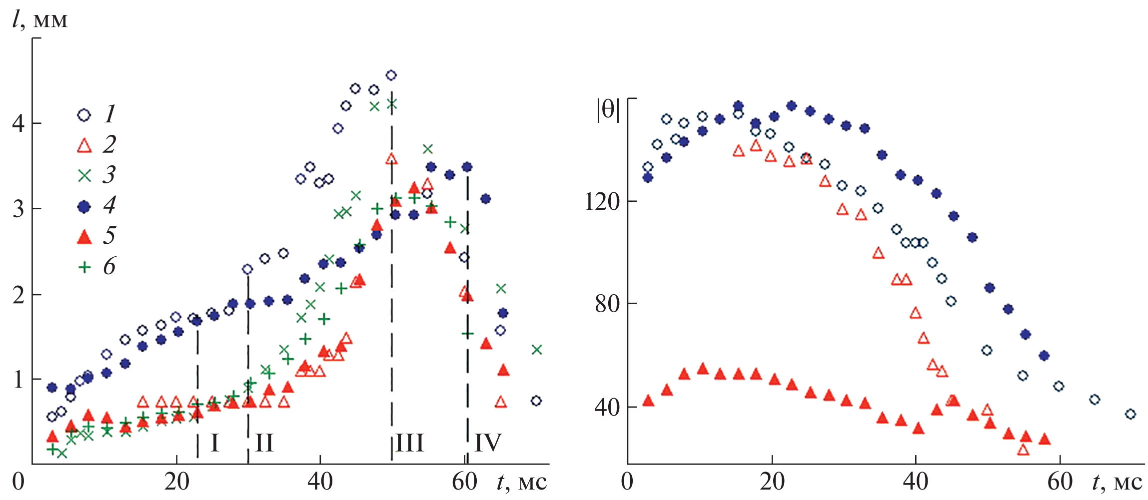


Рис. 6. Изменения длин l и модуля углов наклона вихревых петель $|\theta|$ к вертикали (D = 0.43 см): кривые *1*, *2* – приповерхностная и диагональная петли (U = 3.1 м/с); *3*, *4* – то же для U = 5.2 м/с; *5*, *6* – центральная струйка; линии *I*, *II* отмечают время достижения максимального размера и начала схлопывания каверны, *III*, *IV* – появления всплеска (U = 3.1 м/с и 5.2 м/с соответственно).

тальных точек *1*–*4* на интервале Δt аппроксимируются функциями *a*, *b*, *c*, *d* вида $l(t) = mt^n$, $[l]$ = мм, $[t]$ = мс. Значения коэффициента m, показателя n, длительность интервала Δt согласованности интерполяции с данными приведены в табл. 1.

Немонотонные вариации размеров при $t > 35$ мс отражают влияние крупномасштабных осцилляций поверхности жидкости и капиллярных волн, как охватывающих венец, так и сбегающих с его кромки в каверну.

Изменения длин наклонных петель (приповерхностной *1* и под углом 45° – *2*), а также центральной струйки *3,* которые начинают идентифицироваться как оголовки вихрей при $t > 1$ мс, приведены на рис. 6. На начальном этапе они монотонно растут и аппроксимируются функциями вида $l(t) = mt^n + c$, $[l]$ = [мм], $[t]$ = [мс] (значения коэффициентов m, показателей n и слагаемого c приведены в табл. 2).

Быстрорастущей петле *1*, которая вытягивается из вихревого кольца приповерхностным течением, соответствует показатель $n = 0.5$ ($m = 0.38$). Темп неравномерного роста длины центральной струйки более высокий $l_c = 1.6\times10^{-7}t^4$. Промежуточные струйки растут медленнее. Верхние концы петель фиксированы на движущейся стенке каверны, а внешние поднимаются вместе с каверной и поворачиваются к центру под действием приповерхностных течений.

Приповерхностные петли быстро удлиняются в начальной фазе. Срединные петли медленно растут на начальной стадии и быстро – при коллапсе каверны. Предельная длина центральной струйки уменьшается с ростом высоты свободного падения капли.

Изменения в характере кривых связаны со структурной перестройкой общей картины течений: прекращением роста глубины и сменой направления движения дна каверны (началом коллапса), появлением нового компонента – всплеска. Время существования наклонных вихревых петель данного типа в толще жидкости достигает 60 мс. Далее они втягиваются в приповерхностный слой и выходят из поля наблюдения.

Угловое положение петель меняется более плавно. В начале формирования петли смещаются восходящими течениями, вызванными углублением каверны, вытесняющей окружающую жидкость. В фазе коллапса плоскости петель на-

Таблица 2. Параметры интерполяции длин петель

	1	2	3	4	5	6
m	0.38	5×10^{-6}	1.6×10^{-7}	0.35	7.5×10^{-7}	4.6×10^{-7}
n	0.5	4	4	0.5	4	4
c	0	0.7	0.32	0	0.5	0.5

чинают отклоняться к центру течения. При этом концы петель движутся по сложным траекториям.

В процессе эволюции каверн картины петель усложняются, осевая симметрия течения нарушается. Проникающие в принимающую жидкость тонкие петли в капельных течениях влияют на локализацию и темп протекания химических и биохимических реакций в случае различия составов контактирующих веществ.

БЛАГОДАРНОСТИ

Эксперименты проведены на стендах УИУ "ГФК ИПМех РАН".

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-19-00598).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Rogers W.B.* On the formation of rotating rings by air and liquids under certain conditions of discharge // Am. J. Sci. (Ser. 2). 1858. V. 26. P. 246–268. https://biodiversitylibrary.org/page/36868460
2. *Thomson J.J., Newall H.F.* On the formation of vortex rings by drops falling into liquids, and some allied phenomena // Proc. R. Soc. London. 1885. V. 29. P. 417–436. https://doi.org/10.1098/rspl.1885.0034
3. *Worthington A.M.* A Study of splashes. Longmans, Green, London, 1908. 129 p.
4. *Edgerton H.E., Killian J.R.* Moments of Vision: The Stroboscopic Revolution in Photography. 1979. Cambridge: MIT Press, 177 p.
5. *Zhang V., Toole J., Fezzaa K., Deegan R.D.* Splashing from drop impact into a deep pool: multiplicity of jets and the failure of conventional scaling // J. Fluid Mech. 2012. V. 703. P. 402–413. https://doi.org/10.1017/jfm.2012.249 0.1017/jfm.2012.249
6. *Thoroddsen S.T., Etoh T.G., Takehara K.* High-speed imaging of drops and bubbles // Annu. Rev. Fluid Mech. 2008. V. 40. P. 257–285. https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.40.111406.102215
7. *Visser C.W., Frommhold P.E., Wildeman S., Mettin R., Lohse D., Sun C.* Dynamics of high-speed micro-drop impact: numerical simulations and experiments at frame to-frame times below 100 ns // Soft Matter. 2015. V. 11. P. 1708–1722. https://doi.org/10.1039/c4sm02474
8. *Gilet T., Mulleners K., Lecomte J. P., Vandewalle N., Dorbolo S.* Critical parameters for the partial coalescence of a droplet // Phys. Rev. E 75, 036303. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.036303
9. *Ersoy N.E., Eslamiana M.* Capillary surface wave formation and mixing of miscible liquids during droplet impact onto a liquid film // Phys. Fluids. 2019. V. 31. 012107. https://doi.org/10.1063/1.5064640
10. *Thoroddsen S.T.* The ejecta sheet generated by the impact of a drop // J. Fluid Mech. 2002. V. 451. P. 373–381. https://doi.org/10.1017/S0022112001007030
11. *Чашечкин Ю.Д., Ильиных А.Ю.* Множественные выбросы брызг при ударе капли // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2020. Т. 494. С. 42–46. https://doi.org/10.31857/S2686740020050181
12. *Чашечкин Ю.Д., Ильиных А.Ю.* Капиллярные волны на поверхности погружающейся в жидкость капли // ДАН. 2015. Т. 465. № 4. С. 548–554. https://doi.org/10.7868/S0869565215340101
13. *Чашечкин Ю.Д.* Пакеты капиллярных и акустических волн импакта капли // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2021. № 1 (94). С. 73–92. https://doi.org/10.18698/1812-3368-2021-1-73-92
14. *Руденко О.В.* Разрушение сингулярности профиля сильно нелинейной волны в диссипативной среде // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2020. Т. 492. С. 63–67. https://doi.org/10.31857/S2686740020030098
15. *Chashechkin Yu.D.* Conventional partial and new complete solutions of the fundamental equations of fluid mechanics in the problem of periodic internal waves with accompanying ligaments generation // Mathematics. 2021. V. 9. № 586. https://doi.org/10.3390/math9060586
16. *Чашечкин Ю.Д., Ильиных А.Ю.* Распад капли на отдельные волокна на границе области контакта с принимающей жидкостью // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2021. Т. 497. С. 31–35. https://doi.org/10.31857/S2686740021020139
17. *de Oliveira Silva A., Savi D.C., Raiser P.H.S. et al.* Epidemiological aspects of Phyllosticta citricarpa colonization and viability in Citrus sinensis // J. Plant. Dis. Prot. 2017. V. 124. P. 73–80. https://doi.org/10.1007/s41348-016-0046-8
18. *Meckenstock R.U., et al.* Water droplets in oil are microhabitats for microbial life // Science. 2014. V. 345. P. 673–675. https://doi.org/10.1126/science.1252215
19. *White A.R., Jalali M., Sheng J.* Hydrodynamics of a rising oil droplet with bacterial extracellular polymeric substance (eps) streamers using a microfluidic microcosm // Front. Mar. Sci. 2020. V. 7. Article 294. P. 1–14. https://doi.org/10.3389/fmars.2020.00294
20. *Чашечкин Ю.Д.* Эволюция тонкоструктурного распределение вещества свободно падающей капли в смешивающихся жидкостях // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2019. Т. 55. № 3. С. 67–77. https://doi.org/10.1134/S0001433819020026
21. *Thoroval M.-J., Takehara K., Thoroddsen S.* von Kármán vortex street within an impacting drop // Phys. Rev. Let. 2012. V. 108 (26). 264506. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.264506

22. *Wu S., Zhang J., Xiao Q., Ni M.J.* Comparison of two interfacial flow solvers: Specific case of a single droplet impacting onto a deep pool // Comp. Mathem. Applic. 2021. V. 81. № 1. P. 664–678. https://doi.org/10.1016/j.camwa.2020.01.010
23. УИУ "ГФК ИПМех РАН": Гидрофизический комплекс для моделирования гидродинамических процессов в окружающей среде и их воздействия на подводные технические объекты, а также распространения примесей в океане и атмосфере. Сайт: http://www.ipmnet.ru/uniqequip/gfk/#equip.
24. *Чашечкин Ю.Д., Ильиных А.Ю.* Задержка формирования каверны в интрузивном режиме слияния свободно падающей капли с принимающей жидкостью // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2021. Т. 496. С. 34–39. https://doi.org/10.31857/S268674002101003X
25. *Zou J., Ji C., Yuan B.-G., Ren Y.-L., Ruan X.-D., Fua X.* Large bubble entrapment during drop impacts on a restricted liquid surface // Phys. Fluids. 2012. V. 24. 057101. https://doi.org/10.1063/1.3703674

FORMATION OF A SYSTEM OF INCLINED LOOPS IN THE FLOW OF A DROP IMPACT

Yu. D. Chashechkin[a] and A. Yu. Ilinykh[a]

[a] *Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS D.M. Klimov

The process of formation and restructuring of a regular system of inclined loops containing the substance of a freely falling colored drop in the bulk of the target fluid has been traced by the methods of high-resolution photo and video recording for the first time. Loops up to 1.5 cm long, penetrating into the target fluid in the mode of splash formation, are pulled out from small vortices that deform the wall of the growing cavity at the nodes of the primary network that are in the regions of accumulation of the drop matter. Loops existing up to 60 ms are deformed and carried by intense near-surface flows in the initial phase of the splash formation. The change in the general structure of the flow is accompanied by the formation of new types of fibrous structures of the drop substance distribution. The rapidly developing systems of colored fibers existing at all stages of the evolution of the drop impact processes, up to the formation of a cascade of rings, violate the axial symmetry of the flows.

Keywords: colored drop, substance distribution, fibers, experiment

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2021, том 499, с. 58–65

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 534.26

ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ УПРУГИХ ВОЛН НА ПЛОСКОЙ ТРЕЩИНЕ

Академик РАН Н. П. Алешин[1], А. А. Кириллов[1,2,*], Л. Ю. Могильнер[3,**], Е. П. Савелова[2]

Поступило 06.05.2021 г.
После доработки 07.05.2021 г.
Принято к публикации 11.05.2021 г.

Рассмотрена 3D-задача рассеяния упругих волн на трещинах в однородной изотропной среде. Используя метод функции Грина и специально введенные вспомогательные функции (потенциалы), показано, как в общем случае для плоских трещин граничные условия можно разделить на две независимые части, одна их которых представляет собой систему из двух дифференциальных уравнений, решение которой приводит к волнам Рэлея на поверхностях трещины, а вторая включает одно дифференциальное уравнение, сведенное к аналогичному для рассеяния акустической волны на абсолютно жестком включении. На примере рассеяния на трещине в виде диска показано, что выражения для рассеянных полей могут быть сведены к квадратурам, что актуально, например, для исследования выявления трещин методами ультразвуковой дефектоскопии.

Ключевые слова: ультразвук, упругая среда, рассеяние, трещина, диск

DOI: 10.31857/S2686740021040027

ВВЕДЕНИЕ

Один из быстро развивающихся методов ультразвукового контроля – дифракционно-временной, или, в англоязычной литературе – метод TOFD (Time-of-Flight Diffraction) [1]. Если раньше в ультразвуковой дефектоскопии чаще всего ориентировались на прием максимального по амплитуде сигнала, зеркально отраженного от дефекта, то метод TOFD оперирует со слабыми сигналами от ребер (краев) дефектов. При этом неизбежно приходится анализировать результат 3D-рассеяния ультразвука на локальных неоднородностях в упругой среде [2, 3]. Для рассмотрения этих тонких эффектов целесообразно обратиться к аналитическим решениям задачи рассеяния ультразвука на трещинах различной формы и размеров.

В общем виде геометрию задачи можно представить как на рис. 1: продольная или поперечная волна под углом α падает на локальную неоднородность в изотропной среде с коэффициентами Ламе λ и μ, плотностью ρ_0. Пусть $\mathbf{u}^0$ – вектор смещения в падающей волне, $\delta\mathbf{u}$ и $\mathbf{u}$ – рассеянное и результирующее поля, так что $\mathbf{u} = \mathbf{u}^0 + \delta\mathbf{u}$. Тогда в пространстве вокруг неоднородности имеем:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \rho_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = g_i(x,t), \qquad (1)$$

где тензор напряжений $\sigma_{ij}(u) = c_{ijkl}\dfrac{\partial u_l}{\partial x_k}$ имеет вид

$$\sigma_{ij} = \lambda\delta_{ij}\nabla u + \mu(\partial_i u_j + \partial_j u_i). \qquad (2)$$

Здесь мы ограничимся рассеянием на трещинах M, под которыми будем понимать бесконечно тонкие препятствия в плоскости $z = 0$, у которых противоположные поверхности $z = \pm 0 (x, y \in M)$ свободны от напряжений и не взаимодействуют между собой нигде, кроме разве точек кривой L,

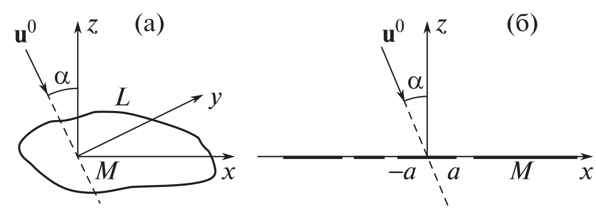


Рис. 1. К рассеянию упругих волн в 3D- и 2D-задачах.

[1] *ФГАУП “Сварка и контроль” при МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия*
[2] *Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), Москва, Россия*
[3] *ООО “НИИ Транснефть”, Москва, Россия*
**E-mail: mogilner@mail.ru*
***E-mail: kirillov@bmstu.ru*

ограничивающей поверхность M. При этом граничные условия можно записать в виде

$$n_j \sigma_{ij}|_M = 0, \quad (3)$$

где n_j – внешняя нормаль к поверхности трещины.

Поверхностью M можно моделировать локальные или протяженные, сплошные или прерывистые трещины. В простейших случаях, можно говорить о таких моделях:

диск $x^2 + y^2 \le a^2$ (или $r \le a$), $z = \pm 0$ (L – окружность радиуса a на рис. 1а);

полуплоскость $x \ge 0, -\infty < y < \infty,\ z = \pm 0$ (рис. 1б, правая сторона);

полоса $|x| \le a, -\infty < y < \infty, z = \pm 0$ (рис. 1б в центре) или решетка из полос, расположенных регулярно или нерегулярно (рис. 1б).

Если, помимо граничных условий, учесть условия излучения и условия на ребре (ребрах) трещины, то известно, что для трещин простейшей формы задача о нахождении $\delta\mathbf{u}$ имеет единственное решение. Например, в [4, 5] это показано для 2D-рассеяния на полуплоскости, в [6, 7] и других работах – для 3D-рассеяния на круглом диске. Также многократно рассматривались различные приближенные решения, например, в [8, 9]. Однако если говорить о 3D-задачах в общем случае рассеяния упругой волны на трещинах произвольной формы, то они часто сводятся к численному решению интегральных уравнений различного типа. Для упрощения инженерных расчетов было бы целесообразно построить общее решение в квадратурах и выделить в явном виде отдельные составляющие рассеянных полей. Этой цели и посвящено данное сообщение.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ НА ПЛОСКОЙ ТРЕЩИНЕ

Имея в виду условия излучения для рассеянной волны, введем запаздывающую функцию Грина G_{ij}, которая подчиняется уравнению

$$\frac{\partial}{\partial x_j} c_{ijkl} \frac{\partial G_{lm}}{\partial x_k} - \rho_0 \frac{\partial^2 G_{im}}{\partial t^2} = \delta_{im} \delta\left(x - x', t - t'\right).$$

Точную форму этой функции можно найти, например, в [5, 6, 10]:

$$G_{ij} = \frac{1}{\mu}\left\{\delta_{im}\Psi + \frac{1}{æ^2}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}(\Psi - \Phi)\right\},$$

где

$$\Psi = -\frac{1}{4\pi R}\delta\left(t' - t + \frac{R}{c_t}\right), \quad \Phi = -\frac{1}{4\pi R}\delta\left(t' - t + \frac{R}{c_l}\right).$$

Здесь $R = |x - x'|$. Используя преобразование Фурье запаздывающей функции Грина $G = \frac{1}{2\pi}\int e^{-i\omega(t-t')} G^{\omega} d\omega$, где ω – круговая частота, для компонент Фурье получим

$$\Psi = \frac{e^{iæR}}{4\pi R}, \quad \Phi = \frac{e^{iKR}}{4\pi R}.$$

Видно, что для компонент Фурье волны $\mathbf{u}(\omega, x, y, z)$ условие излучения формулируются следующим образом: при $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \to \infty$ вектор смещения пропорционален преобразованию Фурье запаздывающей функции Грина: $u(\omega) \sim q(\omega) G^{\omega}(r)$, а множитель $q(\omega)$ зависит только от угловых переменных.

Условие на ребре трещины сформулируем позже. При этом задача будет поставлена полностью, и можно приступать к ее решению. В данной работе мы рассмотрим стационарный случай, когда зависимость переменных от времени монохроматическая $\sim e^{i\omega t}$. При этом волновое уравнение (1) можно заменить на уравнение Гельмгольца, которое запишем в виде интегрального уравнения, учитывающего все особенности поверхностей (граничные условия), по которым берутся интегралы:

$$\begin{aligned} u_m(x, \omega) &= \int G_{im}^{\omega}(x - x') g_j^{\omega}(x') d^3x' - \\ &- \oint n_j' c_{ijkl}\left(u_i \frac{\partial G_{lm}}{\partial x_k'} - G_{im}\frac{\partial u_l}{\partial x_k'}\right) d^2\Sigma'. \end{aligned} \quad (4)$$

Согласно [4, 10] первый интеграл описывает падающую волну $\mathbf{u}^0$. Второй интеграл берется по поверхности, состоящей из поверхности трещины и поверхности сферы с бесконечным радиусом $R \to \infty$. Нормаль к поверхности трещины направлена внутрь объема (т.е. наружу из трещины). Тогда, учитывая граничное условие (3), уравнение (4) перепишем в виде

$$\delta u_m(x, \omega) = -\oint n_j' c_{ijkl}(u_i^{0'} + \delta u_i')\frac{\partial G_{lm}}{\partial x_k'} d^2\Sigma'. \quad (5)$$

Таким образом, поле, рассеиваемое трещиной, полностью определяется значениями этого поля на ее поверхности $\mathbf{u}|_M$. Как только мы получим решение на трещине, то найдем и общее решение задачи о рассеянии упругой волны.

Разобьем поверхность трещины M на две части: M^+ – “освещенную”, или “верхнюю” с вектором нормали $\mathbf{n} = (0,0,1)$, и M^- – “теневую”, или “нижнюю” с вектором нормали $\mathbf{n} = (0,0,-1)$. Тогда и поле смещения $\mathbf{u}$ можно разбить на две части: $\mathbf{u}^+$ – решение на поверхности M^+ и $\mathbf{u}^-$ – решение на поверхности M^-. Из (5) получим

$$\delta u_m(x, \omega) = -\int_{M^+} n_j' c_{ijkl}[\delta u_i']\frac{\partial G_{lm}}{\partial x_k'} d^2\Sigma', \quad (6)$$

где интегрирование проводится только по освещенной стороне, а $[\mathbf{u}]$ обозначает разность смещения на разных сторонах трещины:

$$[\mathbf{u}] = u_m^+ - u_m^- = \delta u_m^+ - \delta u_m^-. \qquad (7)$$

2. ПОТЕНЦИАЛЫ ПОЛЯ, ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ, УСЛОВИЯ НА РЕБРЕ

Поскольку смещения ищем на поверхности трещины, то вблизи нее удобно использовать специальную систему координат. Введем вместо z координату $\zeta = |z|$, так что $x, y \in M, \zeta = 0$ соответствует обеим сторонам трещины $z = \pm 0$. Например, поверхность трещины в виде диска в новых координатах (x, y, ζ) имеет вид $r = \sqrt{x^2 + y^2} \le a$, $\zeta = 0$.

Разложим вектор $\mathbf{u}$ на нормальную $\mathbf{u}_n$ и тангенциальную $\mathbf{u}_\tau$ к поверхности трещины составляющие: $u_n = u_\zeta$, $u_\tau = (u_x, u_y)$, и введем параметризацию искомого поля $\delta\mathbf{u}$:

$$\delta u_n = \psi, \quad \delta u_a = \frac{\partial \tau}{\partial x^a} + e_{ab}\frac{\partial \chi}{\partial x^b}, \qquad (8)$$

где введен антисимметричный тензор Леви–Чивиты $e_{ab} = -e_{ba}, e_{12} = 1$, а x^a – координаты, выбранные на поверхности трещины. Отметим, что такая параметризация возможна для вектора смещения также и на любой искривленной поверхности.

Функции ψ и τ содержат как продольную, так и поперечную компоненты упругой волны, а χ – только поперечную. Компоненты тензора напряжений в (3) принимают вид

$$\sigma_{nn} = \lambda \operatorname{div} \delta\mathbf{u} + 2\mu \frac{\partial \psi}{\partial \zeta}, \qquad (9)$$

$$\sigma_{na} = \mu\left[\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\frac{\partial \tau}{\partial x^a} + e_{ab}\frac{\partial \chi}{\partial x^b}\right) + \frac{\partial \psi}{\partial x^a}\right]. \qquad (10)$$

Выражение (10) в случае плоской поверхности трещины сводится к двум независимым комбинациям:

$$\partial_a \sigma_{na} = \mu \partial_a^2 (\partial_\zeta \tau + \psi),$$

$$e_{ca}\partial_c \sigma_{na} = -2\mu \partial_\zeta \partial_b^2 \chi.$$

Выразим $\operatorname{div} \delta\mathbf{u}$ через новые параметры: $\operatorname{div} \delta\mathbf{u} = \partial_\zeta \psi + \Delta_2 \tau$, где $\Delta_2 \tau = \delta_{ab}\partial_a \partial_b \tau = \partial_a^2 \tau$. Тогда из (3), (9), (10) получим:

$$(\lambda + 2\mu)\partial_\zeta \psi + \lambda \Delta_2 \tau = -\sigma_{nn}^0, \qquad (11)$$

$$\mu \Delta_2 (\partial_\zeta \tau + \psi) = -\partial_a \sigma_{na}^0, \qquad (12)$$

$$-2\mu \partial_\zeta \Delta_2 \chi = -e_{ca}\partial_c \sigma_{na}^0. \qquad (13)$$

Поскольку метрика вблизи ребра трещины не сводится к простой евклидовой форме, то уравнения (11)–(13) следует дополнить условиями на ребре, в простейшем случае – требованием непрерывности на ребре функций ψ, τ и χ и их производных. Это соответствует предельному случаю сжатия в диск полости с гладкой границей в виде сплюснутого эллипсоида вращения. В более общем случае производные или комбинация функций и их производных испытывают разрыв, и ребро будет содержать дополнительный дельта-источник, что соответствует дополнительным напряжениям на ребре.

Разделим смещение $\mathbf{u}$ на продольную и поперечную части: $\mathbf{u} = \mathbf{u}^l + \mathbf{u}^t, \operatorname{div} \mathbf{u}^t = 0$, так что $\mathbf{u}^l = \nabla f$, $\mathbf{u}^t = \mathbf{u} - \nabla f$. Тогда из (1) приходим к уравнениям Гельмгольца:

$$(\Delta + K^2)\mathbf{u}^l = 0, \qquad (14)$$

$$(\Delta + æ^2)\mathbf{u}^t = 0, \qquad (15)$$

где $K^2 = \frac{\omega^2}{c_l^2}, æ^2 = \frac{\omega^2}{c_t^2}$, т.е. $K^2(\lambda + 2\mu) = æ^2 \mu$.

Далее используем дополнительную параметризацию, вводя скалярную функцию h:

$$\tau = f + \frac{\partial h}{\partial \zeta}.$$

Необходимо отметить, что аналогичная параметризация введена в [11], но там она охватывала только плоские поверхности. Выполненная здесь поэтапная параметризация позволяет сделать обобщение сразу на случай любых кривых поверхностей.

Далее, поскольку $\operatorname{div} \mathbf{u} = \Delta f = -K^2 f$, то через h и f можно выразить и функцию ψ:

$$-K^2 f = \partial_\zeta \psi + \Delta_2 \tau = \partial_\zeta \psi + \Delta_2 (f + \partial_\zeta h),$$

$$-(K^2 + \Delta_2) f = \partial_\zeta^2 f = \partial_\zeta (\psi + \Delta_2 h).$$

Последнее выражение с точностью до произвольной функции от (x, y) дает искомую связь[1]:

$$\psi = \partial_\zeta f - \Delta_2 h, \quad \tau = f + \partial_\zeta h. \qquad (16)$$

Подставляя выражения для ψ и τ в систему уравнений (11)–(13), приведем граничные условия на поверхности трещины к окончательному виду: при $\zeta = 0$

$$\left(\frac{1}{2}æ^2 + \Delta_2\right) f + \Delta_2 \frac{\partial h}{\partial \zeta} = g_1, \qquad (17)$$

[1] В области $z > 0$ данная параметризация совпадает с потенциалами, вводимыми согласно соотношению $\mathbf{u} = \nabla f + \operatorname{rot}([\nabla h, \mathbf{z}^0] + \chi \mathbf{z}^0)$, где $\mathbf{z}^0$ – орт оси z. На противоположной поверхности трещины выбранная параметризация отличается просто заменой $\mathbf{z}^0 \to -\mathbf{z}^0$.

$$\frac{\partial f}{\partial \zeta} - \left(\frac{1}{2}æ^2 + \Delta_2\right)h = g_2, \tag{18}$$

$$\frac{\partial}{\partial \zeta}\Delta_2\chi = g_3. \tag{19}$$

Здесь функции в правых частях задаются падающей волной $g_1 = \left(\frac{\lambda}{2\mu}\operatorname{div}\mathbf{u}^0 + \partial_\zeta u_\zeta^0\right)$, $\Delta_2 g_2 = -\frac{1}{2}\left[\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\frac{\partial u_x^0}{\partial x} + \frac{\partial u_y^0}{\partial y}\right) + \Delta_2 u_\zeta^0\right]$ и $g_3 = -\partial_\zeta(\partial_y u_x^0 - \partial_x u_y^0)$. Таким образом, в задаче о рассеянии объемной волны (продольной или поперечной с любой поляризацией) на плоской трещине любой формы граничные условия сведены к системе уравнений (17), (18) для скалярных функций f и h и независимому от них уравнению (19) для скалярной функции χ. Эти функции можно назвать потенциалами, причем f соответствует продольной волне, а h и χ — поперечным волнам, поляризованным во взаимно перпендикулярных плоскостях.

В 2D-случае, как на рис. 1б, получаем $\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial h}{\partial y} = 0$, и потенциалы f и h определяют смещения в продольной и вертикально (SV) поляризованной поперечной волнах, соответственно, а потенциал χ — смещения в горизонтально (SH) поляризованной поперечной волне. В 3D-случае $\frac{\partial f}{\partial y} \neq 0$, $\frac{\partial h}{\partial y} \neq 0$, $\frac{\partial \chi}{\partial y} \neq 0$, и все три потенциала f, h и χ определяют смещения, которые могут происходить как в плоскости падения, так и в плоскости трещины. Последнее имеет место, например, при рассеянии упругой волны на диске при произвольной ориентации волнового вектора падающей волны.

При отсутствии падающей волны $\mathbf{u}^0 = 0$ (т.е. $g_1 = g_2 = g_3 = 0$) уравнение (19) имеет только тривиальное решение $\chi = 0$, а система уравнений (17), (18), как будет показано ниже, имеет решение, соответствующее волнам Рэлея, которые распространяются вдоль трещины и затухают внутри объема.

3. ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ РАССЕЯННОГО ПОЛЯ

Рассматриваемая задача допускает точное решение в случае, когда поверхность трещины позволяет построить в явном виде базис собственных функций оператора Лапласа (скалярные гармоники трещины):

$$-\Delta_2\Psi_k = k^2\Psi_k, \quad (\Psi_k, \Psi_{k'}) = \delta_{kk'}.$$

Например, это возможно для трещины в виде диска.

Разложим скалярные функции f, h и χ по гармоникам типа $\chi = \Sigma\chi_k\Psi_k$. Уравнения (14), (15) вблизи трещины имеют вид

$$\left(\frac{d^2}{d\zeta^2} + K^2 - k^2\right)f_k = 0,$$

$$\left(\frac{d^2}{d\zeta^2} + æ^2 - k^2\right)h_k = 0, \quad \left(\frac{d^2}{d\zeta^2} + æ^2 - k^2\right)\chi_k = 0.$$

Отсюда следуют зависимости от ζ вида $f_k(\zeta) = e^{-p_l\zeta}f_k$, $h_k(\zeta) = e^{-p_t\zeta}h_k, \chi_k(\zeta) = e^{-p_t\zeta}\chi_k$, где коэффициенты в показателях экспонент определяются из соотношений

$$p_l = \begin{cases} \sqrt{k^2 - K^2} & \text{при} \quad k^2 > K^2, \\ -i\sqrt{K^2 - k^2} & \text{при} \quad k^2 < K^2, \end{cases}$$
$$p_t = \begin{cases} \sqrt{k^2 - æ^2} & \text{при} \quad k^2 > æ^2, \\ -i\sqrt{æ^2 - k^2} & \text{при} \quad k^2 < æ^2. \end{cases} \tag{20}$$

Данный выбор комплексных значений для p_l и p_t соответствует условию излучения, а действительных значений — затуханию внутрь объема. В итоге получим систему алгебраических уравнений

$$\left(\frac{1}{2}æ^2 - k^2\right)f_k + k^2 p_t h_k = g_{1k}, \tag{21}$$

$$-p_l f_k - \left(\frac{1}{2}æ^2 - k^2\right)h_k = g_{2k}, \tag{22}$$

$$k^2 p_t \chi_k = g_{3k}. \tag{23}$$

Теперь из уравнений (17)–(19) легко получить явный вид потенциалов f, h и χ в окрестности поверхности трещины:

$$f = \sum_k e^{-p_l\zeta}\left[\frac{-\left(\frac{1}{2}æ^2 - k^2\right)}{\Lambda(\omega,k)}g_1(k) + \frac{-p_l k^2}{\Lambda(\omega,k)}g_2(k)\right]\Psi_k(x), \tag{24}$$

$$h = \sum_k e^{-p_t\zeta}\left[\frac{p_l}{\Lambda(\omega,k)}g_1(k) + \frac{\left(\frac{1}{2}æ^2 - k^2\right)}{\Lambda(\omega,k)}g_2(k)\right]\Psi_k(x), \tag{25}$$

$$\chi = \sum_k e^{-p_t\zeta}\frac{1}{p_t k^2}g_3(k)\Psi_k(x), \tag{26}$$

где введено обозначение

$$\Lambda(\omega,k) = p_l p_t k^2 - \left(\frac{1}{2}æ^2 - k^2\right)^2,$$

$$g_a(k) = \int\Psi_k^*(x')g_a(x')d^2x'.$$

Здесь интеграл берется по всей поверхности трещины.

4. СКАЛЯРНЫЕ ГАРМОНИКИ ДЛЯ ТРЕЩИНЫ В ВИДЕ ДИСКА

Рассмотрим для определенности рассеяние упругой волны на трещине в виде диска. Чтобы найти скалярные гармоники, удобно сначала отобразить поверхность трещины на всю плоскость Oxy. Это можно сделать, если ввести метрику [12]

$$dl^2 = \rho^2(dx^2 + dy^2) = \rho^2(dr^2 + r^2 d\varphi^2),$$

где масштабная функция

$$\rho(r) = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad r < a, \\ \dfrac{a^2}{r^2} & \text{при} \quad r > a. \end{cases}$$

В области $r < a$ имеем стандартную плоскую метрику, которая соответствует стороне диска $z = +0$, тогда как метрика в области $r > a$ при замене $\tilde{r} = \dfrac{a^2}{r}$ переходит в метрику

$$dl^2 = \left(\frac{a^4}{r^4} dr^2 + \frac{a^4}{r^4} r^2 d\varphi^2\right) = d\tilde{r}^2 + \tilde{r}^2 d\varphi^2,$$

которая снова соответствует плоской области $\tilde{r} < a$, т.е. стороне диска $z = -0$. На ребре $r = a$ метрика содержит положительную дельта-подобную кривизну.

Сначала найдем собственные значения. С учетом представленной метрики решение уравнения вида $-\Delta_2\Psi_j = k_j^2\Psi_j$ удобно искать в полярной системе координат:

$$\Psi = Y_n(r)\Phi_n(\varphi) = Y_n(r)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\varphi},$$

где $n = 0, 1, 2, \ldots$ Подставляя собственные значения $\lambda_n = n^2$, получаем уравнение

$$\left(\frac{1}{\rho^2 r}\partial_r r\partial_r + k^2 - \frac{n^2}{\rho r^2}\right)Y_n = 0.$$

В области $r < a$ имеем $\rho = 1$ и приведенное выше уравнение заменой $x = x^+ = kr$ сводится к уравнению Бесселя порядка n. Его решением являются либо функции Бесселя $J_n(x)$ и функции Неймана $N_n(x)$, либо функции Ханкеля первого и второго рода $H_n^{\pm}(x)$. В области $r < a$ запишем это решение в виде

$$Y_n^+(r) = A_n^+ J_n(kr) + B_n^+ N_n(kr). \tag{27}$$

В области $r > a$ имеем $\rho = \dfrac{a^2}{r^2}$ и уравнение на собственные функции сводится к уравнению Бесселя заменой $x = x^- = \dfrac{ka^2}{r}$, а решение запишем в виде

$$Y_n^-(r) = A_n^- J_n\left(\frac{ka^2}{r}\right) + B_n^- N_n\left(\frac{ka^2}{r}\right). \tag{28}$$

Имея в виду дельта-подобную кривизну на ребре, в общем случае гармоники можно строить для оператора Лапласа–Бельтрами $(\Delta_2 + cP)\Psi = k^2\Psi$, где c – произвольная константа, а P – скалярная кривизна поверхности. Однако при $c \neq 0$ производные на ребре будут содержать разрыв, что приведет к появлению дельта-источников на ребре (8), (16). Требование ограниченности поля смещения приводит к условию $c = 0$. Следует также сделать еще одно важное замечание. В используемой параметризации потенциалы и поле смещения являются непрерывными вместе со своими производными. При этом можно осуществить непрерывный предельный переход от некоторой гладкой поверхности к поверхности с ребром (в частности, выбирая семейство функций $\rho(r)$ в приведенной выше метрике). Однако в терминах декартовых координат x, y, z в результате предельного перехода компоненты поля смещения $\delta\mathbf{u}$ будут испытывать конечный разрыв на ребре. Это легко увидеть, используя связь $\zeta = |z|$, что приводит к соотношению $\delta u_z = \pm\psi$, где знак зависит от знака z. Непрерывность ψ соответствует появлению конечного скачка в δu_z. Аналогичный конечный скачок появляется и в компонентах δu_x и δu_y.

Итак, условия на ребре сводятся к непрерывности потенциалов и их производных на ребре. Это означает, что они должны совпадать при $r = a$:

$$Y_n^-(a) = Y_n^+(a),$$

$$\partial_r Y_b^-(r)|_a = \partial_r Y_n^+(r)|_a = -k\partial_x Y_n^-(x)|_a.$$

Здесь знаки $\pm$ относятся к областям $r < a$ и $r > a$ соответственно. Минус в последнем уравнении означает, что когда r растет, мы получаем вторую теневую поверхность трещины, при этом $\left.\dfrac{dx}{dr}\right|_a = -k$ $\left(\text{при } r > a \text{ мы имеем } x = x^- = \dfrac{ka^2}{r}\right)$.

Теперь необходимо потребовать, чтобы решение было конечным. Поэтому $B_n^{\pm} = 0$ и с учетом (27), (28), получим

$$(A_n^+ - A_n^-)J_n(ka) = 0,$$

$$(A_n^+ + A_n^-)J_n'(ka) = 0.$$

Здесь $J_n'(ka) = \dfrac{d}{d(kx)}J_n(kx)|_a$.

Эти соотношения определяют спектр (собственные значения) оператора Лапласа и формы основных скалярных гармоник на трещине. Собственные значения k_j разделяются на две серии. Первая соответствует собственным значениям k_s, заданным уравнением $J_n'(k_s a) = 0$, и собственные функции принимают вид

$$\Upsilon_{nj}(r) = A_n \begin{cases} J_n(k_s r) & \text{при} \quad r < a, \\ J_n\left(\frac{k_s a^2}{r}\right) & \text{при} \quad r > a. \end{cases}$$

Вторая серия соответствует собственным значениям k_a, заданным уравнением $J_n(k_a a) = 0$, и собственные функции принимают вид

$$Y_{na}(r) = A_n \begin{cases} J_n(k_a r) & \text{при} \quad r < a, \\ -J_n\left(\frac{k_a a^2}{r}\right) & \text{при} \quad r > a. \end{cases}$$

Коэффициенты A_n определяются из условий нормировки

$$\int_0^\infty Y_{nj}^2(r)\rho^2 r dr = 1$$

и дают

$$A_n^2 = \left(2\int_0^a \left[J_n(k_j r)\right]^2 r dr\right)^{-1}.$$

5. ПРИМЕР: РАССЕЯНИЕ SH-ВОЛНЫ НА ДИСКЕ

Итак, любая скалярная функция на трещине M может быть разложена по базису $\Psi_{nj}(r, \phi) = Y_{nj}(r)\Phi_n(\phi)$ следующим образом:

$$f(r,\phi) = \Sigma f_{nj}\Psi_{nj}(r,\phi),$$

где

$$f_{nj} = \int_\gamma \Psi_{nj}^*(r,\phi) f(r,\phi)\rho^2 r dr d\phi.$$

Приведенные выражения позволяют записать общее решения для всех трех потенциалов. В явном виде оно представляет собой довольно громоздкую конструкцию. Поэтому здесь для примера рассмотрим рассеяние на дискообразной трещине поперечной SH-волны вида

$$\chi^0 = \frac{e^{i\varkappa|x-x^0|}}{4\pi|x-x^0|} = \frac{i}{8\pi}\sum_n \int dk_z e^{in(\varphi-\varphi^0)} e^{ik_z(z-z_0)} H_n^+(sr_>) J_n(sr_<). \quad (29)$$

Здесь $s = \sqrt{\varkappa^2 - k_z^2}$, а $r_<$ и $r_>$ обозначают большую и меньшую величину из r и r_0. Тогда из (26) $\chi = \sum_k e^{-p_t\zeta}\chi_k\Psi_k(x)$, и разложение по гармоникам диска $\chi_k = \chi_{nj}$ принимает вид

$$\chi_{nj} = \frac{i}{8\pi p_t} e^{-in\varphi^0} \int dk_z i k_z e^{-ik_z z^0} \times \\ \times \int_M n_z Y_{nj}^*(r) H_n^+(sr_>) J_n(sr_<) r\rho^2 dr,$$

где $n_z = \pm 1$. Будем полагать $r_0 > a > r$. Тогда получим

$$\chi_{na} = \frac{-2A_n}{8\pi p_t} e^{-in\varphi^0} \int dk_z k_z e^{-ik_z z^0} H_n^+(sr^0) C_n(k_a, s),$$

где $C_n(k_a, s) = \int_0^a J_n(k_a r) J_n(sr) r dr$ — коэффициенты разложения падающей волны, а поле в окрестности трещины имеет вид

$$\chi(r,\phi,\zeta) = \sum_{n,a}^{k_a<\varkappa} e^{iS_t\zeta} Y_{na}(r) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi}\chi_{na}.$$

Заметим, что здесь количество слагаемых конечно: учтены только члены с комплексными показателями, поскольку только они описывают поток энергии от трещины. Все остальные члены затухают внутри объема.

Далее, из (6) для рассеянной волны во всем объеме получим выражение

$$\chi(x,y,z) = \partial_z \int_M [\chi]\Psi d^2 f',$$

или

$$\chi(r,\phi,z) = \sum \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \int e^{ik_z z}\chi(n,r,k_z)\frac{dk_z}{\sqrt{2\pi}}, \quad (30)$$

где коэффициенты разложения имеют вид

$$\chi(n,r,k_z) = \left(\frac{-2\sqrt{2\pi}}{4}\right) k_z \sum_a^{k_a<\varkappa} \chi_{na} \times \\ \times \int_0^a Y_{na}(r') H_n^+(sr_>') J_n(sr_<') r' dr'.$$

Здесь $r_<'$ и $r_>'$ соответствуют наибольшей и наименьшей из r, r'. Полагая в точке наблюдения

$r > a$, получим окончательно в явном виде выражение для коэффициентов разложения:

$$\chi(n,r,k_z) = \left(\frac{A_n^2\sqrt{2\pi}}{8\pi}\right)\sum_a^{k_a<\varkappa}\left(\frac{ik_zH_n^+(sr)C_n(k_a,s)e^{-in\varphi^0}}{\sqrt{\varkappa^2-k_a^2}}\right)\times$$
$$\times\int dk_z'k_z'e^{-ik_z'z^0}H_n^+(s'r_0)C_n(k_a,s'), \qquad (31)$$

где $s = \sqrt{\varkappa^2 - k_z^2}$ и $s' = \sqrt{\varkappa^2 - k_z'^2}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, соотношения (24)–(26) вместе с (6) полностью определяют потенциалы f, h, χ и смещение в рассеянной волне $\delta\mathbf{u}$ в зависимости от параметров падающей волны (в рассмотренном примере (29) – сферической). Расчеты по этим соотношениям сводятся к вычислениям в квадратурах. Выражения (24)–(26) представляют собой вынужденные колебания трещины под воздействием внешней падающей волны $\mathbf{u}^0$. Эти колебания, вообще говоря, не всегда приводят к излучению волн, т.е. наличию потока энергии от трещины. Для получения дифракционной картины на достаточном удалении от трещины следует учитывать не все члены суммы (24)–(26), а только первые члены, соответствующие комплексным значениям показателей p_l и p_t в (20), т.е. ограничивая суммы максимальным значением $k^2 < K^2, æ^2$. Члены с действительными значениями показателей затухают в направлении нормали и не дают вклада в поток энергии внутрь объема от трещины. Часть подобных членов в (24), (25) отвечает возбуждению волн Рэлея [13, 14], которые для рассеянного поля не дают вклада в дифракционную картину, хотя и поглощают часть падающей на трещину энергии. В самом деле, при $k^2 > K^2$ оба корня в (20) действительные, и знаменатель в (24), (25) обращается в нуль $\Lambda(\omega, k) = 0$ при $\omega = ck$, где скорость соответствующей поверхностной волны определяется уравнением

$$\Lambda(ck,k) = k^4\left(\sqrt{\frac{c_t^2-c^2}{c_t^2}}\sqrt{\frac{c_l^2-c^2}{c_l^2}} - \left(\frac{2c_t^2-c^2}{2c_t^2}\right)^2\right) = 0.$$

Раскладывая знаменатель $\Lambda(\omega, k)$ в ряд, получим

$$\frac{1}{\Lambda(\omega,k)} = \frac{1}{\Lambda'}\left(\frac{1}{(\omega+i\varepsilon)^2 - c^2k^2}\right) =$$
$$= \frac{1}{\Lambda'}\left(\frac{P}{\omega^2 - c^2k^2} - i\pi\frac{\omega}{|\omega|}\delta(\omega^2 - c^2k^2)\right),$$

где $\Lambda' = \left.\dfrac{d\Lambda(\omega,k)}{d(\omega^2)}\right|_{\omega=ck}$.

Здесь первый член соответствует интегралу в смысле главного значения, а второй, содержащий дельта-функцию, соответствует волнам Рэлея. Для диска конечного радиуса спектр возможных значений k_j^2 является дискретным. Это означает, что резонансные члены будут возникать только на дискретном наборе частот.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ginzel E.* Ultrasonic Time of Flight Diffraction. Waterloo, Ontario, Canada: Eclipse Scientific, 2013. 249 p.
2. *Алешин Н.П., Крысько Н.В., Козлов Д.М., Кусый А.Г.* Экспериментальное исследование дифракции упругих волн на модели трещины // Дефектоскопия. 2021. № 1. С. 15–22.
3. *Алешин Н.П., Крысько Н.В., Щипаков Н.А., Могильнер Л.Ю.* Оптимизация параметров механизированного ультразвукового контроля протяженных сварных швов // Наука и технологии трубопроводного транспорта нефти и нефтепродуктов. 2020. Т. 10. № 6. С. 352–363.
4. *Maue A.W.* Die Beugung Elastischer Wellen an der Halbebene // Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Mechanik. 1953. 33. H. 1/2. S. 1–10.
5. *Miklowitz J.* The theory of elastic waves and waveguides. Amsterdam–N.Y.–Oxford: North-Holland Publishing Company, 1978. 618 p.
6. *Martin P.A., Wickham G.R.* Diffraction of elastic waves by a penny-shaped crack: analytical and numerical results // Proc. Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences. 1983. V. 390. № 1798. P. 91–129.
7. *Kanaun S.* Scattering of monochromatic elastic waves on a planar crack of arbitrary shape // Wave Motion. 2014. V. 51. № 2. P. 360–381.
8. *Zernov V., Fradkin L., Darmon M.* A refinement of the Kirchhoff approximation to the scattered elastic field // Elsevier. Ultrasonics. 2012. V. 52. P. 830–835.
9. *Djakou A.K, Darmon M., Fradkin L., Potel C.* The Uniform Geometrical Theory of Diffraction for Elastodynamics: Plane wave scattering from a half-plane // J. Acoust. Soc. Am. November 2015. V. 138. № 5. P. 3272–3281.
10. *Хенл Х., Мауэ А., Вестпфаль К.* Теория дифракции. М.: Мир, 1964. 428 с.
11. *Алешин Н.П., Каменский В.С., Каменский Д.В., Могильнер Л.Ю.* Дифракция упругой волны на свободном от напряжений диске // ДАН СССР. 1988. Т. 302. №. 4. С. 777–780.
12. *Savelova E.P.* On possible origin of an anisotropy in the speed of light in vacuum // Gen. Relativ. Gravit. 2016. V. 48. P. 85.
13. *Викторов И.А.* Звуковые поверхностные волны в твердых телах. М.: Наука, 1981. 286 с.
14. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. VI. Теория упругости: Учеб. пособие. 4-е изд., испр. и доп. М.: Наука, 1987. 248 с.

GENERAL SOLUTION FOR THE PROBLEM OF SCATTERING OF ELASTIC WAVES ON A PLANE CRACK

Academician of the RAS N. P. Aleshin[a], A. A. Kirillov[a,b], L. Yu. Mogilner[c], and E. P. Savelova[b]

[a] *"Welding and Testing" of MSTU n.a. Bauman, Moscow, Russian Federation*

[b] *Bauman Moscow Technical University, Moscow, Russian Federation*

[c] *Pipeline Transport Institute, LLC (Transneft R&D, LLC), Moscow, Russian Federation*

The 3D problem of elastic wave scattering by cracks in a homogeneous isotropic medium is considered. The Green's function method and specially introduced auxiliary scalar functions (potentials) are used. For the plane cracks it is shown, that the boundary conditions can be divided into two independent parts. The first is a system of two differential equations whose solutions lead to Rayleigh waves on the crack surfaces. The second includes the differential equation similar to that for acoustic waves scattering on a rigid inclusion. On the example of scattering on a penny-shaped crack, it is shown that the expressions for the scattered fields can be obtained in closed form, which is important, for example, for investigating crack detection by ultrasonic flaw detection methods.

Keywords: ultrasound, elastic waves, scattering, planar crack, penny-shaped crack

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 629.786.2:629.784

ПОДХОД ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕССА РАСКРЫТИЯ ТРАНСФОРМИРУЕМЫХ КОСМИЧЕСКИХ КОНСТРУКЦИЙ

© 2021 г. В. Н. Бакулин[1,*], С. В. Борзых[2,**]

Представлено академиком РАН А.М. Липановым 08.04.2021 г.
Поступило 17.04.2021 г.
После доработки 17.04.2021 г.
Принято к публикации 22.04.2021 г.

Предложен универсальный подход к созданию динамических моделей раскрытия космических конструкций, позволяющий на единой методологической основе исследовать актуальные и перспективные схемы раскрытия. Подход предполагает рассмотрение пространственного движения структурно-сложной механической системы, включающей корпус аппарата и структурные элементы раскрываемой конструкции и находящейся под действием специфических силовых факторов, создаваемых средствами раскрытия. Предлагаемый подход рассмотрен на примере процесса раскрытия солнечных батарей – одной из ключевых операций функционирования космических аппаратов, надежностью выполнения которой напрямую определяется успешность выполнения миссии. Для определения сил и моментов в узлах сочленения раскрываемой конструкции получена специальная система уравнений связей. Предложенный подход значительно расширяет круг моделируемых процессов трансформации космических конструкций и позволяет провести анализ не только кинематики и динамики раскрываемой конструкции, но и определить возмущения космического аппарата, вызванные процессом раскрытия. Он может использоваться не только для практических задач выбора характеристик системы раскрытия, но и для моделирования ситуаций, принципиально не воспроизводимых в условиях наземной экспериментальной отработки.

Ключевые слова: универсальный подход, динамические модели, раскрываемые космические конструкции, структурно-сложная механическая система, солнечные батареи, уравнения связей

DOI: 10.31857/S2686740021040040

ВВЕДЕНИЕ

Создание современных летательных аппаратов (ЛА) требует решения многих актуальных проблем [1, 2]. В настоящее время существует устойчивая тенденция постоянного расширения области применения размещенных в космосе объектов – орбитальных станций, спутников, спутниковых группировок и т.д. Кроме ставших традиционными прикладных направлений – связи, мониторинга земной поверхности, космической биологии и медицины, космического материаловедения [3] и ряда других, появляются новые направления, нацеленные на решение перспективных научных и прикладных задач, таких как исследования дальнего космоса [4], глобальная энергетика и экология [5, 6], освоение внеземных ресурсов. Космические аппараты (КА) или целые комплексы (рис. 1) в связи с этим приобретают все более сложную структуру, для которой характерным является наличие крупногабаритных космических трансформируемых конструкций – различного типа антенн, выдвижных штанг, солнечных батарей и т.д. [7–9].

Такого рода трансформируемые или раскрываемые конструкции на этапе выведения ракетой-носителем, межорбитальным буксиром или разгонным блоком должны находиться в компактном сложенном транспортировочном состоянии и трансформироваться в рабочее конечное положение после окончания выведения, на целевой орбите.

Перспективные схемы раскрытия трансформируемых космических конструкций, проблемы математического моделирования динамики процесса их раскрытия рассмотрены в работе [7], моделирование безопасного отделения пилотируемых транспортных кораблей от орбитальной

[1] *Институт прикладной механики Российской академии наук, Москва, Россия*
[2] *ПАО Ракетно-космическая корпорация “Энергия” им. С.П. Королева, Королев, Московская область, Россия*
**E-mail: vbak@yandex.ru*
***E-mail: rigidbor@gmail.com*

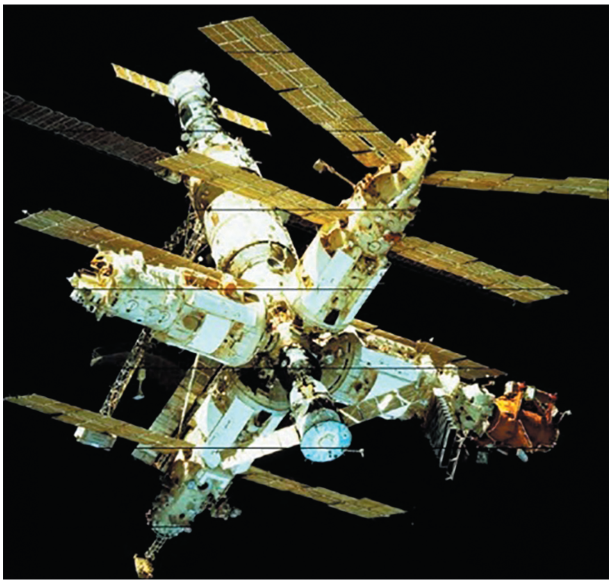


Рис. 1. Международная космическая станция.

станции – в работе [10], исследование процессов отделения малых космических аппаратов от транспортно-пускового контейнера, установленного на грузовом корабле "Прогресс МС", как во время автономного полета корабля, так и в период его пребывания в составе Международной космической станции, – в [11], алгоритмы отделения космического корабля "Союз МС" от нестабилизированной Международной космической станции – в [12].

Совершенно очевидно, что отказ системы раскрытия по какой-либо причине (непрохождение команды на раскрытие, отказ пиротехники, отказ механизмов и т.д.) практически неизбежно означает невыполнение целевой задачи миссии.

В связи с этим к надежности системы раскрытия, правильности выбора характеристик ее элементов предъявляются чрезвычайно высокие требования. Далеко не всегда при наземной экспериментальной отработке системы раскрытия удается в достаточной мере воспроизвести реальные условия на орбите, поэтому на этапе проектирования основным средством подтверждения обоснованности принятых технических решений является математическое моделирование с максимальным учетом особенностей процесса трансформации и условий его протекания.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Наиболее распространенным подходом при моделировании движения сложных механических систем, который применялся, в том числе и авторами, является использование динамических уравнений, основанных на классических формах Эйлера, Лагранжа и Аппеля. Это позволяет ограничить размерность системы линейных уравнений, решаемых на каждом шаге интегрирования, числом обобщенных координат механической системы [13]. Однако при таком подходе неизбежен весьма трудоемкий этап составления для механической системы в целом сложных исходных выражений для момента количества движения (метод Эйлера), кинетической энергии (метод Лагранжа) и "энергии ускорений" (метод Аппеля), которые жестко привязаны к структуре механической системы, что исключает возможность оперативного формирования расчетной модели системы с меняющейся структурой и использование ранее составленных исходных выражений даже для систем с незначительно измененной структурой.

В то же время процесс раскрытия крупногабаритных трансформируемых конструкций может осуществляться в несколько последовательных фаз, и для моделирования раскрытия такого рода конструкций применение описанных выше подходов представляется нецелесообразным.

Принципиальным недостатком такого подхода также является и то, что использование классических форм динамических уравнений возможно только при отсутствии трения в механической системе. Кроме того, например, при использовании уравнений Лагранжа 2-го рода невозможно напрямую определить реакции в узлах сочленения элементов трансформируемой конструкции, а это является одной из основных целей анализа процесса.

В связи с этим представляется целесообразной разработка предлагаемого в данном сообщении подхода, который включал бы универсальное формирование расчетных моделей на базе парциальных геометрических, инерционных и жесткостных характеристик каждого тела системы, удобного для разработки эффективных численных алгоритмов и высокоскоростных программных реализаций. Этот подход значительно расширяет круг моделируемых процессов трансформации космических конструкций и позволяет провести анализ не только кинематики и динамики раскрываемой конструкции, но и определить возмущения космических аппаратов, вызванные процессом раскрытия. Он может использоваться не только для практических задач выбора характеристик системы раскрытия, но и для моделирования ситуаций, принципиально не воспроизводимых в условиях наземной экспериментальной отработки.

Предлагаемый подход рассмотрен на примере расчета процесса раскрытия солнечных батарей – одной из ключевых операций функционирования космических аппаратов, надежностью выполнения которой напрямую определяется успешность выполнения миссии.

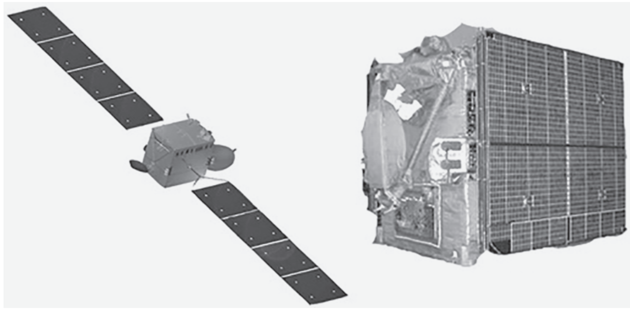


Рис. 2. Пример общего вида космического аппарата с солнечными батареями: слева – рабочее положение; справа – транспортировочное положение.

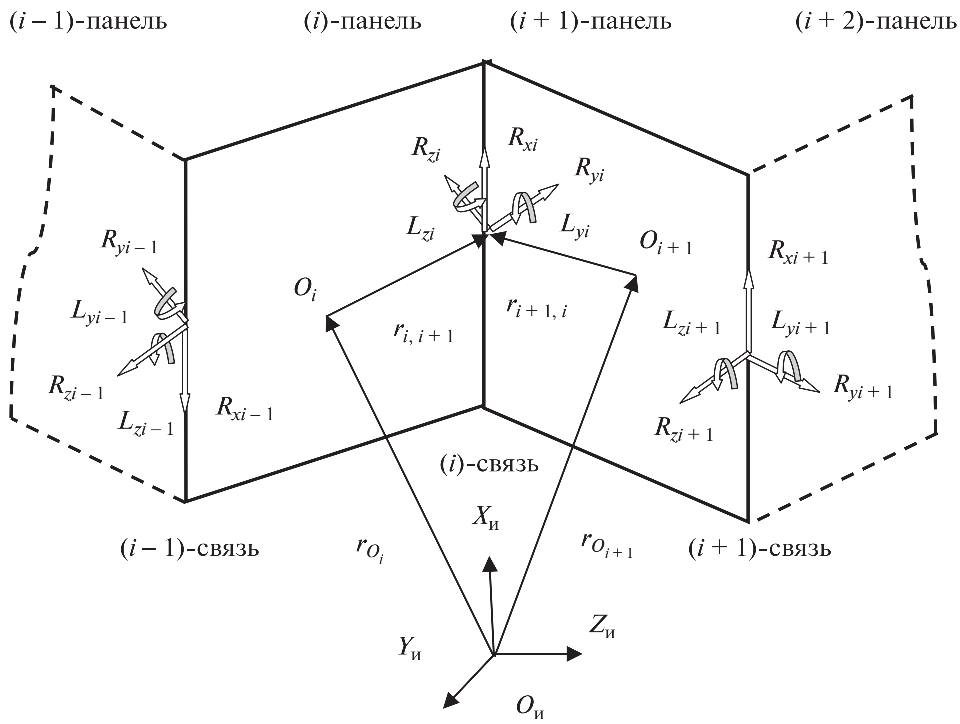


Рис. 3. Расчетная схема.

ПОДХОД ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕССА РАСКРЫТИЯ ТРАНСФОРМИРУЕМЫХ КОСМИЧЕСКИХ КОНСТРУКЦИЙ

Рассматривается механическая система, включающая корпус КА, штанги и панели солнечных батарей (СБ) (рис. 2). Для каждого из тел системы записываются уравнения движения центра масс и уравнения вращения относительно него на основании законов изменения количества движения и кинетического момента, а для определения силовых факторов, обусловленных взаимодействием отдельного тела с соседними телами, записываются специальные уравнения связей, сводимые в конечном итоге к системе линейных уравнений с переменными по времени коэффициентами.

Поскольку связь между отдельными элементами СБ выполнена в виде оси вращения, то действие на данную панель соседних “отброшенных” элементов учитывается в виде сил реакций (три компоненты вектора сил) и моментов (две компоненты, поскольку связь допускает разворот относительно общей оси x) (рис. 3).

Уравнения поступательного перемещения центра масс каждого тела в инерциальных осях и уравнения вращательного движения относительно центра масс в связанных осях соответственно будут иметь вид

$$m_i \mathbf{a}_{oi} = \mathbf{F}_{oi} + \mathbf{R}_i,$$

$$[I_{oi}]\frac{\tilde{d}\boldsymbol{\omega}_i}{dt} + \boldsymbol{\omega}_i \times ([I_{oi}]\boldsymbol{\omega}_i) = \mathbf{L}_{oi} + \mathbf{L}_i + \mathbf{L}_{ci},$$

где $\mathbf{a}_{oi}$, $\boldsymbol{\varepsilon}_i = \frac{\tilde{d}\boldsymbol{\omega}_i}{dt}$ – соответственно ускорение центра масс и угловое ускорение i-го тела системы, локальная производная $\frac{\tilde{d}\boldsymbol{\omega}_i}{dt}$ берется в его связанной системе координат, m_i, $[I_{oi}]$ – соответственно масса и тензор инерции i-го тела, $\mathbf{F}_{oi}$ – главный вектор внешних сил, включая силы, создаваемые средствами раскрытия батарей, $\mathbf{R}_i$ – главный вектор сил реакций связей, действующих на i-е тело, $\mathbf{L}_{oi}$ – главный момент внешних сил, $\mathbf{L}_i$ – главный момент сил реакций связей, $\mathbf{L}_{ci}$ – главный реактивный момент.

Отсюда можно выразить $\mathbf{a}_{oi}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}_i$:

$$\begin{gathered}\mathbf{a}_{oi} = m_i^{-1}(\mathbf{F}_{oi} + \mathbf{R}_i),\\ \boldsymbol{\varepsilon}_i = [I_{oi}]^{-1}\{-\boldsymbol{\omega}_i \times ([I_{oi}]\boldsymbol{\omega}_i) + \mathbf{L}_{oi} + \mathbf{L}_i + \mathbf{L}_{ci}\}.\end{gathered} \tag{1}$$

Результатом интегрирования уравнений (1) будут скорости центров масс тел $\mathbf{V}_{oi}$, координаты центров масс $\mathbf{r}_{oi}$ в инерциальной системе координат и угловые скорости $\boldsymbol{\omega}_i$ тел.

Для определения реакций связей необходимо записать дополнительно уравнения связи, вид которых определяется конкретным характером связи. Поскольку два последовательно соединенных тела имеют общие точки связи (рис. 3), то радиусы-векторы в инерциальной системе координат и полные скорости этих точек, принадлежащих двум разным телам, должны быть одинаковы. Кроме того, одинаковыми должны быть проекции угловой скорости на оси Y_{ci}, Z_{ci} системы координат связи.

С учетом изложенного можно записать

$$\begin{gathered}\mathbf{a}_{i,i+1} - \mathbf{a}_{i+1,i} = 0\\ \boldsymbol{\varepsilon}_i - \boldsymbol{\varepsilon}_{i+1} + \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\omega}_{i+1} = 0,\end{gathered} \tag{2}$$

где $\mathbf{a}_{i,i+1}$, $\mathbf{a}_{i+1,i}$ – значения ускорений некоторой связи, расположенной на оси вращения и принадлежащей i-му и $(i+1)$-му телам (рис. 3). Первый индекс в индексации ускорений точек связи означает принадлежность к данному телу (звену СБ), а второй – индекс того тела, с которым связано данное тело.

Появление последнего слагаемого во втором из выражений (2) обусловлено вращением системы координат связи $O_{ci}X_{ci}Y_{ci}Z_{ci}$ относительно систем координат i-го и $(i+1)$-го тел.

В выражениях (2) полные ускорения точек связи i-го и $(i+1)$-го тел запишутся следующим образом:

$$\mathbf{a}_{i,i+1} = \mathbf{a}_{oi} + \boldsymbol{\omega}_i \times (\boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{r}_{i,i+1}) + \boldsymbol{\varepsilon}_i \times \mathbf{r}_{i,i+1},$$

$$\mathbf{a}_{i+1,i} = \mathbf{a}_{oi+1} + \boldsymbol{\omega}_{i+1} \times (\boldsymbol{\omega}_{i+1} \times \mathbf{r}_{i+1,i}) + \boldsymbol{\varepsilon}_{i+1} \times \mathbf{r}_{i+1,i}.$$

Индексация радиус-векторов (рис. 3) такая же, как индексация ускорений точек связи в выражении (2).

В последнее выражение входят линейные ускорения центров масс тел и угловые ускорения их вращения относительно центра масс. Они определены выражениями (1). Входящие в (1) главные вектора реакций связей $\mathbf{R}_i$, моментов реакций связей $\mathbf{L}_i$ и реактивных моментов $\mathbf{L}_{ci}$ i-го тела (рис. 3) определяются соотношениями:

$$\begin{gathered}\mathbf{R}_i = [M_{ci\to i}]\cdot\mathbf{R}_i^c - [M_{ci-1\to i}]\cdot\mathbf{R}_{i-1}^c,\\ \mathbf{L}_{ci} = [M_{ci\to i}]\cdot\mathbf{L}_i^c - [M_{ci-1\to i}]\cdot\mathbf{L}_{i-1}^c,\\ \mathbf{L}_i = -[\Phi_{i,i+1}]\cdot\mathbf{R}_i^c + [\Phi_{i,i-1}]\cdot\mathbf{R}_{i-1}^c,\end{gathered} \tag{3}$$

$$\begin{gathered}\mathbf{R}_{i+1} = -[M_{ci\to i+1}]\cdot\mathbf{R}_i^c + [M_{ci+1\to i+1}]\cdot\mathbf{R}_{i+1}^c,\\ \mathbf{L}_{ci} = -[M_{ci\to i+1}]\cdot\mathbf{L}_i^c + [M_{ci+1\to i+1}]\cdot\mathbf{L}_{i+1}^c,\\ \mathbf{L}_{i+1} = [\Phi_{i+1,i}]\cdot\mathbf{R}_i^c - [\Phi_{i+1,i+2}]\cdot\mathbf{R}_{i+1}^c,\end{gathered}$$

в которых компоненты тензоров $[\boldsymbol{\Phi}]$ определяются из выражений

$$\begin{gathered}[M_{ci\to i}]\cdot\mathbf{R}_i^c \times \mathbf{r}_{i,i+1} = [\Phi_{i,i+1}]\cdot\mathbf{R}_i^c,\\ [M_{ci-1\to i}]\cdot\mathbf{R}_{i-1}^c \times \mathbf{r}_{i,i-1} = [\Phi_{i,i-1}]\cdot\mathbf{R}_{i-1}^c,\end{gathered}$$

$$\begin{gathered}[M_{ci\to i+1}]\cdot\mathbf{R}_i^c \times \mathbf{r}_{i+1,i} = [\Phi_{i+1,i}]\cdot\mathbf{R}_i^c,\\ [M_{ci+1\to i+1}]\cdot\mathbf{R}_{i+1}^c \times \mathbf{r}_{i+1,i+2} = [\Phi_{i+1,i+2}]\cdot\mathbf{R}_{i+1}^c,\end{gathered}$$

где необходимые матрицы перехода между системами координат определяются известными методами [13–15].

Подстановки (3) в (2) дают окончательное выражение полного линейного ускорения i-й точки i-го тела. Выражение ускорения i-й точки $(i+1)$-го тела получается аналогично. Тогда первое из уравнений связи (2) запишется следующим образом:

$$\begin{gathered}m_i^{-1}(\mathbf{F}_{oi} + [M_{ci\to i}]\cdot\mathbf{R}_i^c - [M_{ci-1\to i}]\cdot\mathbf{R}_{i-1}^c) +\\ + \boldsymbol{\omega}_i \times (\boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{r}_{i,i+1}) + [I_{oi}]^{-1}\{-\boldsymbol{\omega}_i \times ([I_{oi}]\boldsymbol{\omega}_i) +\\ + \mathbf{L}_{oi} - [\Phi_{i,i+1}]\cdot\mathbf{R}_i^c + [\Phi_{i,i-1}]\times\\ \times \mathbf{R}_{i-1}^c + [M_{ci\to i}]\cdot\mathbf{L}_i^c - [M_{ci-1\to i}]\cdot\mathbf{L}_{i-1}^c\}\times\mathbf{r}_{i,i+1} =\\ = m_{i+1}^{-1}(\mathbf{F}_{oi+1} + -[M_{ci\to i+1}]\cdot\mathbf{R}_i^c +\\ + [M_{ci+1\to i+1}]\cdot\mathbf{R}_{i+1}^c) + \boldsymbol{\omega}_{i+1}\times(\boldsymbol{\omega}_{i+1}\times\mathbf{r}_{i+1,i}) +\\ + [I_{oi+1}]^{-1}\{-\boldsymbol{\omega}_{i+1}\times([I_{oi+1}]\boldsymbol{\omega}_{i+1}) + \mathbf{L}_{oi+1} + [\Phi_{i+1,i}]\times\\ \times \mathbf{R}_i^c - [\Phi_{i+1,i+2}]\cdot\mathbf{R}_{i+1}^c - [M_{ci\to i+1}]\cdot\mathbf{L}_i^c +\\ + [M_{ci+1\to i+1}]\cdot\mathbf{L}_{i+1}^c\}\times\mathbf{r}_{i+1,i}.\end{gathered}$$

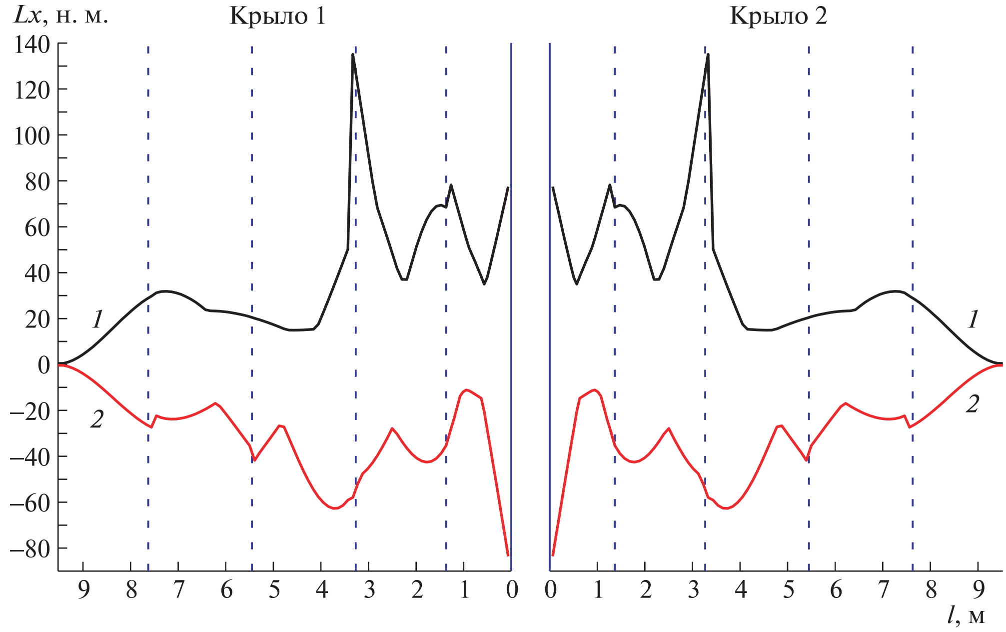


Рис. 4. Огибающая эпюра изгибающего момента.

Второе из уравнений связи (2) путем аналогичных подстановок примет вид

$$[I_{oi}]^{-1}\{-\boldsymbol{\omega}_i\times([I_{oi}]\boldsymbol{\omega}_i)+\mathbf{L}_{oi}-[\Phi_{i,i+1}]\cdot\mathbf{R}_i^c+ \\ +[\Phi_{i,i-1}]\cdot\mathbf{R}_{i-1}^c+[M_{ci\to i}]\cdot\mathbf{L}_i^c-[M_{ci-1\to i}]\cdot\mathbf{L}_{i-1}^c\}- \\ -[I_{oi+1}]^{-1}\{-\boldsymbol{\omega}_{i+1}\times([I_{oi+1}]\boldsymbol{\omega}_{i+1})+\mathbf{L}_{oi+1}+[\Phi_{i+1,i}]\times \\ \times\mathbf{R}_i^c-[\Phi_{i+1,i+2}]\cdot\mathbf{R}_{i+1}^c-[M_{ci\to i+1}]\cdot\mathbf{L}_i^c+ \\ +[M_{ci+1\to i+1}]\cdot\mathbf{L}_{i+1}^c\}+\boldsymbol{\omega}_i\times\boldsymbol{\omega}_{i+1}=0.$$

В общем виде полученные уравнения связи можно записать следующим образом:

$$\begin{gathered}[A_{i-1}^R]\,\mathbf{R}_{i-1}^c+[A_i^R]\,\mathbf{R}_i^c+[A_{i+1}^R]\mathbf{R}_{i+1}^c+ \\ +[A_{i-1}^L]\,\mathbf{L}_{i-1}^c+[A_i^L]\,\mathbf{L}_i^c+[A_{i+1}^L]\,\mathbf{L}_{i+1}^c=\mathbf{B}_i, \\ [C_{i-1}^R]\,\mathbf{R}_{i-1}^c+[A_i^R]\,\mathbf{R}_i^c+[A_{i+1}^R]\,\mathbf{R}_{i+1}^c+ \\ +[A_{i-1}^L]\,\mathbf{L}_{i-1}^c+[A_i^L]\,\mathbf{L}_i^c+[A_{i+1}^L]\,\mathbf{L}_{i+1}^c=\mathbf{D}_i.\end{gathered} \tag{4}$$

Таким образом, определение реакций связи, как это видно из структуры соотношений (4), сводится к решению системы линейных уравнений относительно неизвестных компонент векторов реакций связи $\mathbf{R}_i^c$ и реактивных моментов $\mathbf{L}_i^c$, которые затем подставляются в (1).

Уравнения связи в виде (4) справедливы для всех связей в “к”-й панели (крыле) (рис. 3), за исключением первой ($i = 1$) и последней ($i = I_к$).

Для $i = I_к$ $\mathbf{R}_{k,i+1}^c=0$, $\mathbf{L}_{k,i+1}^c=0$.

Для первого тела (корпуса) главный вектор и главный момент первой связи (со штангами) получается суммированием по числу крыльев, т.е. для k-го крыла при индексе связи $i = 1$ уравнения связи будут иметь вид

$$\sum_{k=1}^{k}[A_{k,1}^R]\mathbf{R}_{k,1}^c+[A_{k,2}^R]\mathbf{R}_{k,2}^c+ \\ +\sum_{k=1}^{k}[A_{k,1}^L]\mathbf{L}_{k,1}^c+[A_{k,2}^L]\mathbf{L}_{k,2}^c=\mathbf{B}_{k,1}, \\ \sum_{k=1}^{k}[C_{k,1}^R]\mathbf{R}_{k,1}^c+[C_{k,2}^R]\mathbf{R}_{k,2}^c+ \\ +\sum_{k=1}^{k}[C_{k,1}^L]\mathbf{L}_{k,1}^c+[C_{k,2}^L]\mathbf{L}_{k,2}^c=\mathbf{D}_{k,1}$$

В качестве иллюстрации на рис. 4 приведены эпюры изгибающего момента для аппарата, изображенного на рис. 2 (область положительных значений – *1*, отрицательных – *2*). Эпюры получены выборкой по времени максимальных значений в период процесса раскрытия. Они позволяют определить моментную нагрузку на вал привода раскрытия аппарата (значения, соответствующие нулевой координате), а также пиковые значения момента в “крыльях” солнечной батареи.

Отметим особенности моделирования многофазных схем раскрытия солнечных батарей. В процессе раскрытия общее число степеней свободы системы меняется (увеличивается), так как для каждой новой фазы характерно снятие дополнительных связей.

При предложенном подходе появление каждой новой степени свободы означает снятие ограничений по соответствующей этой степени свободы координате и обнуление проекции силы или момента реакции связи. Применительно к расчетной схеме потребуется всего лишь вычеркнуть из итоговой матрицы коэффициентов нужную строку и столбец, что лишь уменьшит размерность системы уравнений связей.

ВЫВОДЫ

Предложенный подход имеет следующие преимущества:

1. Универсальность подхода. Уравнения движения всех тел (свободных или нет) записаны одинаково. Отличие состоит в структуре главных векторов сил и моментов реакций связей, определяемой конкретным типом связи.

2. Подход дает возможность гибко формировать расчетную схему любой пространственной конфигурации. Подход легко поддается формализации и алгоритмизации.

3. Часто одной из основных целей расчета является определение реакций связей. В рамках данного подхода определение реакций связей — неотъемлемая процедура.

4. Определяется как абсолютное, так и относительное движение любого элемента рассматриваемой механической системы.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы удостоены премии имени К.Э. Циолковского Российской академии наук за 2020 год в области космонавтики.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена в рамках государственного задания, номер государственной регистрации темы АААА-А19-119012290177-0.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Липанов А.М., Алиев А.В.* Проектирование РДТТ. М.: Машиностроение, 1995. 397 с.
2. *Бакулин В.Н., Острик А.В.* Комплексное действие излучений и частиц на тонкостенные конструкции с гетерогенными покрытиями. М.: Физматлит, 2015. 280 с.
3. *Легостаев В.П., Марков А.В., Сорокин И.В.* Целевое использование Российского сегмента Международной космической станции: значимые научные результаты и перспективы // Космическая техника и технологии. 2013. № 2. С. 3–18.
4. *Рулев Д.Н., Рулев Н.Д.* Планирование наблюдений астрономических объектов с космического аппарата с учетом ограничений на моменты выполнения наблюдений // Космическая техника и технологии. 2019. № 1 (24). С. 58–67.
5. *Израэль Ю.А., Лиознов Г.Л., Расновский А.А.* Возможности космических и ядерных технологий в реформировании мировой энергетики XXI века // Известия РАН. Энергетика. 2008. № 3. С. 3–19.
6. *Коротеев А.С., Семенов В.Ф., Семенов Ю.П., Сизенцев Г.А. и др.* Космическая техника и космонавтика в решении экологических проблем мировой энергетики XXI века // Известия РАН. Энергетика. 2006. № 1. С. 142–155.
7. *Бакулин В.Н., Борзых С.В., Щиблев Ю.Н.* Перспективные схемы раскрытия трансформируемых космических конструкций и проблемы моделирования динамики процесса их раскрытия // Материалы XIII Междунар. конф. по Прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (AMMAI'2020), посвященной 90-летию МАИ и 100-летию со дня рождения академика И.Ф. Образцова, сентябрь 2020. Алушта. М.: Изд-во МАИ, 2020. С. 405–407.
8. *Зимин В.Н., Бей Н.А.* Трансформируемые антенны больших размеров для геостационарных космических аппаратов // Антенны. 2005. № 10. С. 24–27.
9. *Хамиц И.И., Филиппов И.М., Бурылов Л.С., Медведев Н.Г.* Трансформируемые крупногабаритные конструкции для перспективных пилотируемых комплексов // Космическая техника и технологии. 2016. № 2 (13). С. 23–33.
10. *Bakulin V.N., Borzykh S.V.* Modeling of the Deployment Process Dynamics for Large-Sized Transformable Space Structures. Russian Aeronautics. 2020. V. 63. P. 610–617.
11. *Бакулин Д.В. и др.* Моделирование процесса раскрытия солнечных батарей // Математическое моделирование. 2004. № 6. С. 88–92.
12. *Бакулин В.Н., Борзых С.В., Щиблев Ю.Н., Ильясова И.Р.* Система уравнений минимальной размерности для описания процесса раскрытия солнечных батарей // Краевые задачи и математическое моделирование. Труды 10-й Всероссийской конференции. Новокузнецк: Изд-во НФИ КемГУ, 2010. Т. 2. С. 138–142.
13. *Ильясова И.Р.* Динамика процесса раскрытия многозвенных солнечных батарей //Вестник Самарского гос. аэрокосмического ун-та им. С.П. Королева. 2012. Т. 35. № 4. С. 88–93.
14. *Бакулин В.Н., Борзых С.В., Ильясова И.Р.* Математическое моделирование процесса раскрытия многозвенных солнечных батарей // Вестник МАИ. 2011. № 3. С. 295–302.
15. *Bakulin V.N., Bogomolov N.V., Borzykh S.V.* Separation Algorithm of the Soyuz MS Spacecraft from Nonstabilized International Space Station. Russian Aeronautics. 2019. V. 62. № 4. P. 577–584.

AN APPROACH FOR BUILDING DYNAMIC MODELS OF THE PROCESS OF DISCLOSURE OF TRANSFORMABLE SPACE STRUCTURES

V. N. Bakulin[a] and S. V. Borzykh[b]

[a] *Institute of Applied Mechanics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

[b] *S.P. Korolev Rocket and Space Corporation Energia, Korolev, Moscow Region, Russia*

Presented by Academician of the RAS A.M. Lipanov

A universal approach to the creation of dynamic models for the disclosure of space structures is proposed, which makes it possible to study current and promising disclosure schemes on a single methodological basis. The approach involves consideration of the spatial motion of a structurally complex mechanical system that includes the spacecraft body and the structural elements of the disclosed structure and is under the influence of specific force factors created by the means of disclosure. The proposed approach is considered on the example of the process of opening solar panels – one of the key operations of the functioning of spacecraft, the reliability of which is directly determined by the success of the mission. To determine the forces and moments in the joints of the disclosed structure, a special system of coupling equations is obtained. The proposed approach significantly expands the range of simulated processes of transformation of space structures and allows us to analyze not only the kinematics and dynamics of the disclosed structure, but also to determine the spacecraft perturbations caused by the disclosure process. It can be used not only for practical tasks of selecting the characteristics of the disclosure system, but also for modeling situations that are fundamentally not reproducible in the conditions of ground-based experimental testing.

Keywords: universal approach, dynamic models, disclosure space structures, structurally complex mechanical system, solar panels, coupling equations