

СОДЕРЖАНИЕ

Том 500, 2021

ФИЗИКА

Динамика решетки теллуридов меди и серебра

*Н. Н. Биккулова, Е. А. Горемычкин, Г. Р. Акманова, А. Р. Курбангулов, Л. В. Биккулова,
Д. И. Сафаргалиев, Г. Р. Нигматуллина, М. И. Алымов* 3

Лидарный мониторинг влажности биологических объектов

*М. Я. Гришин, В. Н. Леднёв, П. А. Сдвиженский, Д. Ю. Павкин,
Е. А. Никитин, А. Ф. Бункин, С. М. Першин* 7

Параметрическое уширение электронно-колебательного спектра молекулы
в связи с нулевыми колебаниями и тепловыми флуктуациями межатомных связей

П. В. Лебедев-Степанов 12

Тонкое полупроводниковое квантовое кольцо – аналог атома бора,
управляемого магнитным полем

А. М. Мандель, В. Б. Ошурко, С. М. Першин 21

Анализ природных и синтетических соединений, содержащих полиеновые цепи,
методом спектроскопии комбинационного рассеяния

*В. С. Новиков, С. М. Кузнецов, В. В. Кузьмин, К. А. Прохоров, Е. А. Сагитова,
М. Е. Дарвин, Ю. Ладеманн, Л. Ю. Устынюк, Г. Ю. Николаева* 26

О колебательных диссипативных системах с двумя степенями свободы

А. Г. Петров 34

Визуализация областей контакта сред в течениях импакта капли с химическими реакциями

Ю. Д. Чашечкин, А. Ю. Ильиных 39

МЕХАНИКА

О влиянии релаксационных процессов на термоакустику материалов

Н. Ф. Морозов, Д. А. Индейцев, К. Л. Муратиков, Б. Н. Семёнов, Д. С. Вавилов, А. А. Кудрявцев 48

Решения уравнений Навье–Стокса с ограничениями симметрии и их связь
с переходными и турбулентными течениями в круглой трубе

В. Г. Приймак 53

О равновесии твердого тела, опирающегося одной точкой на шероховатую плоскость

Г. М. Розенблат 57

Правила для авторов

65

CONTENTS

Volume 500, 2021

PHYSICS

- Copper and Silver Telluride Lattice Dynamics
N. N. Bikkulova, E. A. Goremychkin, G. R. Akmanova, A. R. Kurbangulov, L. V. Bikkulova, D. I. Safargaleev, G. R. Nigmatullina, and M. I. Alymov 3
- Lidar Monitoring of Moisture in Biological Objects
M. Ya. Grishin, V. N. Lednev, P. A. Sdvizhenskii, D. Yu. Pavkin, E. A. Nikitin, A. F. Bunkin, and S. M. Pershin 7
- Parametric Broadening of the Electronic-Vibrational Spectrum of a Molecule Due to Zero-point Vibrations and Thermal Fluctuations of Interatomic Bonds
P. V. Lebedev-Stepanov 12
- A Thin Semiconductor Quantum Ring Is an Analogue of a Bohr Model Atom Controlled by a Magnetic Field
A. M. Mandel, V. B. Oshurko, and S. M. Pershin 21
- Analysis of Natural and Synthetic Compounds Containing Polyene Chains Using Raman Spectroscopy
V. S. Novikov, S. M. Kuznetsov, V. V. Kuzmin, K. A. Prokhorov, E. A. Sagitova, M. E. Darvin, J. Lademann, L. Yu. Ustynyuk, and G. Yu. Nikolaeva 26
- On Vibrational Dissipative Systems with Two Degrees of Freedom
A. G. Petrov 34
- Visualization of the Media Contact Domains at the Drop Impact Flow with Chemical Reactions
Yu. D. Chashechkin and A. Yu. Ilinykh 39
-

MECHANICS

- On the Influence of Relaxation Processes on Thermoacoustics of Materials
N. F. Morozov, D. A. Indeitsev, K. L. Muratkov, B. N. Semenov, D. S. Vavilov, and A. A. Kudryavtsev 48
- Navier–Stokes Solutions with Symmetry Restrictions and Their Relation with Transitional and Turbulent Pipe Flows
V. G. Priymak 53
- On Equilibrium of a Solid Body Supported in One Point by a Rough Plane
G. M. Rozenblat 57
-

For Authors 65

УДК 538.945, 538.913

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ ТелЛУРИДОВ МЕДИ И СЕРЕБРА

© 2021 г. Н. Н. Биккулова^{1,*}, Е. А. Горемычкин^{2,**}, Г. Р. Акманова^{3,***},
А. Р. Курбангулов¹, Л. В. Биккулова¹, Д. И. Сафаргалиев³, Г. Р. Нигматуллина³,
член-корреспондент РАН М. И. Алымов^{4,****}

Поступило 20.03.2020 г.

После доработки 14.08.2021 г.

Принято к публикации 18.08.2021 г.

Впервые представлены результаты исследований теллуридов меди и серебра методом неупругого рассеяния нейтронов при температуре 300 К в несуперионной фазе. Впервые получены динамические структурные факторы, обобщенные плотности фононных состояний и определены величины низкоэнергетических мод данных соединений. Фононные спектры теллуридов меди и серебра имеют особенности, характерные для структурно-разупорядоченных соединений. Вид фононного спектра в несуперионном состоянии характеризуется большой плотностью фононных мод в области малых частот.

Ключевые слова: динамика решетки, неупругое рассеяние нейтронов, теллуриды меди и серебра, фононный спектр, суперионные проводники

DOI: 10.31857/S2686740021050011

Теллурид меди Cu_2Te и теллурид серебра Ag_2Te относятся к суперионным проводникам, имеющим высокую ионную проводимость наряду с преимущественной электронной проводимостью. Некоторые исследователи связывают данное явление с особенностями самой кристаллической структуры вещества, дефектностью строения, разупорядоченностью решетки и т.д. В ряде работ возникновение высокоподвижного состояния катионов интерпретируется с особенностями строения зонной структуры, в частности, со степенью гибридизации d-уровней металла и уровней халькогена [1–4].

Изучение механизма ионного переноса в суперионных проводниках на основе детального исследования динамики решетки, кристаллической структуры, электронной зонной структуры представляет интерес как с практической, так и фундаментальной точки зрения.

Исходными материалами для получения халькогенидов меди и серебра служили сера (марки ОСЧ), теллур (марки ХЧ), медь и серебро чистой 99.99%. Взвешивание элементов производилось с точностью ± 0.0001 г, масса навесок составляла примерно 15 г. Синтез проводился прямым спеканием соответствующих эквимольных количеств элементов в кварцевых ампулах, вакуумированных до давления 10^{-3} Па. Полученная шихта растиралась и затем в агатовой ступке отжигалась для гомогенизации. Метод неупругого рассеяния медленных нейтронов позволяет получить экспериментальные данные по динамике ионной решетки. Эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов проводились на двойном времяпролетном спектрометре прямой геометрии ДИН-2ПИ в Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка ОИЯИ (г. Дубна). Подробное описание данного спектрометра приведено в работах [5, 6].

Относительная нормировка детекторов проводилась с использованием стандартного образца ванадия. Для учета эффекта рассеяния на контейнере и фона быстрых нейтронов были выполнены измерения с пустыми контейнерами. Для каждого из спектров вычислялся спектр частот $G(\epsilon)$ по

¹ Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, Стерлитамак, Россия

² Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия

³ Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

⁴ Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мерджанова Российской академии наук, Черноголовка, Московская обл., Россия

*E-mail: bickulova@mail.ru

**E-mail: goremychkin@jinr.ru

***E-mail: grakmanova@mail.ru

****E-mail: alymov.mi@gmail.com

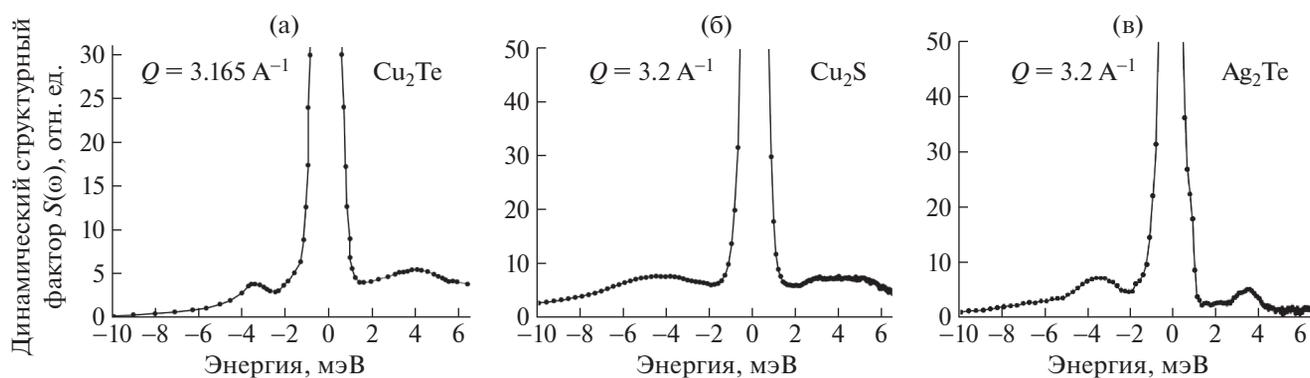


Рис. 1. Динамический структурный фактор соединений Cu_2Te (а), Cu_2S (б), Ag_2Te (в) при температуре 300 К.

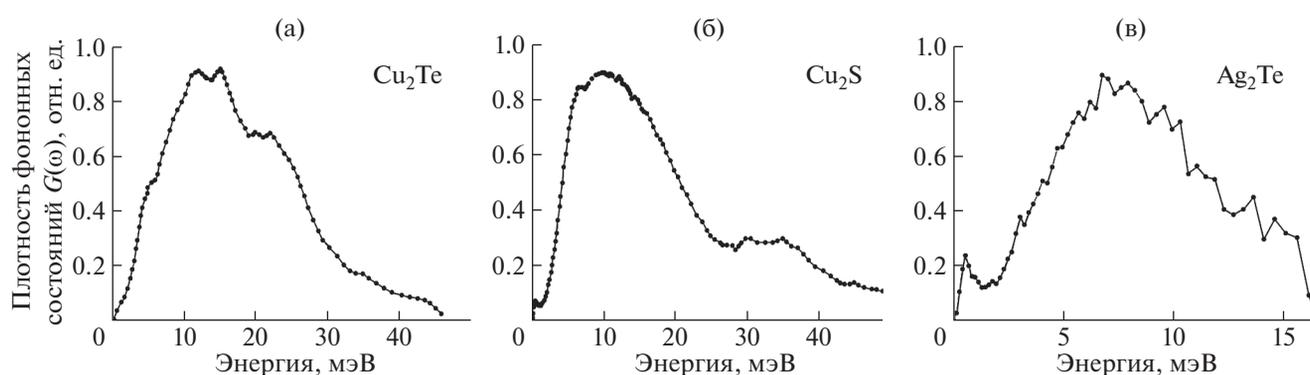


Рис. 2. Плотность фоновых состояний $G(\omega)$ при комнатной температуре соединения Cu_2Te (а), Cu_2S (б), Ag_2Te (в).

формуле для дважды дифференциального сечения однофононного некогерентного рассеяния нейтронов:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{\sigma}{4\pi} \sqrt{E/E_0} e^{-2W} \frac{\hbar^2 Q}{2M \varepsilon (1 - e^{-\varepsilon/kT})} G(\varepsilon), \quad (1)$$

где Q – передача импульса нейтрона, e^{-2W} – фактор Дебая–Уоллера, M – масса ядра.

Исследования динамики решетки халькогенидов меди и серебра Cu_2Te , Cu_2S и Ag_2Te проводились впервые при комнатной температуре на образцах весом около 60 г, которые помещались в контейнеры из алюминиевой фольги размером $3 \times 70 \times 110$ мм и устанавливались под углом 60° к пучку падающих нейтронов.

Динамический структурный фактор и обобщенные спектры неупругого рассеяния нейтронов при температуре 300 К в зависимости от переданной энергии ε приведены на рис. 1, 2 для соединений Cu_2Te (а), Cu_2S (б) и Ag_2Te (в) соответственно. Для улучшения статистической точности спектры суммировались по нескольким углам рассеяния для каждой группы детекторов.

Результаты исследования динамики решетки соединения Cu_2Se были ранее опубликованы в [6].

Для всех халькогенидов при комнатной температуре в несуперионной фазе наблюдаются низкочастотные колебания с энергиями $\varepsilon \approx 3\text{--}5$ мэВ, соответствующие акустическим фононам.

Важность низкоэнергетических мод, которые дают основной вклад в тепловое движение из-за высокой плотности состояний и низкой энергии активации, является общепризнанной [7–10].

Фононные спектры исследованных соединений имеют особенности, характерные для структурно-разупорядоченных соединений.

Низкоэнергетические возбуждения наблюдаются у всех соединений в виде отдельных максимумов (рис. 1). Плотности фоновых состояний $G(\omega)$ для исследованных халькогенидов характеризуются большой плотностью фоновых мод в области малых энергий и выраженными максимумами при комнатной температуре с энергией $\varepsilon \sim 10$ мэВ для Cu_2Te и Cu_2S , энергией $\varepsilon \sim 8$ мэВ для Ag_2Te .

Впервые был выполнен расчет фононного спектра теллурида серебра в рамках теории функционала электронной плотности с помощью метода псевдопотенциала в базе плоских волн, реализованный в программном пакете Quantum

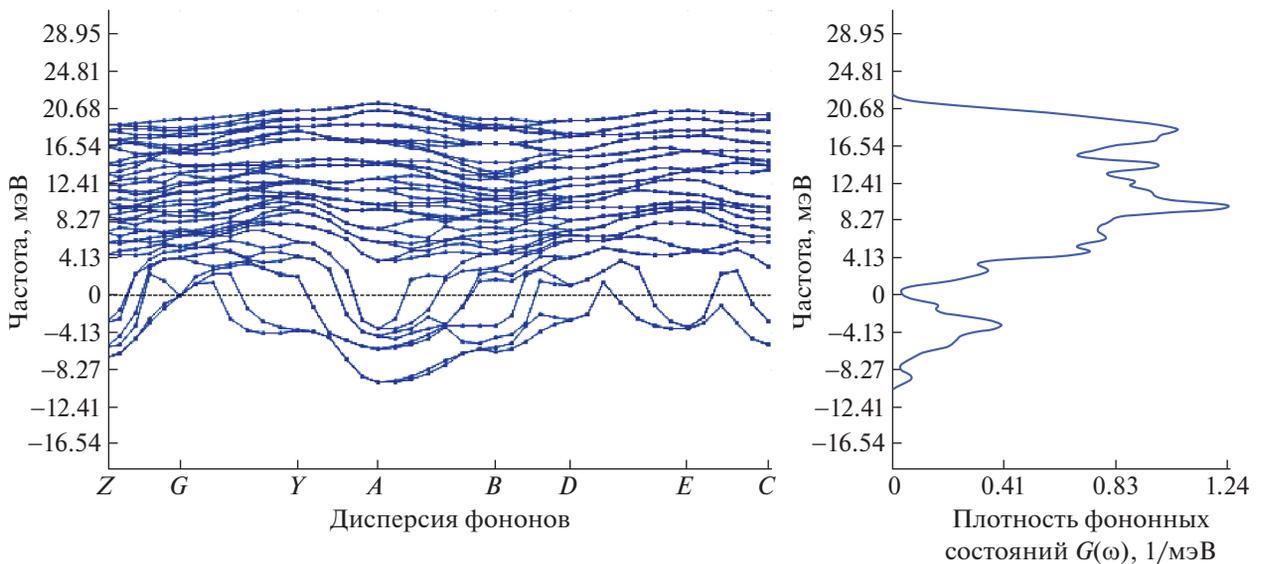


Рис. 3. Фононный спектр соединения Ag_2Te .

Espresso [12]. При расчете были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы для серебра, для теллурида — псевдопотенциалы, сохраняющие норму, которые сгенерированы данной программой [13]. Энергия обрезки плоских волн имела величину 85–100 Ry. При расчетах данным методом учитываются валентные электроны атомов. Использовался автоматический выбор точек обратной решетки (k -точек) при помощи метода Монкхорста–Пака на сетке $8 \times 8 \times 8$.

Самыми замечательными особенностями расчетных акустических мод являются низкие частоты и нестабильность на большой площади взаимных колебаний (рис. 3, 4). Сравнение теории и эксперимента (рис. 4) демонстрирует согласие эксперимента с расчетом в низкочастотной области (< 5 мэВ). Расхождение теоретических расчетов и экспериментальных данных в области 15–22 мэВ может быть обусловлено несовершенством теоретической модели, основанной на гармоническом приближении, в котором не учитывается ангармонизм колебаний. Акустические моды нестабильны и переходят в отрицательные значения вблизи центра зоны Бриллюэна. Это указывает на то, что стехиометрическое соединение является динамически нестабильным.

Теоретические расчеты предсказывают нестабильность фаз из-за наличия отрицательных фононных частот на границе зоны Бриллюэна. В то время как фононная дисперсия фаз стабильна во всей зоне Бриллюэна. Область вокруг точки G в структуре фононного спектра фаз показывает отрицательные частоты. Это указывает на динамическую нестабильность систем и предполагает,

что при смещении ионов в соответствии с волновым вектором в точке G , в системе не возникает возвращающей силы, которая приводит систему в положение равновесия, также смещение ведет к снижению полной энергии. Для этих соединений характерен анизотропный характер колебаний и применение гармонического приближения, используемое при расчетах, приводит к появлению отрицательных частот в фононном спектре. Этот факт можно использовать как один из возможных

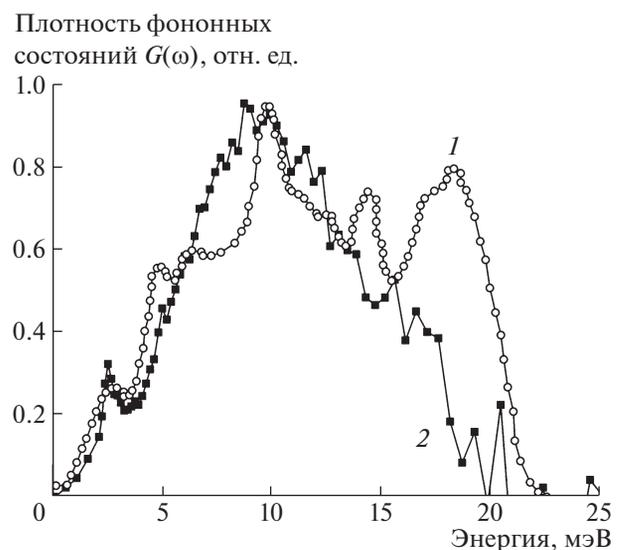


Рис. 4. Расчетная (1) и экспериментальная (2) плотности фононных состояний $G(\omega)$ при комнатной температуре соединения Ag_2Te .

критериев для оценки и предсказания наличия ионной проводимости в соединениях.

Впервые исследованы обобщенные плотности фононных состояний $G(\omega)$ для смешанных ионно-электронных проводников в зависимости от состава при комнатной температуре. Установлено, что в несуперионной фазе наблюдается высокая плотность фононов в области малых частот. Вид фононного спектра в несуперионном состоянии определяется совместным влиянием локального окружения атомов и взаимодействием подвижной и жесткой подрешеток, находящихся в динамическом равновесии и обусловлено ангармонизмом колебаний.⁷

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90216.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Данилкин С.А., Биккулова Н.Н., Семенов В.А., Ядровский Е.Л., Ягафарова З.А., Гареева М.Я. Низкочастотные колебательные моды в суперионном проводнике Cu_{2-x}Se // Вестн. Башкирского ун-та. 2000. № 1. С. 33.
2. Биккулова Н.Н., Степанов Ю.М., Биккулова Л.В., Курбангулов А.Р., Кутов А.Х., Карагулов Р.Ф. Размытый фазовый переход из суперионного в несуперионное состояние в монокристалле $\text{Cu}_{1.8}\text{Se}$ // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 4. С. 603.
3. Kikuchi H., Iyetomi H., Hasegawa A. Insight into the origin of superionic conductivity from electronic structure theory // J. Phys. Condens. Matter. 1998. V. 10. P. 11439–11448.
4. Davletshina A.D., Yakshibaev R.A., Bikkulova N.N., Stepanov Yu.M., Bikkulova L.V. Ab initio calculations of band structure of solid solutions of copper and silver chalcogenides // Solid State Ionics. 2014. V. 257. P. 29–31.
5. Калинин И.В., Морозов В.М., Новиков А.Г., Пучков А.В., Савостин В.В., Сударев В.В., Булкин А.П., Калинин С.И., Пусенков В.М., Ульянов В.А. Характеристики спектрометра ДИН-2ПИ с нейтронным концентратором // ЖТФ. 2014. Т. 84. № 2. С. 155–158.
6. Биккулова Н.Н., Степанов Ю.М., Давлетшина А.Д., Биккулова Л.В. Моделирование динамики решетки суперионных проводников Cu_2Se и Cu_2Te // Письма о материалах. 2013. Т. 3. № 2. С. 87–90.
7. Sakuma T., Shibata K. // J. Phys. Society of Japan. 1989. V. 58. P. 3061.
8. Sakuma T., Aoyama T., Takahashi H., Shimojo Y., Morii Y. // J. Physica B. 1995. V. 213. P. 399.
9. Биккулова Н.Н., Бескровный А.И., Ядровский Е.Л., Скоморохов А.Н., Степанов Ю.М., Миколайчук А.Н., Сагдаткиреева М.Б., Каримов Л.З. Динамика решетки и ионный перенос в структурно-разупорядоченных халькогенидах меди и серебра // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 3. С. 474–476.
10. Wakamura K. Origin of the low-energy mode in superionic conductors // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. № 5. P. 3560–3567.
11. Wakamura K. Roles of phonon amplitude and low-energy optical phonons on superionic conduction // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. № 18. P. 11593–11599.
12. Quantum-ESPRESSO [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.quantum-espresso.org>.
13. Pseudopotentials Database [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.pwscf.org>.

COPPER AND SILVER TELLURIDE LATTICE DYNAMICS

N. N. Bikkulova^a, E. A. Goremychkin^b, G. R. Akmanova^c, A. R. Kurbangulov^a, L. V. Bikkulova^a, D. I. Safargaleev^c, G. R. Nigmatullina^c, and Corresponding Member of the RAS M. I. Alymov^d

^a Sterlitamak Branch of Bashkir State University, Sterlitamak, Russian Federation

^b International Intergovernmental Organization Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region, Russian Federation

^c Bashkir State University, Ufa, Russian Federation

^d Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Materials Science, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow Region, Russian Federation

This article presents the results of inelastic scattering studies of neutrons, copper and silver chalcogenides at a temperature of 300 K in the non-superionic phase. We were the first to obtain dynamic structural factors and generalized phonon densities of states of these compounds. Inelastic peaks observed at energies of 3–5 meV presumably correspond to the acoustic vibrations of phonons. Phonon spectra of copper and silver chalcogenides have features characteristic of compounds structurally disordered.

Keywords: lattice dynamics, inelastic neutron scattering, copper and silver chalcogenides, phonon spectrum, superionic conductors

УДК 535.372, 636.085.33

ЛИДАРНЫЙ МОНИТОРИНГ ВЛАЖНОСТИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

© 2021 г. М. Я. Гришин^{1,*}, В. Н. Леднёв¹, П. А. Сдвиженский¹, Д. Ю. Павкин²,
Е. А. Никитин², А. Ф. Бункин¹, С. М. Першин¹

Представлено академиком РАН И.А. Щербаковым 07.09.2021 г.

Поступило 09.09.2021 г.

После доработки 09.09.2021 г.

Принято к публикации 15.09.2021 г.

Впервые проведены эксперименты по лазерному дистанционному зондированию влажности биологических объектов, имеющих важное значение для агропромышленности. Зондирование проводили с помощью разработанного в ИОФ РАН флуоресцентного лидара на базе импульсного твердотельного лазера (527 нм, 5 нс, 1 кГц, 200 мкДж/имп) и стробируемой камеры с усилителем яркости. Зарегистрированы спектры лазерной флуоресценции различных биологических объектов растительного происхождения при различном значении влажности. Потеря воды сопровождалась деградацией биологических пигментов, что приводит к неравномерному увеличению интенсивности полос в спектре флуоресценции для разных спектральных диапазонов. Показано, что отношение спектральных полос хлорофилла *a* (680 нм) и протохлорофиллида (630 нм) имеет наилучшую корреляцию с остаточной влажностью, что открывает перспективное направление лидарного измерения и мониторинга влажности/сухого вещества в силосе или многолетних травах.

Ключевые слова: лидар, флуоресценция, дистанционное зондирование, экспресс-контроль, влажность силоса

DOI: 10.31857/S2686740021050102

Разработка новых подходов оптической онлайн-диагностики различных объектов является важной задачей для повышения качества и эффективности современного агропромышленного комплекса. Например, содержание крупного рогатого скота — одно из приоритетных направлений в сельскохозяйственной деятельности большинства стран мира, формирующее продовольственную безопасность государства. Современные животноводческие комплексы по получению молока от крупного рогатого скота являются предприятиями с высоким уровнем автоматизации технологических процессов, так как процесс кормления животных на ферме нацелен на достижение максимальных показателей здоровья поголовья и высокой молочной/мясной продуктивности, что в большинстве случаев зависит от умения фермера правильно использовать кормовое сырье. Данный вопрос особенно важен в случае использования кормов естественного происхождения (силос

многолетних и однолетних трав, сенаж, луговое сено и др.), доля которых в суточном рационе животных может достигать 80%. Ввиду того, что заготовка кормового сырья может производиться из растений различной степени спелости, при различных погодных условиях и с разной степенью подвяливания (сушки), в конечном итоге кормовое сырье может быть заложено в хранилищах силоса (силосных траншеях) с существенно разными показателями питательности, в первую очередь — с различными уровнями сухого вещества. Например, уровень влажности зеленой массы кукурузы может отличаться в зависимости от места, где она была скошена — на возвышенном открытом пространстве, недалеко от водоема, либо в тех местах, куда не попадает солнце и ветер [1–3].

При разработке моделей рациона кормления крупного рогатого скота показатель сухого вещества/влажности в кормах естественного происхождения особенно важен, поскольку именно уровень сухого вещества отражает количество потребляемых животных питательных веществ, что позволяет прогнозировать и управлять показателями молочной продуктивности, здоровья животных и уровнем прироста живой массы [4]. На сегодняшний день существует три наиболее рас-

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова
Российской академии наук, Москва, Россия

² Федеральный научный агроинженерный центр ВИМ,
Москва, Россия

*E-mail: mikhail.grishin@kapella.gpi.ru

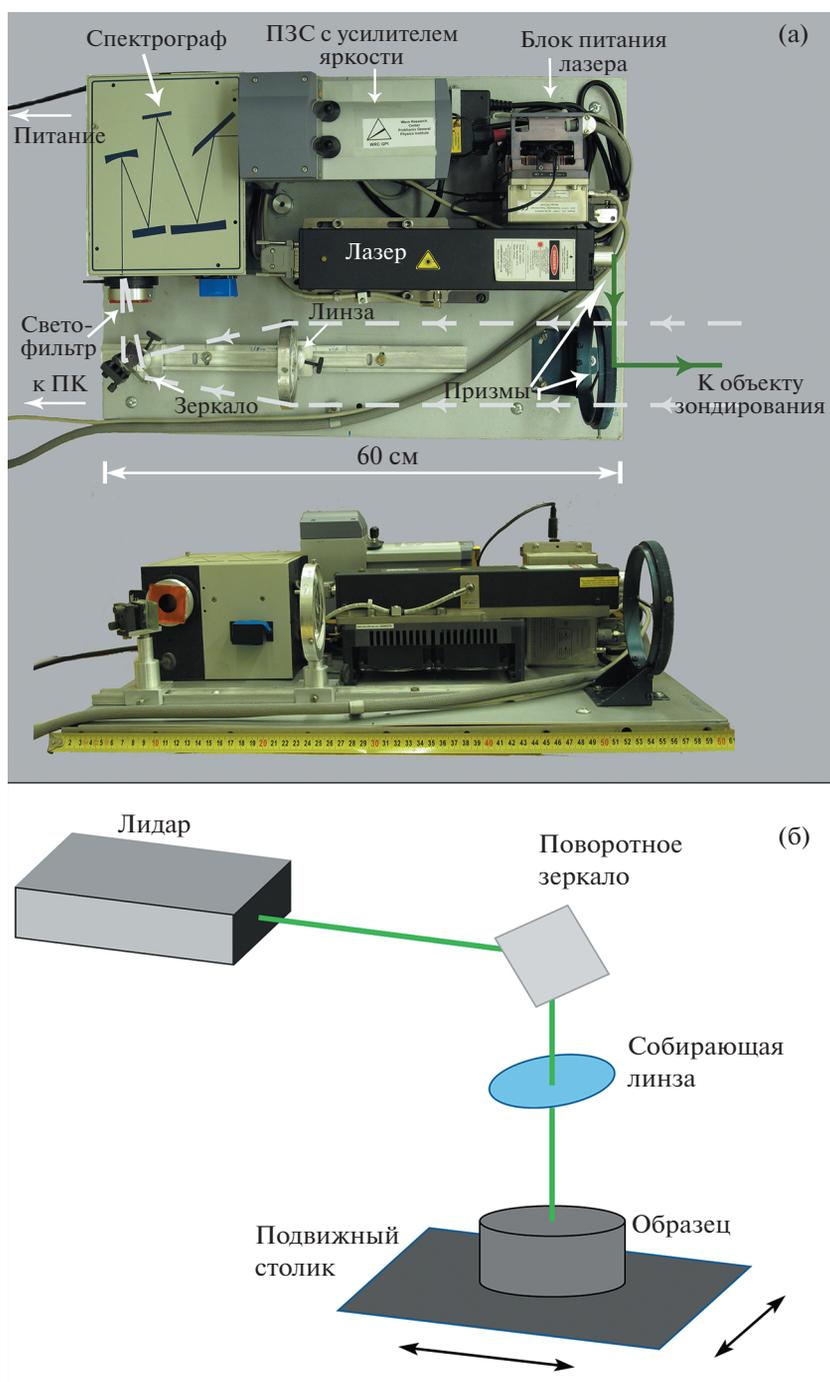


Рис. 1. а – Фотография импульсного флуоресцентного лидара (вид сверху и сбоку), б – схема экспериментальной установки для измерения влажности кукурузного силоса.

пространственных способа оценки уровня сухого вещества/влажности кормов естественного происхождения: весовой метод, диэлькометрический метод и инфракрасная спектроскопия. Весовой метод заключается в сушке силоса при нагреве в микроволновой печи до момента, когда перестает происходить убыль массы. Считая, что потеря массы обусловлена только испаренной водой, можно рассчитать влажность исходного продук-

та. Метод является наиболее распространенным, так как не требует дорогостоящего оборудования и прост в исполнении, но требует существенных затрат времени (до 30 мин на одно измерение), что исключает его применение для онлайн-контроля подготовки корма различным группам животных. Диэлькометрический метод основан на корреляционной зависимости диэлектрической проницаемости материала от содержания в нем

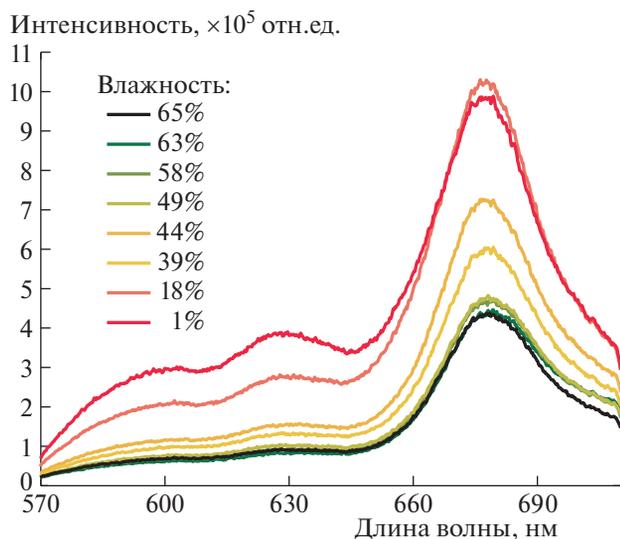


Рис. 2. Спектры флуоресценции образцов кукурузного силоса различной влажности.

влаги [5]. Диэлькометрические измерители могут определить влажность за 10–20 с, но требуют контактных измерений (необходимо погрузить щуп в исследуемый объект). Однако существенным недостатком метода является то, что исследуемый образец должен быть плотно спрессован, в противном случае прибор дает высокую погрешность. Использование спектральных анализаторов, работающих в ближнем инфракрасном (ИК) диапазоне, позволяет оценивать не только влажность, но и другие показатели питательности корма, однако работа ИК-спектрометров невозможна в “полевых” условиях, так как прибор требует полного экранирования от внешней засветки. То есть анализ кормов методом ИК-спектрометрии возможен только в специально подготовленной лаборатории [4, 6].

Разработка новых методов экспрессного измерения влажности силоса важна для контроля качества корма для разных групп животных. Активное оптическое зондирование с помощью непрерывных или импульсных лазеров позволяет измерять оптические отклики удаленного объекта, тем самым получая информацию. Например, по спектрам комбинационного рассеяния можно картировать распределение температуры водных объектов [7], а по спектрам лазерно-индуцированной флуоресценции – определять степень загрязнения водоемов фитопланктоном [8] или нефтепродуктами [9] или же оценивать состояние растений [10]. Основной тип приборов, применяемых для лазерного дистанционного зондирования, – лидары (от LIDAR – Light Detection and Ranging, обнаружение и измерение расстояния с помощью света). Лидары функционируют по радарному принципу с использованием лазеров, ге-

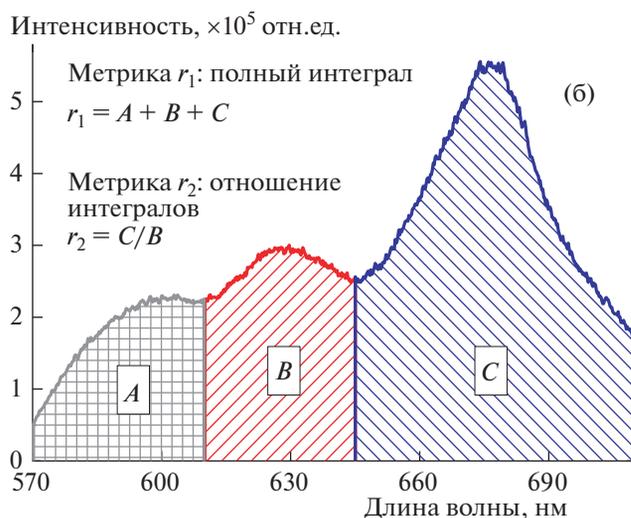
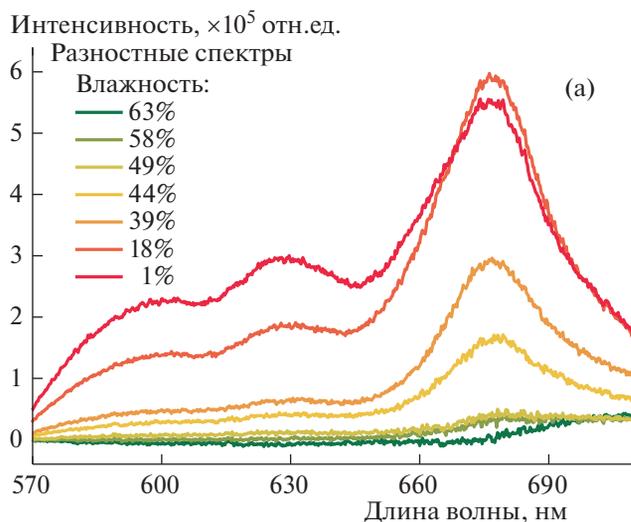


Рис. 3. а – Разностные спектры флуоресценции образцов силоса различной влажности, б – иллюстрация выбора метрик для лидарного измерения влажности силоса.

нерирующих излучение в различных спектральных диапазонах, от ультрафиолета до ближнего ИК [11–13], в качестве источника зондирующих импульсов.

Настоящее исследование направлено на выявление возможности использования лидара как инструмента для определения по спектрам флуоресценции показателей влажности/сухого вещества у кормов естественного происхождения на примере кукурузного силоса.

Для измерения влажности силоса был использован флуоресцентный лидар, разработанный в Институте общей физики им. А.М. Прохорова (рис. 1а). Прибор основан на импульсном твердотельном лазере YLiF₄:Nd с диодной накачкой (Лазер компакт, LCM–DTL–319QT: 527 нм, 5 нс, 23 Гц, 200 мкДж/имп). Лазерный пучок направ-

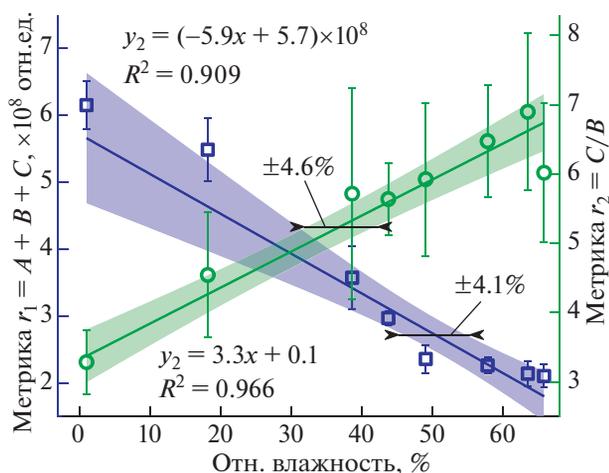


Рис. 4. Градуировка лидара для измерения влажности силоса по спектрам флуоресценции: квадраты – метрика r_1 (полный интеграл), круги – метрика r_2 (отношение интегралов полос 650–710 нм к 610–650 нм). Сплошные линии – линейная аппроксимация зависимостей метрик, закрашенные полосы – 95%-е доверительные интервалы аппроксимации.

ляли на образец с помощью двух призм. Регистрируемые сигналы собирали с помощью кварцевой линзы ($F = 21$ см) и алюминиевого зеркала на входную щель спектрографа. Для подавления упруго рассеянного лазерного излучения при регистрации сигналов был использован светофильтр из цветного стекла ОС-14. Система регистрации сигналов состояла из компактного спектрографа (Spectra Physics, MS127i), оборудованного ПЗС-матрицей со стробируемым усилителем яркости (Andor iStar). Спектральное окно регистрации составляло 500–750 нм, экспозиция 10 нс (малая величина строба позволяет проводить измерения в том числе в условиях прямой засветки солнечными лучами). В экспериментах образец силоса помещали в кювету, установленную на моторизованном подвижном столике (см. рис. 1б) для усреднения регистрируемого оптического отклика по площади образца 100 см^2 .

Были зарегистрированы спектры флуоресценции образца силоса до сушки и спектры образца, высушенного на бытовом дегидрататоре (температура горячего воздуха 50°C) в течение различных сроков экспозиции. Влажность образцов определяли весовым методом. На рис. 2 приведены спектры флуоресценции образца разной степени влажности. При высыхании силоса спектр изменяется, но интенсивность флуоресценции увеличивается неравномерно. Так, интенсивность полосы протохлорофиллида (центр полосы 630 нм) [14] возрастает сильнее, чем интенсивность полосы хлорофилла a (центр полосы 680 нм), что свидетельствует об изменении свойств хромофоров при снижении концентрации молекул воды в об-

разце. Для живых растений интенсивность индуцированной лазером флуоресценции мала, так как пигмент-белковые антенны эффективно поглощают излучение [15], после заготовки и созревания силоса начинаются процессы разрушения хлоропластов [14], которые усиливаются при уменьшении влажности.

Для измерения влажности силоса по спектрам флуоресценции необходимо ввести метрику, количественно описывающую изменения спектра при изменении влажности образца. Для оценки изменений спектров и выбора метрики были построены разностные спектры (спектры образца до сушки, из которых вычтен спектр образца после сушки), приведенные на рис. 3а. Как видно из рисунка, при сушке образца силоса возрастает общая интенсивность спектра, быстро возрастает амплитуда полосы в области 650–710 нм, а также проявляются полосы в областях 570–610 нм и 610–650 нм. Были выбраны две метрики спектра для определения влажности: общий интеграл спектра в области 570–710 нм (метрика r_1 на рис. 3б, сумма интегралов A , B , C) и отношение интегралов полос в областях 650–710 нм (хлорофилл a) и 610–650 нм (протохлорофиллид) (метрика r_2 на рис. 3б, отношение интегралов C/B).

Для градуировки лидара были построены зависимости выбранных метрик от влажности образцов силоса. Из рис. 4 видно, что зависимости обеих метрик от влажности силоса разнонаправлены, но обе зависимости могут быть аппроксимированы линейными функциями (коэффициент корреляции $R^2 = 0.909$ и $R^2 = 0.966$ для метрик r_1 и r_2 соответственно). Точность измерения влажности с использованием метрик r_1 и r_2 определили как ширину доверительного интервала аппроксимации метрики, которая составила до $\pm 4.1\%$ и $\pm 4.6\%$ соответственно для метрик r_1 и r_2 . На практике удобнее измерять соотношение полос в спектре флуоресценции (метрика r_2), так как этот способ не требует корректировать интенсивность спектра с учетом расстояния до объекта.

Таким образом, в работе был продемонстрирован новый подход для реализации дистанционного измерения показателя содержания сухого вещества/влажности силоса различной стадии готовности по спектрам лазерно-индуцированной флуоресценции. Проведенные измерения показывают, что точность измерения относительной влажности кукурузного силоса составила $\pm 5\%$. Несомненно, что высокая скорость регистрации спектров (менее 1 с), отсутствие необходимости в пробоподготовке и независимость получаемых результатов от солнечной засветки открывают широкие перспективы для контроля качества корма животных.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта в форме субсидии, ориентированного на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технологического развития (соглашение 075-15-2020-774).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Driehuis F.* Silage and the safety and quality of dairy foods: A review // *Agric. Food Sci.* 2013. V. 22. № 1. P. 16–34.
2. *Никитин Е.А.* Техничко-технологический анализ систем приготовления кормовой смеси для КРС // *Инновации в сельском хозяйстве.* 2019. № 2. С. 53–61.
3. *Курсанов В.В. и др.* Методика оптимизации параметров машинного кормления крупного рогатого скота // *Агроинженерия.* 2021. Т. 1. № 1. С. 10–14.
4. *Kaňski J., Pyš J.B., Gôrka P.* Prediction of the nutritive value of wet whole-crop sorghum silage according to the INRA feeding system by near-infrared spectroscopy // *J. Anim. Feed Sci.* 2013. V. 22. № 4. P. 360–365.
5. *Блохин Ю.И.* Оперативное измерение влажности кормовых трав в полевых условиях // *Кормопроизводство.* 2018. № 6. С. 39–48.
6. *Rego G. et al.* A portable IoT NIR spectroscopic system to analyze the quality of dairy farm forage // *Comput. Electron. Agric.* 2020. V. 175. June. P. 105578.
7. *Lednev V.N. et al.* Quantifying Raman OH-band spectra for remote water temperature measurements // *Opt. Lett.* 2016. V. 41. № 20. P. 4625–4628.
8. *Churnside J.H.* Review of profiling oceanographic lidar // *Opt. Eng. International Society for Optics and Photonics.* 2013. V. 53. № 5. P. 51405.
9. *Pershin S.M.* Oil Spill Detection by Portable Micro-pulse Eye-Safe Backscattering Diode Lidar // *Phys. Vib.* 2001. V. 9. № 3. P. 192–196.
10. *Misra A.N., Misra M., Singh R.* Chlorophyll fluorescence in plant biology // *Biophysics / ed. Misra A.N. Rijeka: InTech Open Access Publisher,* 2012. P. 171–192.
11. *Гришин М.Я. и др.* Ультракомпактный флуоресцентный лидар на базе диодного лазера (405 нм, 150 мВт) для зондирования акваторий и подстилающей с квадрокоптера // *Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки.* 2021. Т. 498. С. 3–6.
12. *Bunkin A.F. et al.* LIDAR Observation of the Bubble Trace in the Sea Surface Layer // *Phys. Wave Phenom.* 2010. V. 18. P. 230–235.
13. *Pershin S.M. et al.* Remote sensing of Arctic Fjords by Raman lidar: heat transfer screening by layer of glacier's relict water // *Phys. Wave Phenom.* 2012. V. 20. № 3. P. 212–222.
14. *Mysliwa-Kurczel B. et al.* Fluorescence Lifetimes of Protochlorophyllide in Plants with Different Proportions of Short-wavelength and Long-wavelength Protochlorophyllide Spectral Forms // *Photochem. Photobiol. Wiley Online Library.* 2003. V. 78. № 2. P. 205–212.
15. *Pedrós R. et al.* Chlorophyll fluorescence emission spectrum inside a leaf // *Photochem. Photobiol. Sci.* 2008. V. 7. № 4. P. 498–502.

LIDAR MONITORING OF MOISTURE IN BIOLOGICAL OBJECTS

**M. Ya. Grishin^a, V. N. Lednev^a, P. A. Sdvizhenskii^a, D. Yu. Pavkin^b, E. A. Nikitin^b,
A. F. Bunkin^a, and S. M. Pershin^a**

^a*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

^b*Federal Scientific Agroengineering Center VIM, Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS I.A. Shcherbakov

We demonstrate for the first time laser remote sensing of moisture in biological objects important in agriculture. The sensing was performed by a fluorescence lidar developed in Prokhorov General Physics Institute. The lidar was based on a pulsed solid state laser (527 nm, 5 ns, 1 kHz, 200 uJ) and a spectrometer equipped with a gated intensified CCD camera. Laser induced fluorescence spectra were acquired for plant biological objects of different moisture level. Sample drying was accompanied by a degradation of biological pigments which led to non-uniform growth of different spectral bands intensity in the fluorescence spectrum. We demonstrate that chlorophyll a (680 nm) and protochlorophyllide (630 nm) spectral bands ratio correlates well with the moisture of maize silage so it can be used as a metric of silage moisture for online measurements during cattle food production.

Keywords: lidar, fluorescence, remote sensing, express control, silage moisture

ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ УШИРЕНИЕ ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ В СВЯЗИ С НУЛЕВЫМИ КОЛЕБАНИЯМИ И ТЕПЛОВЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ МЕЖАТОМНЫХ СВЯЗЕЙ

© 2021 г. П. В. Лебедев-Степанов^{1,2,*}

Представлено академиком РАН О. В. Руденко 30.08.2021 г.

Поступило 31.08.2021 г.

После доработки 31.08.2021 г.

Принято к публикации 01.09.2021 г.

В рамках приближения Борна–Оппенгеймера впервые показано существование принципиально нового типа уширения спектральной линии электронно-колебательно-вращательного (ровибронного) перехода в молекуле, обусловленного нулевыми колебаниями и тепловыми флуктуациями ядер атомов около их положений равновесия при колебательно-вращательном движении внутри молекулы. В рамках гармонического приближения для описания поверхностей потенциальной энергии основного и возбужденного состояний получено количественное описание формы и ширины линии электронного перехода, отвечающей данному типу уширения, названного параметрическим, поскольку энергия любого ровибронного уровня и перехода между уровнями параметрически зависит от текущего мгновенного положения ядер, которые движутся много медленнее, чем электроны. Для учета этого эффекта предложены диаграммы Франка–Кондона с наклонными (изогнутыми) колебательными уровнями. Найдены выражения параметрически уширенной спектральной интенсивности вибронного перехода. Показано, что основной электронный уровень размыт, как и любой другой ровибронный уровень, когда речь идет о молекулах, ядерная система которых термализована внешней средой. Этим эффектом нельзя пренебречь в ровибронных спектрах любых типов молекул, поскольку он связан с квантовой неопределенностью ядерных координат, вызывающей флуктуации энергии электронной подсистемы молекулы. Величина такого уширяющего эффекта оценивается на примере (0-0)-перехода в серии мономеров полиметиновых красителей. Оценка показала, что величина параметрического уширения указанной бесфонной линии соизмерима с уширением, наблюдаемым в эксперименте. Существующие квантово-химические методы расчета молекулярных спектров не учитывают параметрического уширения. Они сглаживают квазиконтинуум близко расположенных ровибронных переходов, приближенно вычисляя их общую огибающую, но не рассматривают уширения одиночного перехода. Создание теории параметрического уширения будет способствовать разработке внутримолекулярных преобразователей энергии от ядер к электронам и наоборот, сенсорных нанозондов, квантовых радиотехнических, фотоакустических и акустооптических, приемо-передающих или преобразующих устройств молекулярного размера.

Ключевые слова: молекулярный спектр, уширение спектральной линии, электронно-колебательный переход, адиабатическое приближение, полиметиновые красители, параметрическое уширение

DOI: 10.31857/S2686740021050035

В больших молекулах количество возможных нормальных колебаний атомов и их групп очень велико. Каждое из них имеет вращательную структуру. Эти вращательные и колебательные переходы накладываются на чисто электронные

переходы, так что спектры молекул состоят из электронно-колебательно-вращательных (ровибронных) линий.

Обычно спектральные измерения проводятся для больших ансамблей молекул того или иного типа, которые статистически распределены по энергетическим уровням в соответствии с температурой среды и наличием взаимодействий с молекулами растворителя — в газовой, жидкой или твердой фазах. При этом возбуждение одних уровней молекулы более вероятно, других — менее, одни переходы интенсивнее других, что создает сложное спектральное распределение ин-

¹ Федеральный научно-исследовательский центр
“Кристаллография и фотоника”

Российской академии наук, Москва, Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

*E-mail: lebstep.p@crys.ras.ru

тенсивностей поглощения или испускания (люминесценции).

Эксперименты показывают, что ровибронные переходы настолько сильно перекрываются, что молекулярный спектр выглядит как их общая огибающая – единая спектральная полоса. Отдельные близко расположенные линии сливаются в единые полосы поглощения и люминесценции, распределение интенсивности в которых представляет индивидуальные особенности спектра данного типа молекул. Таким образом, наблюдаемая вращательно-колебательная структура, сопровождающая электронный переход, маскирует уширение отдельного ровибронного перехода, растворяя его индивидуальную ширину в квазинепрерывной полосе молекулярного спектра, объединяющего множество таких переходов [1, 2].

Принято считать, что естественная спектральная ширина отдельного ровибронного перехода (в частности, чисто электронного, т.е. бесфононного (0-0)-перехода) на много порядков меньше наблюдаемой ширины спектральной полосы (обычно по порядку величины составляющей сотни см^{-1}), содержащей множество близко расположенных ровибронных переходов. При этом под естественной шириной понимается радиационная ширина линии – обычно порядка 10^{-6} – 10^{-4} см^{-1} [2, с. 56], тогда как оптическая частота имеет порядок 10^4 см^{-1} .

Естественная ширина перехода определяется как сумма ширины исходного и конечного уровней. Возбужденное состояние не является стационарным и уже поэтому не имеет точно определенной энергии. Эта неопределенность для свободной неподвижной, изолированной от внешней среды молекулы равна обратной величине времени спонтанного перехода в основное состояние. До сих пор предполагалось, что для основного состояния молекулы естественная ширина равна нулю [2, с. 55], так что его энергия определена точно. Однако при рассмотрении реальных молекулярных переходов, когда речь идет о молекулах, ядерная система которых термализована внешней средой, это утверждение нуждается в существенном уточнении. Поскольку энергия электронной подсистемы молекулы параметрически зависит от мгновенного положения ядер, совершающих термализованные колебательные и вращательные движения, то основное состояние оказывается тоже размытым, в некоторых случаях весьма существенно [3].

Будем рассматривать вибронные (электронно-колебательные) термы молекулы, но те же выводы можно сделать и в общем случае ровибронных (электронно-колебательно-вращательных) переходов. Также ограничимся рассмотрением спектров поглощения, но уширение спектров излу-

чения может быть получено аналогичным образом. В рамках адиабатического (Борна–Оппенгеймера) приближения [1–3] система адиабатических уравнений имеет вид

$$[T_e + U(r, q)]\psi(r, q) = V(q)\psi(r, q), \quad (1)$$

$$[T_N + V(q)]\phi(q) = E\phi(q), \quad (2)$$

где T_e и T_N – операторы кинетической энергии электронов и ядер соответственно, $U(r, q)$ – полная потенциальная энергия молекулы; r и q – электронная и ядерная (колебательные) координаты соответственно. Электронная энергия $V(q)$ служит поверхностью потенциальной энергии (ППЭ) для ядерного уравнения (2) и, что характерно, зависит от ядерных координат как параметров. Полная волновая функция изолированной молекулы может быть представлена как

$$\Psi(r, q) = \psi(r, q)\phi(q), \quad (3)$$

где $\psi(r, q)$ и $\phi(q)$ – электронная и ядерная волновые функции соответственно. Внешняя электромагнитная волна может вызывать переход между электронно-колебательными уровнями различных электронных состояний в молекуле.

Для расчета ППЭ основного состояния $V_g(q)$ необходимо решить электронное уравнение (1) для любых допустимых комбинаций ядерных координат q , рассматриваемых как медленно меняющиеся параметры. Окрестность глобального минимума на поверхности $V_g(q)$ соответствует основному электронному состоянию, от которого ведется отсчет колебательных и вращательных уровней. Для расчета ППЭ возбужденного состояния $V_u(q)$ необходимо проделать аналогичную процедуру.

Вероятность перехода между стационарными состояниями $\Psi_g \leftrightarrow \Psi_u$, где g обозначает основное электронное состояние, а u – возбужденное (верхнее) состояние, пропорциональна квадрату матричного элемента оператора электрического дипольного момента $\hat{\mu}$

$$M^2 = |\langle n | \hat{\mu}(q) | n' \rangle|^2, \quad (4)$$

где $|n\rangle \equiv \phi_g(q)$, $|n'\rangle \equiv \phi_u(q)$. Частота $\omega_{un'gn}$ определяется энергией перехода с начального колебательного уровня n основного электронного состояния на колебательный уровень n' возбужденного электронного состояния:

$$\omega_{un'gn} = \hbar^{-1}(E_{un'} - E_{gn}), \quad (5)$$

где E_{gn} и $E_{un'}$ – электронно-колебательные энергии основного и возбужденного состояний соответственно. В приближении Герцберга–Теллера имеем

$$\mu = \mu(q) = \langle \Psi_u(r, q) | \hat{\mu} | \Psi_g(r, q) \rangle, \quad (6)$$

где координаты ядер q – медленно меняющиеся адиабатические параметры в задаче вибронного перехода. В рамках более грубого приближения Кондона дипольный момент перехода не зависит от ядерных координат:

$$\mu(q) \approx \mu(q_0) = \langle \Psi_u(r, q_0) | \hat{\mu} | \Psi_g(r, q_0) \rangle. \quad (7)$$

Сила осциллятора перехода определяется выражением

$$f_{un'gn} = n_e \frac{2m_e \omega_{un'gn}}{3e^2 \hbar} M^2, \quad (8)$$

где m_e и e – масса и электрический заряд электрона соответственно, n_e – количество электронов, которые вносят вклад в переход. Спектральная плотность силы осциллятора (спектральная интенсивность) при отсутствии уширения линий определяется соотношением

$$I_{un'gn}(\omega) = f_{un'gn} \delta(\omega_{un'gn} - \omega), \quad (9)$$

где δ – дельта-функция Дирака, так что нормировка имеет вид

$$f_{un'gn} = \int_0^\infty I_{un'gn}(\omega) d\omega, \quad (10)$$

$$\omega_{un'gn} = \omega_{ug} + (n' - n)\Omega_n \quad (11)$$

есть частота “вертикального” вибронного франк-кондоновского перехода с фиксированными положениями ядер во время сравнительно быстрого процесса электронного возбуждения, $\hbar\omega_{ug}$ – энергия чистого электронного (0-0)-перехода.

Полоса адсорбции сложной молекулы расширяется до квазиконтинуума, представляющего упорядоченный набор большого числа близко расположенных электронно-колебательных термов $\Psi_{gn} \rightarrow \Psi_{un'}$:

$$I(\omega) = \sum_{n,n'=0}^{\infty} P_n I_{un'gn}(\omega), \quad (12)$$

где P_n – коэффициенты статистической вероятности, усредненные по начальным состояниям [1].

Каждый член в сумме в уравнении (12) представляет собой бесконечно узкую отдельную вибронную полосу, описываемую уравнением (9) с заданными номерами n и n' . Однако огибающая

этого квазиконтинуума представляет собой гладкую спектральную кривую с некоторым средним значением частоты и дисперсией [3].

Существующие мейнстримные квантово-химические методы вычисления молекулярных спектров сглаживают квазиконтинуум близко расположенных вибронных переходов, приближенно вычисляя контур их общей огибающей и, таким образом, дают описание непрерывной спектральной полосы (см. [3] и литературу там). Такой подход первоначально был разработан для электронов, захваченных примесными центрами в кристаллической решетке [4]. Он широко используется для моделирования формы оптических полос органических красителей. Более общее выражение для производящей функции в рамках модели гармонических поверхностей, а также его дальнейшее обобщение на случай некондоновских переходов были получены Кубо и Тоядзавой [5]. Такие подходы связаны с более точным расчетом матричных элементов (4) или выходом за рамки адиабатического приближения. Так, использование приближения Герцберга–Теллера (зависимость диполя перехода от ядерных координат) и вращений Душинского (смешивание нормальных мод между состояниями) позволяет получить более точные значения электронно-колебательных энергий, чем в рамках кондоновского приближения, однако, как и приближение Кондона, это не дает уширения одной-единственной вибронной линии. Здесь общая черта всех такого рода методов, независимо от выбора приближения.

Рассмотрим крайний случай. Если в спектре имеется только один электронный переход из-за отсутствия или сильного подавления ровибронной структуры полосы, то сглаживание в указанном выше смысле лишено смысла и вообще невозможно. В этом случае спектр описывается единственной дельта-функцией (9), а подход Лакса оставляет ее без изменений, поскольку коллективная огибающая для одной единственной дельта-функции дает ту же самую дельта-функцию. Примером является бесфононный (0-0)-переход. Принимая во внимание (9), можно записать спектр этого перехода в виде

$$I_{00}(\omega) = f_{00} \delta(\omega_{00} - \omega), \quad (13)$$

где ω_{00} – частота (0-0)-перехода. Подход Лакса и другие аналогичные методы, в том числе самые новые их варианты, обзор которых представлен в [3], не описывают уширение таких переходов, как и вообще каждого отдельно взятого вибронного перехода.

Описание уширения единичного электронного перехода, который выходит за рамки всех подобных методов, был впервые предложен в [3] и основан на следующей модели. Энергии вибронных уровней, которые соответствуют гамильто-

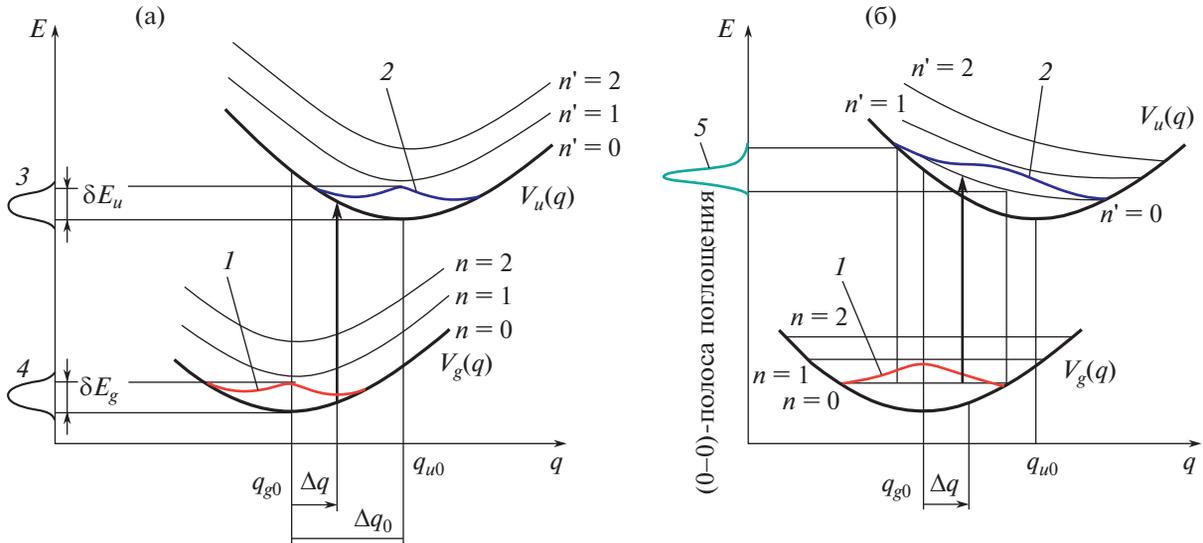


Рис. 1. Формирование уширенного спектра вибронного перехода (0-0) при наличии параметрической зависимости энергии перехода $\Delta E_{ug} = V_u - V_g$ от смещения ядерной координаты Δq относительно минимума ППЭ основного состояния в точке q_{g0} (23) за счет нулевых колебаний ядер. (а) Имеет место изгиб эквидистантных (со сдвигом $\hbar\Omega_g$ над основным электронным состоянием и $\hbar\Omega_u$ над возбужденным) колебательных уровней основного и возбужденного состояний из-за медленной параметрической зависимости энергий переходов $E_g(\Delta q)$ и $E_u(\Delta q)$ от смещений ядер Δq (уравнения (14) и (15) соответственно); δE_g и δE_u – параметрические уширения энергетических уровней основного и возбужденного состояний соответственно, причем распределения интенсивности уширения уровней представлены кривыми 3 и 4. (б) Другой вариант диаграммы для того же случая, где колебательные уровни основного состояния изображены горизонтально, а колебательные уровни возбужденного состояния построены с учетом локального (при данном Δq) расстояния по вертикали до основного уровня в соответствии с полиномом второй степени, заданным уравнением (23), т.е. $\Delta E_{ug}(\Delta q) = \hbar[\alpha - \beta \cdot \Delta q + \gamma \cdot (\Delta q)^2]$. Вертикальными стрелками показаны примеры вертикальных вибронных (0-0)-переходов при произвольно выбранных параметрах Δq . Кривые 1 и 2 описывают плотность вероятности распределения электронов на основном и возбужденном уровнях соответственно, как функцию сдвига Δq . Полоса поглощения (0-0), представленная кривой 5 на рис. 1(б), определяется интегрированием всех возможных (0-0) переходов по параметру Δq с учетом статистического веса, указанного кривой 1 [P. Lebedev-Stepanov // AIP Advances. **11**, 035115 (2021); licensed under a Creative Commons Attribution (CC BY) license].

нианам уравнения (2) в гармоническом приближении, могут быть записаны в виде

$$E_g(\Delta \mathbf{q}) = T_N + V_{g0} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^j M_k \Omega_{gk}^2 (\Delta q_k)^2, \quad (14)$$

$$E_u(\Delta \mathbf{q}) = T_N + V_{u0} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^j M_k \Omega_{uk}^2 (\Delta q_k - \Delta q_{u0,k})^2, \quad (15)$$

где j – число степеней свободы в молекуле, $\Delta \mathbf{q}$ – вектор нормальных координатных сдвигов; при этом

$$\Delta q_k = q_k - q_{g0,k} \quad \text{и} \quad \Delta q_{0k} = q_{u0,k} - q_{g0,k} \geq 0, \quad (16)$$

где $\Delta q_{0k} = \text{const}_k$ по определению (в одномерном случае это есть $\Delta q_0 = \text{const}$, см. рис. 1а). Далее для разности (15) и (14) получаем

$$\Delta E_{ug}(\Delta \mathbf{q}) = \hbar \omega_{ug}(\Delta \mathbf{q}) = \Delta E_{ug,0} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^j M_k [2\Omega_{uk}^2 \Delta q_{0,k} \Delta q_k + (\Omega_{gk}^2 - \Omega_{uk}^2) (\Delta q_k)^2], \quad (17)$$

где член с суммированием описывает флуктуационную часть энергии перехода, обусловленную квантовыми флуктуациями положения ядер в молекуле, а $\Delta E_{ug,0} = \text{const}$ – нефлуктуационную. Можно показать, что в стационарном случае

$$\omega_{ug}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \omega_{ug,0} + \sum_{k=1}^j \left[\left(n'_k + \frac{1}{2} \right) \Omega_{uk} - \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \Omega_{gk} \right], \quad (18)$$

где \mathbf{n} и \mathbf{n}' – наборы колебательных квантовых чисел основного и возбужденного состояний соответственно, $\omega_{ug,0} = \hbar^{-1} \Delta E_{ug,0}$. Распределение плотности вероятности ядер $\tilde{f}_{gn}(\Delta \mathbf{q})$ в исходном (основном) состоянии на всех возможных наборах

сдвиг $\Delta \mathbf{q}$ координат в окрестностях положения равновесия может быть определено с учетом (3)

$$\tilde{f}_{gn}(\Delta \mathbf{q}) = \varphi_{gn}^* (\mathbf{q}_{g0} + \Delta \mathbf{q}) \cdot \varphi_{gn}(\mathbf{q}_{g0} + \Delta \mathbf{q}). \quad (19)$$

Уравнение (19) представляет собой вероятность перехода с частотой $\omega_{ug}(\Delta \mathbf{q})$. Таким образом, мы можем неявно определить некоторую функцию $F(\omega_{ug})$ – нормированную вероятность для частоты данного перехода ω_{ug} иметь те или иные значения, а затем вычислить спектральное распределение интенсивности по уравнению (9), заменяя в нем дельта-функцию распределением $F(\omega_{ug})$:

$$I_{un'gn}(\omega) = f_{un'gn} F(\omega), \quad \int_{\omega} F(\omega) d\omega = 1, \quad (20)$$

$$f_{un'gn} = n_e \frac{2m_e \omega}{3e^2 \hbar} M_{un'gn}^2,$$

где $M_{un'gn}^2$ определяется формулой (4):

$$M_{un'gn}^2 = \left| \langle \mathbf{n} | \mu_{ug}(\mathbf{q}) | \mathbf{n}' \rangle \right|^2, \quad (21)$$

а матричный элемент

$$\mu_{ug}(\mathbf{q}) = \langle \psi_u(r, \mathbf{q}) | \hat{\mu} | \psi_g(r, \mathbf{q}) \rangle \quad (22)$$

можно получить в требуемом приближении, например, в кондоновском.

Если спектр состоит из нескольких вибронных переходов, их необходимо суммировать по формуле (12) с учетом индивидуальной вероятности каждого перехода, которая определяется зависящими от температуры статистическими факторами P_n . Данная процедура решает общую задачу о параметрическом уширении любой ровибронной линии или их серии.

В частности, в одномерном случае ($j = 1$) уравнение (17) можно переписать для данных n и n' , переходя по формуле Планка к частоте перехода, в виде

$$\omega_{un'gn}(\Delta q) = \omega_{un'gn,0} - \frac{1}{2\hbar} M[2\Omega_u^2 \Delta q_0 \Delta q + (\Omega_g^2 - \Omega_u^2)(\Delta q)^2] = \alpha - \beta \cdot \Delta q + \gamma \cdot (\Delta q)^2, \quad (23)$$

где α , β и γ – константы:

$$\alpha = \omega_{un'gn,0},$$

$$\beta = M\Omega_u^2 \Delta q_0 \geq 0, \quad \gamma = \frac{1}{2} M(\Omega_u^2 - \Omega_g^2).$$

Таким образом, параметрическая зависимость энергии вибронного перехода от сдвига ядерной координаты приводит к изогнутым или наклонным колебательным уровням на диаграмме Франка–Кондона (рис. 1). При этом форма вибронной полосы определяется проекцией квадрата колебательной волновой функции исходного состояния

через наклонную кривую (23), описывающую зависимость энергии перехода от межъядерного расстояния, на вертикальную ось энергии вибронного перехода, как это показано на рис. 1б.

Уравнения (19), (20) позволяют в общем виде решить задачу о параметрическом уширении ровибронной линии для гармонического приближения ППЭ и могут быть положены в основу программных алгоритмов решения данной задачи для тех или иных конкретных систем или их классов. Выясним, в каких типах молекул параметрическое уширение линий электронных переходов наиболее существенно.

Уравнение (23) показывает, что разброс частоты (и уширение линии) вследствие неопределенности положений ядер Δq будет тем сильнее, чем больше по абсолютной величине коэффициенты β и γ . В частности (рассмотрим идеальный случай), если минимумы обеих ППЭ расположены друг под другом, так что $\Delta q_0 = 0$, а колебательные частоты равны ($\Omega_u = \Omega_g$), то параметрическая неопределенность частоты и ее среднеквадратическое отклонение от среднего значения, очевидно, будут равны нулю. Такое точное выполнение указанных условий в реальных системах исключается, поэтому большее или меньшее параметрическое уширение вибронной линии, вообще говоря, должно всегда иметь место. Можно предположить, что в некоторых случаях, когда с помощью особых экспериментальных техник (лазерное селективное возбуждение молекулы, помещенной в матрицу Шпольского при низких температурах [6, 7]) удастся наблюдать сверхузкие бесфононные линии (БФЛ), речь идет о переходах с малыми модулями коэффициентов β и γ .

Однако существуют спектральные полосы, в том числе соответствующие (0-0)-переходу, которые не удается свести к узкой БФЛ даже с использованием указанной выше методики. Речь идет об оптических спектрах полиметиновых красителей и их J-агрегатов. J-агрегация мономеров полиметинового красителя проявляется в резком изменении спектра, появлении в нем J-полосы, которая сильно смещена в красную сторону, с малым стоксовым сдвигом, без проявленной колебательной структуры. Небольшой стоксов сдвиг указывает, что ровибронная структура значительно подавлена в агрегате, за исключением перехода (0-0), который имеет относительно высокую интенсивность, но обычно меньшую спектральную ширину по сравнению с соответствующим переходом в мономере. Гипотетически, формирование совместной когерентной π -электронной системы в компактном J-агрегате из отдельных π -систем исходных мономеров, которые расположены с линейным сдвигом друг относительно друга, приводит к эффективному удлинению хромофора (который, согласно Куну [8], может быть

уподоблен одномерной потенциальной яме для оптически активных электронов), что и обуславливает наблюдаемое красное смещение частоты (0-0)-перехода. Соединение мономеров в агрегате также может привести к большей жесткости системы и связанному с этим сужению линии, наподобие того, как это происходит в матрицах Шпольского.

Однако сужение спектра при образовании J-агрегата обычно не очень велико: ширины полос в мономере и агрегате имеют одинаковый порядок величины, около сотен см^{-1} . Характерно, что применение селективной лазерной спектроскопии и охлажденных до гелиевых температур матриц Шпольского не дает возможности существенно сузить эти полосы [9]. Таким образом, селективная лазерная спектроскопия и охлаждение не во всех случаях позволяют даже в принципе приблизиться к естественной ширине электронного перехода, а проблема J-агрегата не столько в том, чтобы установить механизм красного сдвига и сужения спектральной полосы при его образовании из мономеров, а именно в том, чтобы выяснить, почему сужение этого (0-0)-перехода, т.е. соответствующей ему БФЛ, как правило, невелико даже при помещении J-агрегата в твердую матрицу Шпольского, охлажденную до температуры жидкого гелия, и селективном лазерном возбуждении. Даже в этом случае J-полоса продолжает иметь ширину порядка десятков, а то и сотен см^{-1} , в отличие от тех БФЛ (например, в спектре ряда ароматических углеводородов и порфиринов), которые в подобных условиях, как показали работы Персонова и др., демонстрируют резкий рост интенсивности и сужение до ширины порядка 1 см^{-1} и меньше [7].

Это косвенно указывает на наличие общего механизма уширения отдельных переходов (параметрическое уширение), который проявляется по-разному для разного типа веществ. Именно поэтому матрицы Шпольского и селективная лазерная спектроскопия не являются универсальными способами приближения к естественной ширине линий любых электронных переходов, хотя для некоторых переходов и веществ эта методика получения БФЛ неплохо работает.

Спектральную интенсивность одного вибронного перехода при $\gamma \approx 0$ можно переписать в виде

$$I_{un'gn}(\omega) = \frac{f_{un'gn}}{2^n n! \beta \sqrt{\pi R_0}} \times \exp \left[- \left(\frac{\alpha - \omega}{\beta R_0} \right)^2 \right] H_n^2 \left(\frac{\alpha - \omega}{\beta R_0} \right), \quad (24)$$

где $H_n(x)$ – полином Эрмита степени n , входящий в выражение волновой функции гармонического осциллятора с радиусом R_0 [3].

Нулевые колебания ядер в основном колебательном состоянии, описываемые собственной функцией в виде гауссоиды, определяют форму профиля, описываемую квадратом собственной функции начального колебательного состояния электронной энергии перехода (0-0). Для перехода (0-0) уравнение (24) дает

$$I_{u0g0}(\omega) = \frac{f_{u0g0}}{\sqrt{\pi R_0} \beta} \exp \left[- \left(\frac{\alpha - \omega}{\beta R_0} \right)^2 \right], \quad (25)$$

что соответствует гауссову распределению.

Оценка параметрического уширения (0-0)-перехода в серии полиметиновых красителей, общая структурная схема которых изображена на рис. 2а, с использованием модели свободных электронов Куна и формулы (25) была проведена в [3]. Согласно Куну, энергия перехода здесь определяется формулой

$$\Delta E(L) = \frac{\pi^2 \hbar^2 (2j + 7)}{2L^2 m_e}, \quad (26)$$

где длина π -электронного перехода

$$L = 2 \left(j + 3 + \frac{1}{3} \right) a, \quad (27)$$

где j – количество звеньев полиметиновой цепи (рис. 2а), длину связи a между атомами вдоль цепочки можно записать в виде

$$a = a_0 + \Delta a, \quad (28)$$

где $a_0 \approx 1.40 \text{ \AA}$ – средняя длина полуторной связи С–С. Частота колебаний такой связи составляет приблизительно $\frac{\Omega}{2\pi c} \approx 1000 \text{ см}^{-1}$. В таком осцилляторе при нормальных условиях, поскольку $\hbar\Omega \gg k_B T$, существуют практически только нулевые колебания ($n = 0$) и соответствующее им гауссоидоподобное параметрическое уширение спектра (на рис. 2б этому отвечает распределение вероятности $\xi_0^2(q)$).

Характерное отклонение длины звена полиметиновой цепи r_0 , может быть оценено по амплитуде колебаний полуторной связи С–С в бензоле $r_0 \approx 0.046 \text{ \AA}$, приведенной в [10, с. 293], которая дает пригодную для наших целей оценку среднеквадратического отклонения длины связи вследствие нулевых колебаний

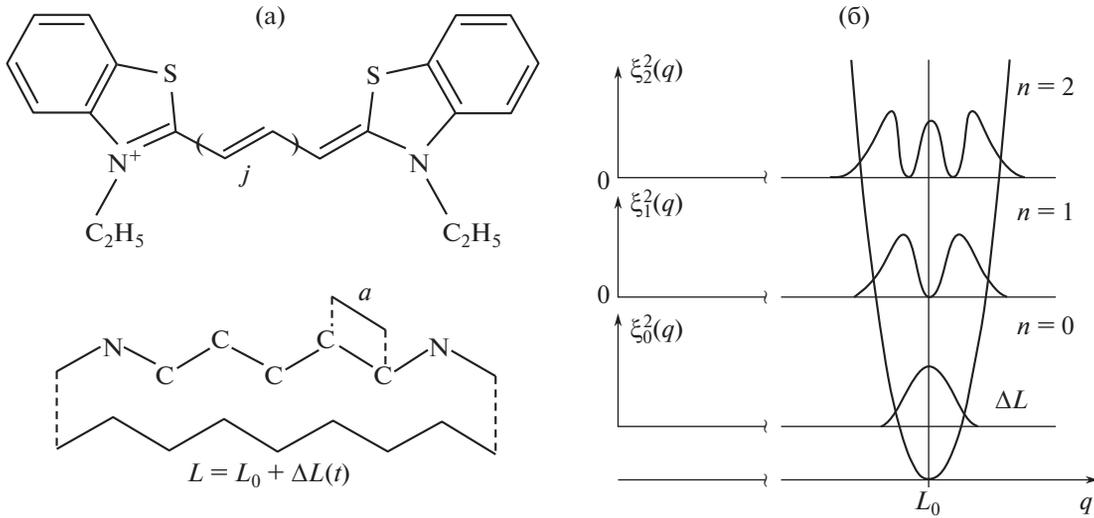


Рис. 2. а – Структура серии симметричных полиметиновых красителей (вверху); Схема π -электронной цепи полиметинового хромофора в модели свободных электронов (внизу). б – Распределение плотности вероятности ξ_n^2 характеристической длины L линейного квантового гармонического осциллятора вокруг его среднего положения L_0 с отклонениями $|\Delta L| \ll L_0$ для разного числа квантов колебаний n , где $\xi_n(q)$ – собственные функции осциллятора, а q – ядерная координата.

$$\sqrt{\langle \Delta a^2 \rangle} \approx r_0^2. \quad (29)$$

С другой стороны, расчет радиуса осциллятора дает $r_{osc} = \sqrt{\frac{\hbar}{\tilde{M}\Omega}} \approx 0.075 \text{ \AA}$, где \tilde{M} – приведенная масса, которая в модели независимых осцилляторов равна половине массы углерода. С учетом того, что $\sqrt{\langle \Delta a^2 \rangle} = 0.5r_{osc}$, оценка (29) находит подтверждение, отвечающее той степени приближенности, которую мы здесь допускаем.

Согласно Пайерлсу [11, с. 94], при рассмотрении цепочки из N атомов в приближении независимых осцилляторов, средний квадрат неопределенности положения N -го атома будет равен $N\langle \Delta a^2 \rangle$, что отвечает среднему квадрату отклонения полной длины этой цепочки атомов L от среднего значения. С учетом (27)–(29), формально можно записать:

$$\langle \Delta L^2 \rangle \approx 2 \left(j + 3 + \frac{1}{3} \right) r_0^2. \quad (30)$$

Погрешности длины (30) отвечает некоторая среднеквадратическая погрешность энергии перехода, которая, с учетом (26), проявляется как параметрическое уширение спектра со среднеквадратическим отклонением частоты

$$\sigma_\omega = \sqrt{\langle \Delta \omega^2 \rangle} \approx \left| \frac{\partial \omega}{\partial L} \right|_{L=L_0} \sqrt{\langle \Delta L^2 \rangle} \approx \frac{\sqrt{2}\omega_m r_0}{\sqrt{\left(j + 3 + \frac{1}{3} \right) a_0}} \quad (31)$$

от среднего значения

$$\omega_m = \frac{\pi^2 \hbar (2j + 7)}{8 \left(j + 3 + \frac{1}{3} \right)^2 a_0^2 m_e}. \quad (32)$$

Нормальное (гауссово) распределение частот с математическим ожиданием ω_m и дисперсией σ_ω^2 имеет вид

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\omega} \exp \left[- \left(\frac{\omega - \omega_m}{\sqrt{2}\sigma_m} \right)^2 \right], \quad (33)$$

а соответствующая спектральная интенсивность с учетом (9) определяется формулой $I_{00}(\omega) = f_{00} F(\omega)$. Очевидно, если принять $\alpha = \omega_m$ и $\beta = \sqrt{2}\sigma_\omega R_0^{-1}$, то это будет соответствовать формуле (25).

Полуширина спектра $I_{00}(\omega)$ на полувысоте при этом определяется формулой

$$\delta\omega_{1/2} = \sigma_m \sqrt{2 \ln 2} = \frac{r_0 2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\left(j + 3 + \frac{1}{3} \right) a_0}} \omega_m. \quad (34)$$

Аналогично, если спектр построен как распределение по длинам волн $\lambda = 2\pi c\omega^{-1}$, имеем

$$\delta\lambda_{1/2} = \lambda_m \sqrt{2 \ln 2} \approx \frac{r_0 2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\left(j + 3 + \frac{1}{3} \right) a_0}} \lambda_m, \quad (35)$$

Таблица 1. Длины волн λ_m , рассчитанные по (32), уширения $\delta\lambda_{1/2}$, вычисленные по (35), и соответствующие экспериментальные значения $\lambda_m[\text{exp}]$ и $\delta\lambda[\text{exp}]$, взятые из [12], для серии симметричных полиметиновых красителей (рис. 2а) при $j = 0, 1, 2, 3$

j	$\lambda_m, \text{Å}$	$\delta\lambda[\text{exp}], \text{Å}$	$\delta\lambda_{1/2}, \text{Å}$	$\delta\lambda[\text{exp}], \text{Å}$
0	4100	4230	123	200
1	5389	5575	142	200
2	6680	6500	158	210
3	7970	7580	173	250

где $\lambda_m = 2\pi c \omega_m^{-1}$ рассчитывается с учетом (32).

Сравним полученные уширения с экспериментальными, которые можно определить по спектрам, приведенным в [12] (табл. 1).

Оценка уширений, приведенная выше, более последовательна, чем в работе [3], хотя принципиально дает тот же результат. Очевидно, модель свободных электронов Куна неплохо оценивает длины волн на максимуме интенсивности, а теория параметрического уширения в линейном приближении (25), с учетом упрощенности модели независимых осцилляторов и используемой оценки радиуса осциллятора, позволяет с неплохим приближением определить масштаб параметрического уширения (0-0)-перехода, который практически совпадает с экспериментально наблюдаемым. Подчеркнем, что в данном расчете не учитывалось неоднородное уширение, связанное с воздействием молекул растворителя.

Природа параметрического уширения связана с квантовой неопределенностью положения ядер в момент электронного перехода. Если бы существовала возможность регистрировать вибранный спектр отдельной молекулы за сверхкороткое время, много меньшее периода ядерных колебаний (т.е. много меньшее, чем 10^{-14} с), то, как может показаться, удалось бы зафиксировать один-единственный электронный переход одной-единственной молекулы при данном фиксированном положении ядер в ней с шириной, которая приближается к естественной радиационной ширине тем ближе, чем за более короткое время снят спектр. Однако такая процедура по принципу неопределенности оказала бы воздействие на молекулу с энергией порядка $\hbar/\Delta t$, соизмеримой с энергией самого электронного перехода, которое нарушило бы идентичность перехода или даже привело бы к разрушению молекулы.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор благодарит д.ф.-м.н. профессора Ю.М. Чувильского за высказанные замечания.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Франк-Каменецкий М.Д., Лукашин А.В. // УФН. 1975. Т. 116. № 2. С. 193.
2. Кизель В.А. Практическая молекулярная спектроскопия. М.: Изд-во МФТИ, 1998. 256 с.
3. Lebedev-Stepanov P. // AIP Advances. 2021. V. 11. 035115.
4. Lax M.J. // J. Chem. Phys. 1952. V. 20. P. 1752.
5. Kubo R., Toyozawa Y. // Prog. Theor. Phys. 1955. V. 13. P. 160.
6. Шпольский Э.В. // УФН. 1962. Т. 77. С. 321.
7. Orrit M., Bernard J., Personov R.I. // J. Phys. Chem. 1993. V. 97. P. 10256.
8. Kuhn H. // J. Chem. Phys. 1949. V. 17. P. 1198.
9. Drobizhev M.A., Sapozhnikov M.N., Scheblykin I.G., Varnavsky O.P., Van der Auweraer M., Vitukhnovsky A.G. // Chem. Phys. 1996. V. 211. P. 455.
10. Syvin S.J. Molecular vibrations and mean square amplitudes. Oslo, Amsterdam: Elsevier, 1968. 424 p.
11. Пайерлс Р. Сюрпризы в теоретической физике. М.: Наука, 1988. 176 с.
12. Brooker L.G.S., Sprague R.H., Smytahn P., Lewis D.G.L. // J. Am. Chem. Soc. 1940. V. 62. P. 1116.

PARAMETRIC BROADENING OF THE ELECTRONIC-VIBRATIONAL SPECTRUM OF A MOLECULE DUE TO ZERO-POINT VIBRATIONS AND THERMAL FLUCTUATIONS OF INTERATOMIC BONDS

P. V. Lebedev-Stepanov^{a,b}

^a Federal Scientific Research Centre “Crystallography and Photonics” of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

^b National Research Nuclear University “Moscow Engineering Physics Institute”, Moscow, Russian Federation

Presented by Academician of the RAS O.V. Rudenko

New fundamental type of spectral line broadening of the electronic-vibrational-rotational (rovibronic) transition in a molecule caused by zero-point vibrations and thermal fluctuations of atomic nuclei near their equilibrium positions during vibrational-rotational motion inside the molecule is discovered in the framework of the Born – Oppenheimer approximation. This kind of broadening is called parametric because the energy of any rovibronic level and transition between levels parametrically depend on the current instantaneous position of nuclei that move much slower than electrons. The quantitative description of the shape and width of the electron transition line corresponding to this type of broadening is obtained within the framework of the harmonic approximation of potential energy surfaces of the ground and excited states. Frank–Condon diagrams with slanting (curved) vibrational levels are proposed to describe this broadening. Expressions are found to describe the parametrically broadened spectral intensity of the vibronic transition. This effect cannot be neglected in rovibronic spectra of any types of molecules due to it has a fundamental origin associated with the quantum uncertainty of nuclear coordinates. The magnitude of this broadening effect is estimated by the example of the (0-0)-transition in a series of polymethine dye monomers. The estimation showed that the magnitude of the parametric broadening of this phononless line is approximately the same as the experimentally observed broadening. It was shown that the ground electronic level in the thermalized molecule is broadened like any other rovibronic level. The existing quantum-chemical methods for calculating molecular spectra do not take into account parametric broadening. These methods smooth the quasi-continuum of closely spaced rovibronic transitions, approximately calculate their common envelope, but do not consider the broadening of a single such transition. We believe that creation of the theory of parametric broadening will contribute to the development of intramolecular energy converters from nuclei to electrons and vice versa, sensor nanoproboscopes, quantum radiotechnical, photoacoustic and acousto-optic devices of molecular size.

Keywords: molecular spectra, spectral line broadening, electronic-vibrational transition, adiabatic approximation, polymethine dyes, parametric broadening

УДК 538.9; 537.874

ТОНКОЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЕ КВАНТОВОЕ КОЛЬЦО – АНАЛОГ АТОМА БОРА, УПРАВЛЯЕМОГО МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

© 2021 г. А. М. Мандель^{1,*}, В. Б. Ошурко^{1,2,**}, С. М. Першин^{2,***}

Представлено академиком РАН И.А. Щербаковым 23.06.2021 г.

Поступило 25.06.2021 г.

После доработки 25.06.2021 г.

Принято к публикации 03.08.2021 г.

Главный признак полуклассического боровского атома – целочисленное квантование орбитального момента электрона – можно реализовать в тонком полупроводниковом квантовом кольце. Такое кольцо из-за наличия двух неэквивалентных гетерограниц обладает уникальными правилами отбора. Они позволяют свести спектр кольца к единственному одноэлектронному состоянию с заранее определенными квантовыми числами, полностью управляемыми магнитным полем. Переключая поле, можно формировать в кольце состояния с заранее необходимыми квантовыми числами и вызывать требуемые переходы между этими состояниями. Обсуждается энергетика этих переходов. Установлено, что существует теоретическая возможность преобразования тепловой энергии в энергию направленного монохроматического излучения.

Ключевые слова: полупроводниковые квантовые кольца, правила отбора, одноэлектронные состояния с управляемыми квантовыми числами

DOI: 10.31857/S2686740021050047

Тонкие полупроводниковые квантовые кольца (закольцованные квантовые нити толщиной в несколько нанометров и диаметром до нескольких десятков нанометров) в последнее время исследуются очень активно [1–6]. Незатухающий квантовый ток (persistent-currents), управляемый эффект Ааронова–Бома, дробное квантование магнитного потока и т.д. – все эти явления чрезвычайно перспективны для квантовой электроники. В частности, в нашей недавней работе [7] показано, что тонкие квантовые кольца из-за наличия двух неэквивалентных гетерограниц обладают уникальными селекционными свойствами. Спектр электронных состояний, локализованных на кольце с фиксированными геометрическими параметрами, либо вообще пуст, либо сводится к единственному уровню, все квантовые числа которого определяются значением внешнего магнитного поля. До последнего времени это свойство колец оставалось скрытым, ибо для радиального

удерживающего потенциала кольца использовались неадекватные модели. Если же использовать потенциал конечной глубины вида

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < R_{in}, \quad r > R_{ex}, \\ -\Delta E_c, & R_{in} < r < R_{ex}, \end{cases}$$

где ΔE_c – скачок дна зоны проводимости на гетерогранице, r – радиальная координата, R_{in} и R_{ex} – соответственно внутренний и внешний радиусы кольца, то уникальность правил отбора в квантовом кольце становится очевидной. Обычно спектр полупроводниковой гетероструктуры формирует условие непрерывности логарифмической производной волновой функции на гетерогранице. В квантовых ямах, нитях и точках таких границ либо одна, либо две, но эквивалентных. И только в квантовых кольцах (хоть и тонких, но конечной толщины, что критически важно) условия сшивки на внешней и внутренней границах неэквивалентны, что и обуславливает их особые селекционные свойства. Фактически такие кольца аналогичны “плоским боровским атомам” с целочисленным орбитальным моментом, но равновесие в таком “атоме” поддерживает магнитное поле вместо ядра.

Везде в дальнейшем используются естественные единицы длины $r_0 \equiv \hbar/\sqrt{2m^*\Delta E_c}$ (m^* – эффективная масса матричного электрона) и энергии $\varepsilon = E/|\Delta E_c|$. “Единица длины” r_0 – деброй-

¹ Московский государственный технологический университет “СТАНКИН”, Москва, Россия

² Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: arkadimandel@mail.ru

**E-mail: vbo08@yandex.ru

***E-mail: pershin@kapella.gpi.ru

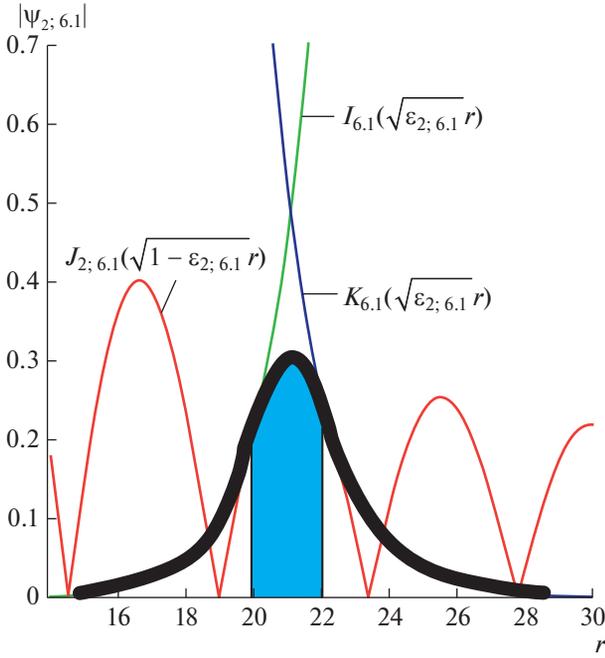


Рис. 1. Волновая функция (2) локализованного на кольце электрона в гетероструктуре InAs/AlSb ($m^* = 0.14m$; $g^* = 1.9$; $\Delta E_c = 2.2$ эВ [11]). Параметры кольца $R_{in} = 20$, $R_{ex} = 22$. Квантовые числа описываемого состояния $l = 1$, $n = 2$, $\Phi/\Phi_0 = 7.15$, $q \approx 6.1$. Площадь внутри кольца выделена.

левская длина электрона на дне зоны проводимости матрицы с энергией, равной глубине потенциальной ямы кольца, ε – энергия связи электрона в кольце в “долях” от глубины ямы. Электрон, даже локализованный на кольце, большую часть времени проводит в матрице, так что изменением его эффективных свойств (массы и g -фактора) можно пренебречь. Отметим, что этот фактор играет существенную роль для восстановления энергии электрона при выключении магнитного поля.

Исходная математическая модель для волновой функции электронных компонентов 8-компонентного спинора Кейна, локализованных на кольце, в указанных единицах имеет вид

$$\left[-\Delta^{(2)} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - i \frac{e\hbar B}{2m^* \Delta E_c} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \left(\frac{eBr}{2\hbar} \right)^2 + \frac{V(\mathbf{r})}{\Delta E_c} \right] \psi(r, \varphi, z) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} - \varepsilon \pm \frac{g^* \mu_B B}{2\Delta E_c} \right) \psi(r, \varphi, z) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\frac{\partial \psi}{\partial r}(0, \varphi, z) = 0; \\ \psi(r, \varphi, z) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty.$$

Здесь $\Delta^{(2)}$ – двумерный лапласиан, B – индукция внешнего однородного магнитного поля, e – элементарный заряд, $V(\mathbf{r})$ – периодический потенциал матричного полупроводника, ε – энергия связи электрона в кольце. Верхний индекс в фигурных скобках в правой части соответствует области матрицы (как обычно, энергия отсчитывается от дна зоны проводимости матрицы), нижний индекс – области внутри кольца, g^* – эффективный фактор Ланде для матричного электрона, μ_B – магнетон Бора. Последний член в правой части – энергия взаимодействия спина электрона с магнитным полем; верхний знак соответствует направлению спина вдоль поля, нижний – соответственно против. Спин-орбитальным взаимодействием в обоих общепринятых вариантах [5] мы здесь пренебрегаем, ибо на удерживающем потенциале кольца, определяемом радиальными функциями, оно сказывается слабо. Магнитное поле достаточно велико, чтобы влиять на энергию углового движения электрона, но не настолько велико, чтобы квантовать движение электрона в матрице ($\sim 1-10$ Тл). В этом случае использовать для волновой функции разложение по уровням Ландау нецелесообразно [8, 9].

После отделения решеточных функций Ванье, локализованных на узлах тонкого кольца (для такого рода ситуаций они удобнее периодических блоховских функций [10]), решения уравнений для вертикальной и угловой составляющих получаем уравнение для гладкой огибающей радиальной волновой функции $\psi_{nq}(r)$. Оно явно приведено в [7], так что здесь продемонстрируем лишь характер его решения для конкретного примера гетероструктуры InAs/AlSb (рис. 1)

$$\psi_{nq}(r) = \begin{cases} AI_q(\sqrt{\varepsilon_{nq}}r), & r < R_{in}, \\ BJ_{nq}(\sqrt{1-\varepsilon_{nq}}r), & R_{in} < r < R_{ex}, \\ DK_q(\sqrt{\varepsilon_{nq}}r), & R_{ex} < r, \end{cases} \quad (2)$$

где I , J , K – цилиндрические функции соответственно Инфельда, Бесселя и Макдональда, A , B и D – нормировочные постоянные (их значения в дальнейшем не понадобятся), n – номер экстремума функции Бесселя, описывающего волновую функцию внутри кольца, q – “эффективное орбитальное число” в магнитном поле

$$q^2 = \left(l - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \pm \frac{g^* m^* \Phi}{2 m \Phi_0},$$

$\Phi = \pi BR_0^2$ – магнитный поток через кольцо, $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e}$ – его квант (с учетом того, что у нас в кольце не куперовская пара $2e$, а уединенный электрон).

Толщина кольца позволяет “вместить” окрестность только одного такого экстремума. Решение (2)

должно удовлетворять трем дополнительным условиям: двум условиям непрерывности логарифмической производной на двух гетерограницах кольца

$$\sqrt{\varepsilon_{nq}} J_{nq}(\sqrt{1-\varepsilon_{nq}} R_{in}) \frac{dI_q}{dr} = -\sqrt{1-\varepsilon_{nq}} I_q(\sqrt{\varepsilon_{nq}} R_{in}) \frac{dJ_{nq}}{dr},$$

$$\sqrt{\varepsilon_{nq}} J_{nq}(\sqrt{1-\varepsilon_{nq}} R_{ex}) \frac{dK_q}{dr} = \sqrt{1-\varepsilon_{nq}} K_q(\sqrt{\varepsilon_{nq}} R_{ex}) \frac{dJ_{nq}}{dr}, \quad (3)$$

а также условию того, что экстремум функции Бесселя лежит внутри кольца

$$\frac{dJ_{nq}(\sqrt{1-\varepsilon_{nq}} R_0)}{dr} = 0 \quad \text{при} \quad R_{in} < R_0 < R_{ex}. \quad (4)$$

Именно сочетание этих условий и формирует селекционные свойства кольца. В отсутствие магнитного поля $\Phi = 0$ индекс функций Бесселя $q = l$, т.е. меняться может лишь дискретно. При этом условия (3), (4) могут согласоваться лишь случайно, при строго определенных значениях R_{in} и R_{ex} . Для произвольных геометрических размеров кольца согласование может обеспечить лишь непрерывное изменение q , а это возможно лишь за счет магнитного поля. Разумеется, в нашем случае магнитный поток Φ не кратен Φ_0 , как в объемном сверхпроводнике; в кольце условия квантования совсем другие.

Таким образом, устойчивые связанные одно-электронные состояния формируются в кольце лишь при строго определенных значениях магнитного поля, причем каждый уровень соответствует единственному набору $n, l, \pm g^*$. Это показано на рис. 2 для S - и P -состояний электрона в кольце.

Легко видеть, что если состояние (1) – исходное, то любое его квантовое число мы можем изменить, меняя должным образом магнитное поле. Фактически это – аналог “плоского атома Бора” с полностью управляемыми свойствами.

Коротко остановимся на энергии переходов между состояниями, показанными на рис. 2. Отметим, что трансцендентные условия (3) не дают возможности явно увидеть зависимость энергии состояния от его квантовых чисел и параметров гетероструктуры. Это можно сделать, используя аналитическую аппроксимацию функций Бесселя в (3). В результате для энергии связанного уровня получаем хоть и весьма приближенное, но качественно понятное выражение

$$E = \Delta E_c \left(-\frac{d}{1+d} + \frac{q^2}{R_0^2} \right) - \frac{\hbar^2 q_z^2}{2m^*}, \quad (5)$$

где $d = R_{ex} - R_{in}$ – ширина кольца в единицах r_0 , последнее слагаемое – энергия вертикального движения (q_z – волновое число в z -компоненте

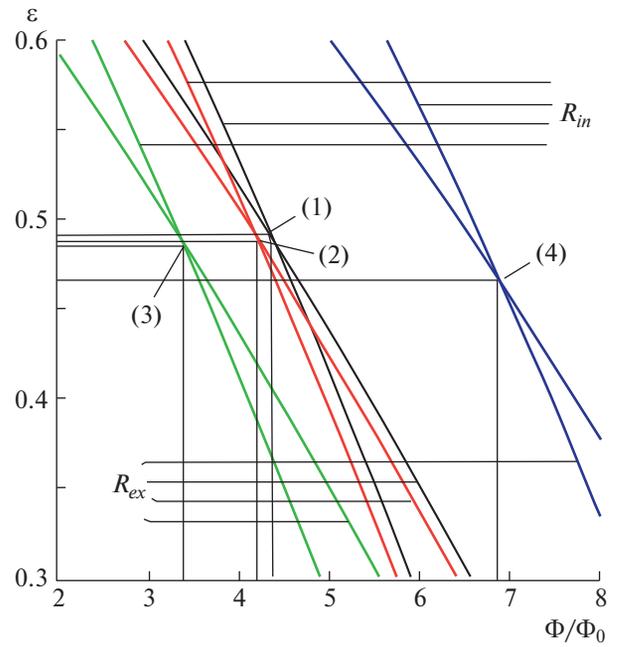


Рис. 2. Связь магнитного поля с энергией связи для 4-х стабильных состояний в тонком квантовом кольце. Наклонные линии – численное решение уравнений (3). Стабильные состояния в кольце существуют только на пересечении этих линий, когда оба условия (3) выполняются. Параметры кольца $R_{in} = 20$, $R_{ex} = 22$. Пара линий (1) описывает состояние с квантовыми числами $l = 1, s = -1/2, n = 3$; пара линий (2) – состояние с квантовыми числами $l = 1, s = 1/2, n = 3$; пара линий (3) – состояние с квантовыми числами $l = 0, s = -1/2, n = 3$, пара линий (4) – состояние с квантовыми числами $l = 1, s = 1/2, n = 2$. Видно, как меняя магнитное поле, мы можем изменить любое квантовое число.

волновой функции в (1), $\sim \cos(q_z z)$ и зависящее от ΔE_c и толщины кольца по оси z). Вертикальную толщину кольца всегда можно сделать столь малой, чтобы возбуждался только минимальный уровень вертикального движения. Меняется при переходах, таким образом, только параметр q , связанный с магнитным полем. При переходе из состояния (1) в состояние (2) меняется лишь ориентация спина, так что энергия кванта определяется соотношением:

$$\hbar\omega \sim \Delta E_c \frac{g^* m^* \Phi}{2R_0^2 m \Phi_0}.$$

Существенно, что такие переходы лежат в терагерцевом диапазоне [12] и теоретически могут быть использованы для прямой генерации ТГц-излучения с перестраиваемой частотой. Переход из (1) в (3), сопровождающийся изменением орбитального момента на 1, дает энергию кванта

$$\hbar\omega \sim \frac{\Delta E_c}{R_0^2} \left(\frac{\Phi_1^2}{\Phi_0^2} - \frac{\Phi_2^2}{\Phi_0^2} - 2 \frac{\Phi_1}{\Phi_0} + 1 \right),$$

где значения $\frac{\Phi_1}{\Phi_0}$ и $\frac{\Phi_2}{\Phi_0}$ можно оценить по рис. 2.

Такие переходы значительно больше первых по энергии. Самые высокоэнергетические переходы внутри кольца типа (1)–(4) связаны с изменением номера экстремума функции Бесселя n . Они описываются предыдущим выражением, но магнитный поток, как видно из рис. 2, меняется значительно существеннее. Таким образом, энергия кванта формируется почти исключительно из энергии магнитного поля.

В оптическом (а возможно, и ультрафиолетовом) диапазоне лежат переходы из зоны проводимости матрицы на (единственный) уровень кольца. Остановимся на них чуть подробнее в силу их, возможно уникальной, эффективности. Пусть в начальном состоянии магнитное поле выключено и уровни в кольцах “закрыты”. Включая магнитное поле нужной величины, мы эти уровни “открываем”, и электроны со дна зоны проводимости будут переходить на них, излучая, как можно показать, направленные и близкие к монохроматическим кванты (вопрос о когерентности, необходимой для лазерной генерации, мы сейчас даже не ставим). После обратного выключения поля электроны, локализованные на кольцах, будут терять устойчивость и вытесняться обратно в зону проводимости (либо в валентную зону) за счет энергии тепловых фононов. Напомним, что кольцо тонкое и электроны, даже локализованные на кольце, большую часть времени проводят в матрице (см. рис. 1). В итоге последовательность прямоугольных импульсов магнитного поля необходимой величины фактически преобразует тепловую энергию электронов в высокосортную энергию монохроматического излучения. Разумеется, второму закону термодинамики это не противоречит, так как и переключение магнитного поля требует затрат энергии для достижения порогового условия генерации.

В заключение отметим, что, кроме эффективности, квантовые кольца как активные элементы обладают целым рядом преимуществ по сравнению с квантовыми точками. Связано это прежде всего с тремя факторами: 1) более жесткими правилами отбора, обеспечивающими более чистый энергетический спектр; 2) цилиндрической симметрией колец, ориентирующей излучаемые кванты вдоль оси симметрии и 3) главное преимущество – возможность перестройки частоты излучения простым переключением магнитного поля.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 20-07-00983А и № 18-52-16016).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Viefers S., Koskinen P., Singha Deo P., Manninen M.* Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents // *Physica E*. 2004. V. 21. № 1. P. 1–35. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2003.08.076>
2. *Manninen M., Viefers S., Reimann S.M.* Quantum rings for beginners II: Bosons versus fermions // *Physica E*. 2012. V. 46. P. 119–132. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.09.013>
3. *Kammermeier M., Seith A., Wenk P., Schliemann J.* Persistent spin textures and currents in wurtzite nanowire-based quantum structures // *Phys. Rev. B*. 2020. V. 101. P. 195418–195435. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.195418> (2020); <https://arxiv.org/pdf/2001.06571.pdf>
4. *Li B., Magnus W., Peeters F.M.* Tunable exciton Aharonov-Bohm effect oin a quantum ring // *J. Physics: Conferens Series*. 2010. V. 210. In: 11th International Conference on Optics of Excitons in Confined Systems (OECS11). 7–11 September 2009, Madrid, Spain. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/210/1/012030/meta>
5. *Lia J.M., Tamborenea P.I.* Narrow quantum rings with general Rashba and Dresselhaus spin-orbit interaction // *Physica E*. 2020. V. 126. P. 114419–114431. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114419>
6. *Kozin V.K., Iorsh I.V., Kibis O.V., Shelykh I.A.* Periodic array of quantum rings strongly coupled to circularly polarized light as a topological insulator // *Phys. Rev. B*. 2018. V. 97. P. 035416–035423. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.035416>
7. *Мандель А.М., Ошурко В.Б., Першин С.М., Карпова Е.Е., Артемова Г.Д.* О лазере с перестраиваемой частотой на тонких полупроводниковых квантовых кольцах // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2021. Т. 498. С. 17–21. <https://doi.org/10.31857/S2686740021030147>
8. *Родионов В.Н., Крацова Г.А., Мандель А.М.* Отсутствие стабилизации квазистационарных состояний электрона в сильном магнитном поле // ДАН. 2002. Т. 386. № 6. С. 753–755.
9. *Родионов В.Н., Крацова Г.А., Мандель А.М.* Волновая функция и распределение токов вероятности связанного электрона, движущегося в однородном магнитном поле // ТМФ. 2010. Т. 164. № 1. С. 157–171.
10. *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
11. *Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan R.* // *J. Appl. Phys.* 2001. V. 89. 5815. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
12. *Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И., Шарц А.А.* О естественной намагниченности идеальных квантовых точек и возможности детектирования терагерцевого излучения в магнитном поле // Радиотехника и электроника. 2015. Т. 60. № 10. С. 1073–1079. <https://doi.org/10.1134/S1064226915100101>

A THIN SEMICONDUCTOR QUANTUM RING IS AN ANALOGUE OF A BOHR MODEL ATOM CONTROLLED BY A MAGNETIC FIELD

A. M. Mandel^a, V. B. Oshurko^{a,b}, and S. M. Pershin^b

^a MSTU “STANKIN”, Moscow, Russian Federation

^b Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

Presented by Academician of the RAS I.A. Shcherbakov

The main feature of a semiclassical Bohr atom – integer quantization of the orbital angular momentum of an electron – can be realized in a thin semiconductor quantum ring. Such a ring, due to the presence of two non-equivalent heterointerfaces, has unique selection rules. They allow you to reduce the spectrum of the ring to a single one-electron state with predetermined quantum numbers, completely controlled by a magnetic field. By switching the field, it is possible to form states in the ring with the necessary quantum numbers in advance and cause the required transitions between these states. The energetics of these transitions is discussed. It has been established that there is a theoretical possibility of converting thermal energy into high-grade energy of monochromatic radiation.

Keywords: semiconductor quantum rings, selection rules, one-electron states with controlled quantum numbers

УДК 543.424.2

АНАЛИЗ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ ПОЛИЕНОВЫЕ ЦЕПИ, МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

© 2021 г. В. С. Новиков^{1,*}, С. М. Кузнецов¹, В. В. Кузьмин¹, К. А. Прохоров¹, Е. А. Сагитова¹,
М. Е. Дарвин², Ю. Ладеманн², Л. Ю. Устынюк³, Г. Ю. Николаева¹

Представлено академиком РАН И.А. Шербаковым 28.07.2021 г.

Поступило 28.07.2021 г.

После доработки 28.07.2021 г.

Принято к публикации 02.08.2021 г.

Проведен теоретический анализ зависимости спектров комбинационного рассеяния молекул, содержащих полиеновые цепи, от длины сопряжения, структуры боковых и концевых групп и типа изомера.

Ключевые слова: комбинационное рассеяние света, спектроскопия, теория функционала плотности, полиены, каротиноиды, поливинилхлорид

DOI: 10.31857/S2686740021050060

ВВЕДЕНИЕ

Наличие в структуре молекулы полиеновой цепи объединяет, казалось бы, абсолютно разные вещества: природные соединения каротиноиды и синтетический полимер поливинилхлорид (ПВХ), подвергнутый деградации (например, УФ-облучению или нагреванию).

Каротиноиды жизненно необходимы человеку, так как эти вещества выполняют защитные функции антиоксидантов и нейтрализуют свободные радикалы в организме человека, обладают провитаминными, иммуностимулирующими и лечебно-профилактическими свойствами [1, 2]. Каротиноиды не синтезируются в организме человека и поступают в него только с пищей (в основном, с овощами и фруктами), а также в составе биодобавок, лечебных и косметических средств для наружного применения.

Свойства каротиноидов (провитаминная активность, биодоступность, антиоксидантные

свойства) зависят как от химической структуры молекулы, так и от изомерного состава молекул каждого каротиноида [1, 3, 4]. Изомерный состав каротиноидов может меняться под воздействием внешних факторов, например, УФ-облучения или нагревания. Ввиду этого очень важно определять не только содержание и химический состав, но и изомерный состав каротиноидов в биотканях, продуктах питания, лекарственных препаратах.

ПВХ широко используется во многих сферах деятельности человека, в том числе для производства строительных материалов, изоляции кабелей, одноразовых медицинских изделий и искусственной кожи [5, 6]. Однако под воздействием УФ-излучения или повышенной температуры вследствие выделения хлористого водорода (HCl) в ПВХ образуются полиены [5–9]. Содержание и распределение по длинам полиенов в ПВХ зависит от способа деградации и значительно влияет на свойства (электрические, оптические, механические) этого полимера [5–9]. Признаком образования полиенов в ПВХ является изменение цвета (пожелтение) полимера, которое начинает наблюдаться, когда потери HCl достигают 0.1% [7]. Для изучения процессов деградации и улучшения эксплуатационных свойств ПВХ необходимы более точные методы определения содержания и распределения по длинам полиенов — при потерях HCl от 0.0001% [7].

Таким образом, актуальной задачей является структурный анализ природных и синтетических соединений, содержащих полиены. Такой анализ

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова
Российской академии наук, Москва, Россия

² Charité – Universitätsmedizin Berlin, Corporate Member
of Freie Universität Berlin and Humboldt-Universität
zu Berlin, Department of Dermatology, Venerology
and Allergology, Center of Experimental and Applied
Cutaneous Physiology, Berlin, Germany

³ Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*E-mail: vs.novikov@kapella.gpi.ru

может быть эффективно проведен методом спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) света, так как резонансное усиление интенсивности линий КР полиенов при возбуждении спектров излучением с длиной волны в видимой области позволяет детектировать полиены в очень малых концентрациях (при потерях НСІ менее 0.0001% в случае ПВХ) [7]. При возбуждении спектров КР лазерным излучением с определенной длиной волны резонансные условия оптимальны для полиенов с конкретной длиной [9], и это дает возможность селективно исследовать полиены разной длины [5].

Спектроскопия КР света – это высокоинформативный и неразрушающий метод анализа молекулярных веществ [10]. В настоящее время спектроскопия КР все чаще используется для исследования биотканей, анализа состава и качества пищевых продуктов, лекарственных и косметических препаратов, структуры полимерных изделий и степени их деградации в процессе эксплуатации, во многих других практических применениях. Этот метод также применялся при исследовании каротиноидов в чистом виде, биотканей [11, 12] и ПВХ, подвергнутого термо- и фотодеградации [5, 9, 13]. Как для каротиноидов [14], так и для деградированного ПВХ [13] были предложены феноменологические формулы, связывающие частоту валентного колебания $C=C$ -связей и длину полиена. Интересно, что традиционно для этих двух классов веществ для оценки длины полиенов используются разные зависимости: экспоненциальная для ПВХ и гиперболическая для каротиноидов [13, 14].

До настоящего времени остаются нерешенными многие задачи спектроскопии КР молекул, содержащих полиеновые цепи. В частности, мало исследована зависимость спектров КР каротиноидов от изомерного состава молекул, и практически нет данных о зависимости спектров КР каротиноидов от наличия боковых и концевых групп. Для ПВХ нет данных о влиянии на линии полиенов колебаний участков молекул ПВХ, которые расположены с двух сторон от полиеновой цепи и могут иметь как разную длину, так и разный конфигурационный состав.

Теоретическое исследование спектров КР каротиноидов является очень полезным вследствие крайне низкой фото-, термо- и окислительной стабильности этих соединений. Кроме того, получение изомеров каротиноидов в чистом виде для экспериментальных исследований является трудоемкой и дорогостоящей процедурой.

Моделирование спектров КР полиенов, встроенных в молекулу ПВХ, является очень важной задачей, так как на практике невозможно приготовить образец ПВХ, в котором содержались бы

полиены одной длины или с заданным распределением полиенов по длинам.

Целью данной работы являлось изучение влияния длины сопряжения, структуры боковых и концевых групп, а также типа изомера полиена на спектр КР молекул, содержащих полиеновые цепи.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

Были зарегистрированы экспериментальные спектры КР β -каротина и биотканей, содержащих каротиноиды: моркови, листа растения *Crassula ovata* и рогового слоя кожи ладони человека. Кроме того, был записан спектр КР ПВХ, подвергнутого УФ-облучению и содержащего вследствие фотодеструкции полиены различной длины.

Спектры КР коммерческого кристаллического порошка β -каротина и кожи были записаны при использовании конфокальных микроскопов [15] при длинах волн возбуждающего излучения соответственно 473 и 514 нм. Для регистрации спектров КР деградированного ПВХ, листа и моркови использовался двойной монохроматор U1000 (Jobin Yvon, France) [16] и возбуждающее излучение с длиной волны 532 нм. Спектральное разрешение составляло 4–5 cm^{-1} .

Для моделирования структуры и спектров КР всех исследуемых молекул использовалась теория функционала плотности (ТФП). Расчеты проводились в некоммерческой программе “Природа” с использованием функционала OLYP и расширенного базиса гауссова типа (4z.bas) [16, 17]. Для учета конечной ширины линий в экспериментальных спектрах к рассчитанным спектрам применялась процедура уширения [16]. Для исключения из теоретического анализа зависимости интенсивностей линий КР от длины волны возбуждающего излучения, рассчитывались значения Raman Scattering Activity (R.S.A., формула (4) из работы [16]).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 показаны экспериментальные спектры КР кристаллического β -каротина, моркови, листа *Crassula ovata*, кожи человека и деградированного ПВХ. Все эти спектры объединяет наличие двух интенсивных линий КР, соответствующих валентным колебаниям $C-C$ - и $C=C$ -связей в полиенах и наблюдающихся около 1150 и 1520 cm^{-1} соответственно. Малоинтенсивная линия около 1000 cm^{-1} отвечает деформационным колебаниям боковых CH_3 -групп в каротиноидах.

С целью определения зависимости спектров КР молекул, содержащих полиеновые цепи, от длины сопряжения и от структуры боковых и

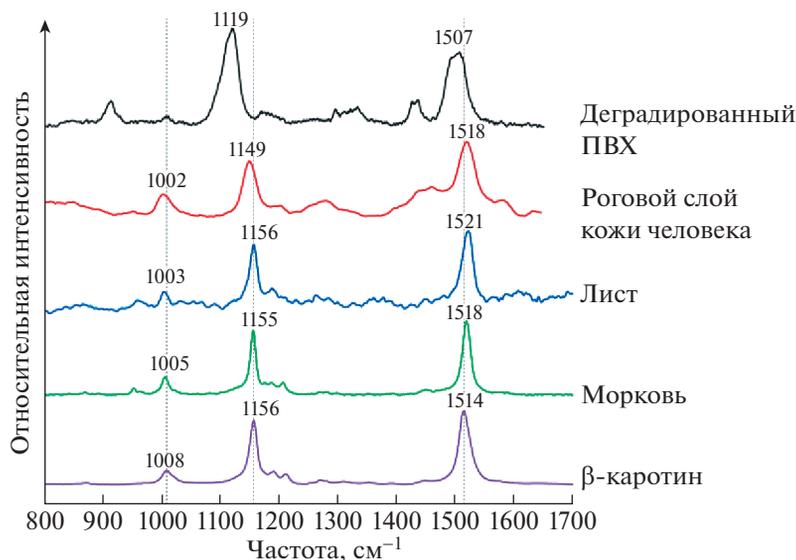


Рис. 1. Экспериментальные спектры КР деградированного ПВХ (длина волны возбуждения 532 нм), рогового слоя кожи человека *in vivo* (длина волны возбуждения 514 нм), листа растения *Crassula ovata* и моркови (длина волны возбуждения 532 нм) и кристаллического β -каротина (длина волны возбуждения 473 нм). На спектрах обозначены положения максимумов линий КР.

концевых групп на основе ТФП были рассчитаны структуры и спектры КР *транс*-изомеров ряда соединений: полиенов $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_n\text{CH}_3$ различной длины n ; молекулы β -каротина, содержащей полиен с 9 $\text{C}=\text{C}$ -связями; модифицированных молекул β -каротина, в которых боковые или концевые группы замещались соответственно атомами H и CH_3 -группами; ликопина, α - и γ -каротинов. Кроме того, расчеты также проводились для полиенов с 9 $\text{C}=\text{C}$ -связями, в которых концевые CH_3 -группы были заменены на группы $(-\text{CH}_2-\text{CHCl}-)_k\text{H}$, $k = 3-6$, т.е. последовательностями мономеров винилхлорида различной длины. Такая полиеновая цепь, встроенная в олигомер винилхлорида, представляет собой модель молекулы деградированного ПВХ.

При моделировании структуры и спектров КР молекулы ПВХ следует учитывать ее конфигурационный состав, т.е. расположение атомов хлора относительно углеродного скелета. Промышленный ПВХ является атактическим полимером, в котором атомы хлора расположены беспорядочно по одну и по другую сторону от углеродного скелета. С применением генератора случайных чисел была построена и оптимизирована структура атактического олигомера винилхлорида. Затем из этого олигомера удалили по 9 атомов H и Cl из центральной части каждого олигомера, моделируя таким образом образование полиенов в деградированном ПВХ. В качестве примера, рис. 2 демонстрирует рассчитанные структуры *транс*-изомеров полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_9\text{CH}_3$, β -ка-

ротина и полиенов с 9 $\text{C}=\text{C}$ -связями, встроенных в олигомеры винилхлорида различной длины.

На рис. 3 приведены рассчитанные зависимости частот валентных колебаний $\text{C}-\text{C}$ - и $\text{C}=\text{C}$ -связей в спектрах *транс*-изомеров полиенов от длины полиена n . Были проанализированы полиены с числом $\text{C}=\text{C}$ -связей от 7 до 12, так как в этот диапазон попадают наиболее важные для жизнедеятельности человека каротиноиды. Из рис. 3 видно, что частоты валентных колебаний $\text{C}-\text{C}$ - и $\text{C}=\text{C}$ -связей уменьшаются с увеличением длины сопряжения в полиене. Полученная на основе ТФП зависимость для полиенов с $n = 7-12$ находится в согласии с экспериментальными данными из работ [14, 18].

Частоты валентных колебаний $\text{C}=\text{C}$ связей для полиенов, встроенных в олигомеры винилхлорида разной длины, и для ликопина совпадают с частотами для полиенов $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_n\text{CH}_3$ (рис. 3). Этот результат подтверждает, что частота валентных колебаний $\text{C}=\text{C}$ связей для *транс*-изомеров полиенов определяется, в основном, числом этих связей. В случае α -, β - и γ -каротинов частоты валентных колебаний $\text{C}=\text{C}$ -связей меньше, чем частоты для полиенов. Этот результат объясняется тем, что $\text{C}=\text{C}$ -связь в концевых группах (иононовых кольцах) этих каротиноидов находится в частичном сопряжении с полиеновой цепью, и, как следствие, длина сопряжения для этих каротиноидов больше, чем длина полиеновой цепи [14].

В области валентного колебания $\text{C}-\text{C}$ -связей в спектрах полиенов, встроенных в олигомеры винилхлорида, и α - и β -каротинов наблюдается

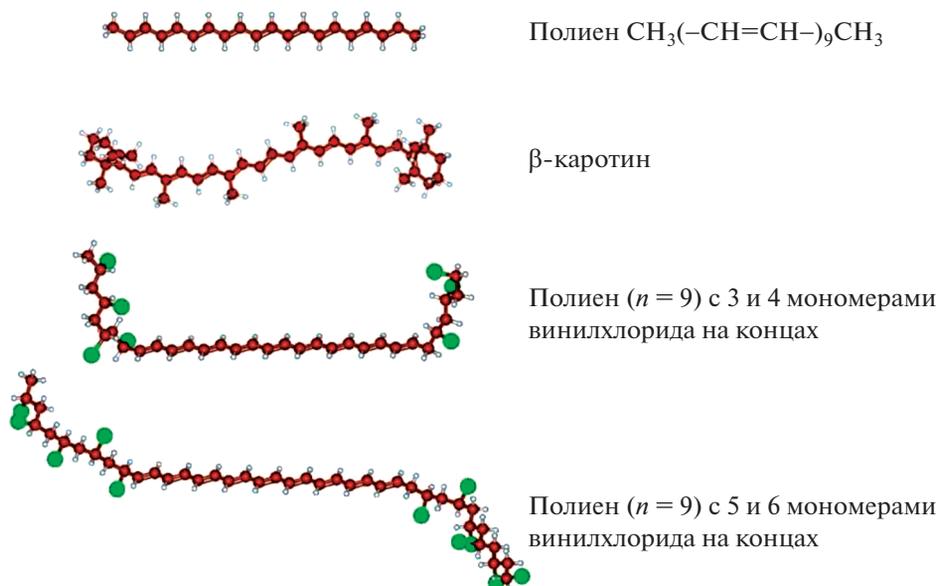


Рис. 2. Рассчитанные структуры *транс*-изомеров полиена ($n = 9$), β -каротина, полиена ($n = 9$) с 3 и 4 мономерами винилхлорида на концах и полиена ($n = 9$) с 5 и 6 мономерами винилхлорида на концах.

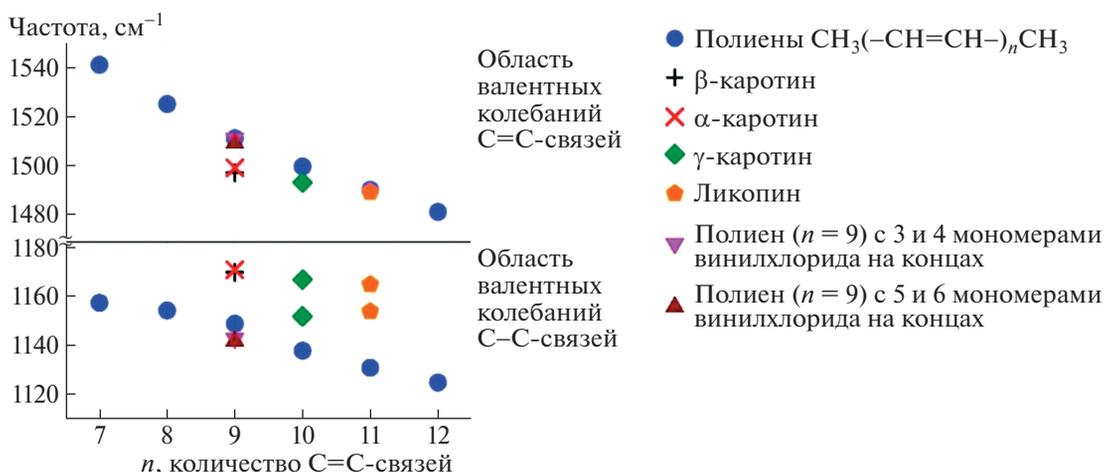


Рис. 3. Зависимость частот валентных колебаний C–C- и C=C-связей в рассчитанных спектрах КР от количества сопряженных C=C-связей для *транс*-изомеров следующих молекул: полиенов $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_n\text{CH}_3$ ($n = 7-12$), α -, β -, γ -каротинов, ликопина, полиена ($n = 9$) с 3 и 4 мономерами винилхлорида на концах и полиена ($n = 9$) с 5 и 6 мономерами винилхлорида на концах. Для γ -каротина и ликопина наблюдается расщепление линии, отвечающей валентным колебаниям C–C-связи.

только одна интенсивная линия, в то время как для γ -каротина и ликопина — дублет интенсивных линий. Из рис. 3 видно, что частота валентного колебания C–C-связей сложным образом зависит от длины полиена, структуры концевых и боковых групп.

На рис. 4 приведены рассчитанные спектры КР полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_9\text{CH}_3$, полиенов с 9 C=C-связями, встроенных в олигомеры винилхлорида, β -каротина, модифицированных молекул β -каротина, в которых все боковые или все

концевые группы замещались атомами H и CH_3 -группами соответственно.

Из рис. 3 и 4 видно, что в спектрах полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_9\text{CH}_3$ и полиенов с 9 C=C-связями, встроенных в олигомеры винилхлорида, т.е. имеющих одинаковую длину сопряжения, частота и форма линии валентного колебания C=C-связей одинаковые.

Увеличение массы концевых групп полиенов, встроенных в олигомеры винилхлорида, приво-

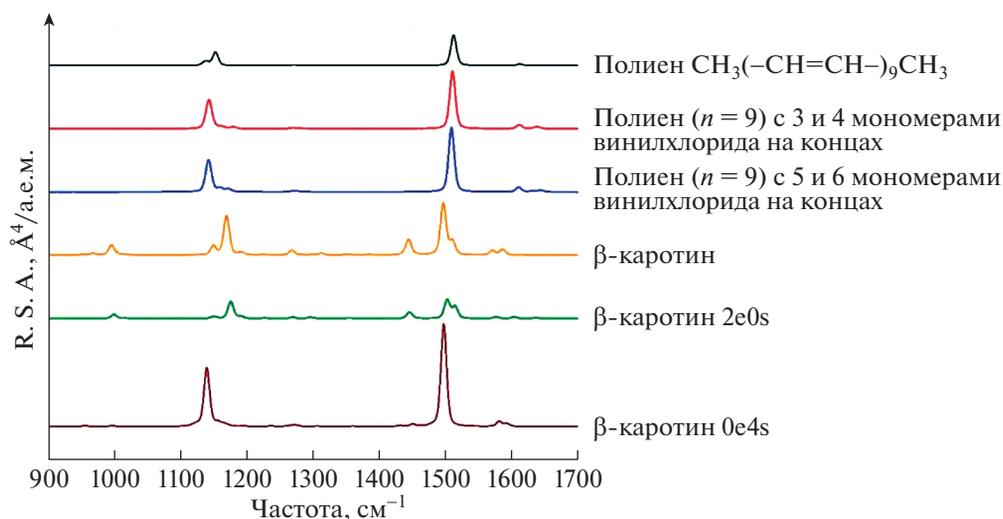


Рис. 4. Рассчитанные спектры КР *транс*-изомеров следующих молекул: полиена ($n = 9$) с различными концевыми группами (CH_3 -группами или последовательностями мономеров винилхлорида), β -каротина и модифицированных молекул β -каротина: 2e0s – концевые группы (иононовые кольца) заменены на CH_3 -группы; 0e4s – боковые CH_3 -группы заменены атомами водорода.

дит к сдвигу линии КР в низкочастотную область, соответствующей валентному колебанию $\text{C}-\text{C}$ -связей, и к увеличению интенсивности обеих линий в этом диапазоне спектра.

Как уже было сказано выше, длина сопряжения для β -каротина больше, чем для полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_9\text{CH}_3$. При сравнении спектров этих соединений видно, что интенсивность линий, соответствующих валентным колебаниям $\text{C}-\text{C}$ - и $\text{C}=\text{C}$ -связей, увеличивается при увеличении длины сопряжения. Этот результат также подтверждается расчетами, приведенными в работе [16].

Значение частоты валентных $\text{C}-\text{C}$ -колебаний для β -каротина, превышающее частоту этих колебаний для полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_9\text{CH}_3$, можно объяснить только влиянием боковых групп. Этот вывод подтверждают рассчитанные спектры КР модифицированных молекул β -каротина, в которых все боковые или все концевые группы замещались атомами H - и CH_3 -группами соответственно. При удалении концевых групп в молекуле β -каротина длина сопряжения становится меньше, и линии валентных колебаний $\text{C}-\text{C}$ - и $\text{C}=\text{C}$ -связей смещаются в высокочастотную область спектра. Этот результат также подтверждается приведенной на рис. 3 зависимостью для полиенов. При удалении всех боковых групп в молекуле β -каротина частота валентного колебания $\text{C}=\text{C}$ -связей не меняется, так как не меняется длина сопряжения, а линия валентного колебания $\text{C}-\text{C}$ -связей значительно смещается в низкочастотную область спектра. При удалении всех боковых групп также исчезает расщепление линий,

отвечающих валентным колебаниям $\text{C}-\text{C}$ - и $\text{C}=\text{C}$ -связей, и пропадает линия КР около 1000 cm^{-1} , соответствующая деформационным колебаниям боковых CH_3 -групп. При этом интенсивности линий КР значительно возрастают, что мы объясняем выпрямлением полиеновой цепи и исчезновением расщепления линий.

Таким образом, можно сделать вывод, что частота валентного колебания $\text{C}=\text{C}$ -связей в основном определяется длиной сопряжения, а частота валентного колебания $\text{C}-\text{C}$ -связей зависит как от длины сопряжения, так и от структуры боковых и концевых групп. На интенсивность линий, отвечающих валентным колебаниям $\text{C}-\text{C}$ - и $\text{C}=\text{C}$ -связей, влияют длина сопряжения, масса концевых групп, наличие заместителей в полиеновой цепи, приводящее к изгибу цепи и расщеплению линий в спектре.

Для демонстрации зависимости спектров КР полиенов и каротиноидов от типа изомера на рис. 5 приведены спектры КР изомеров полиенов с $n = 9$ и 11, β -каротина и ликопина. Изомеры 3-*цис*- и 7-*цис*-полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_9\text{CH}_3$ соответствуют 9-*цис*- и 13-*цис*-изомерам β -каротина, а изомер 9-*цис*-полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_{11}\text{CH}_3$ соответствует 13-*цис*-изомеру ликопина.

Из рис. 5 видно, что спектры КР изомеров каротиноидов заметно отличаются, и это потенциально позволяет различать изомеры этих соединений по спектрам КР. В спектрах 13-*цис*-изомеров β -каротина и ликопина возникает заметное расщепление обеих линий. Из сравнения спектров, приведенных на рис. 5, следует, что полиены с $n = 9$ и 11 не могут быть использованы в ка-

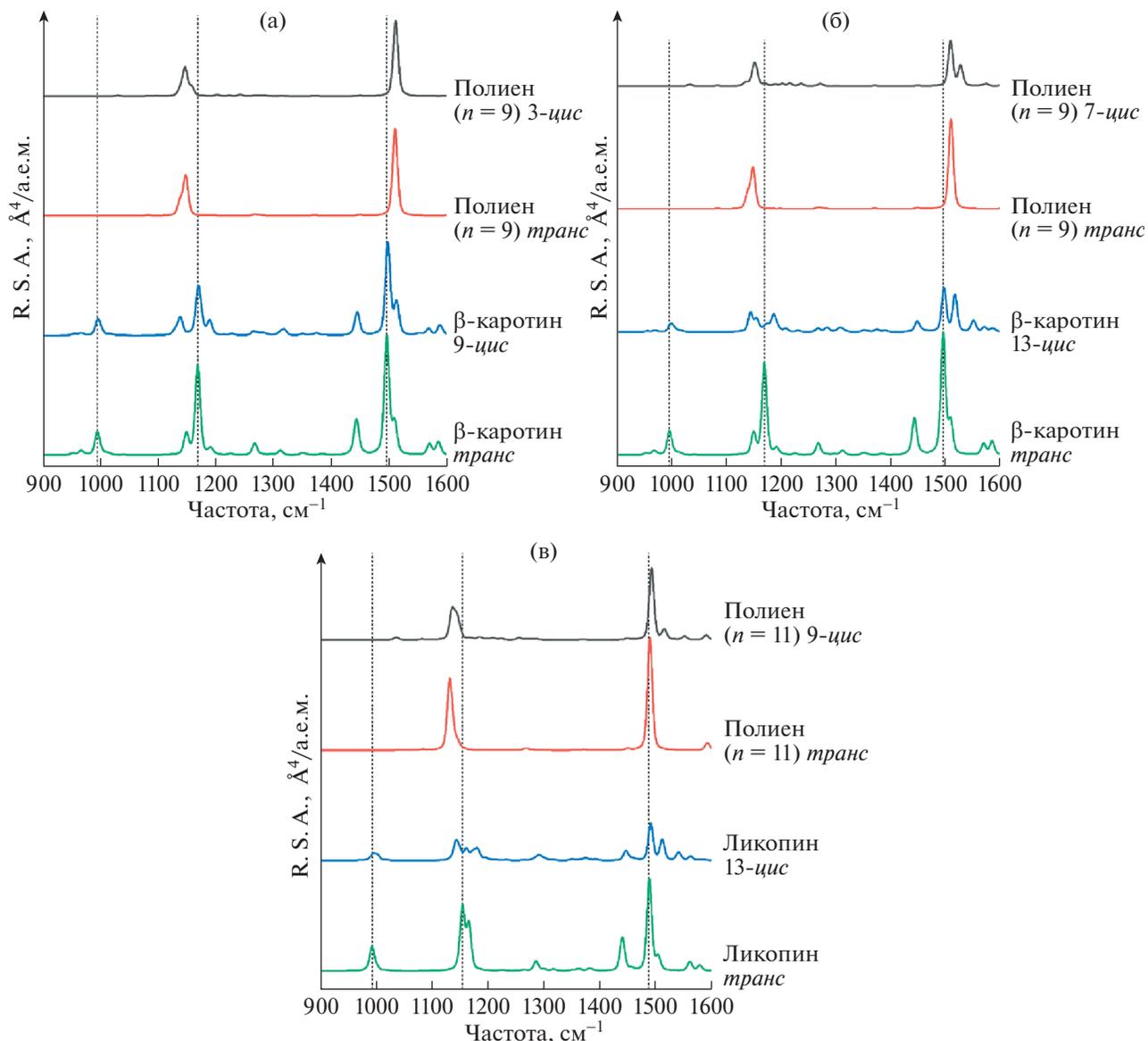


Рис. 5. Рассчитанные спектры КР: а – *транс*- и *9-цис*-изомеров β -каротина, *транс*- и *3-цис*-изомеров полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_9\text{CH}_3$; б – *транс*- и *13-цис*-изомеров β -каротина, *транс*- и *7-цис*-изомеров полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_9\text{CH}_3$; в – *транс*- и *13-цис*-изомеров ликопина, *транс*- и *9-цис*-изомеров полиена $\text{CH}_3(-\text{CH}=\text{CH}-)_{11}\text{CH}_3$.

честве модели для описания спектров КР *цис*-изомеров каротиноидов, так как такая модель только частично отражает различия в спектрах КР *транс*- и *цис*-изомеров молекул каротиноидов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведены теоретические спектры КР ряда веществ, содержащих полиеновые цепи. Расчет был выполнен с использованием теории функционала плотности. Показано, что для *транс*-изомеров полиенов частота валентного колебания С=C-связей определяется числом С=C-

связей в полиене и уменьшается с увеличением длины сопряжения.

Частота валентного колебания С–С-связей для *транс*-изомеров полиенов зависит сложным образом от длины сопряжения, а также от структуры боковых и концевых групп. При увеличении длины сопряжения частота валентного колебания С–С-связей уменьшается. При увеличении массы концевых групп эта линия смещается в низкочастотную область, а при наличии боковых CH_3 -групп значительно смещается в высокочастотную область.

Интенсивность линий, отвечающих валентным колебаниям С–С- и С=C-связей, возрастает с увеличением длины сопряжения и массы кон-

цевых групп. Наличие боковых CH_3 -групп приводит к изгибу полиеновой цепи в каротиноидах, уменьшению интенсивности и расщеплению линий, соответствующих валентным колебаниям $\text{C}-\text{C}$ - и $\text{C}=\text{C}$ -связей.

Наличие атактических последовательностей мономеров винилхлорида $(-\text{CH}_2-\text{CHCl}-)_k$, $k = 3-6$ не влияет на частоту валентного колебания $\text{C}=\text{C}$ -связей полиенов в деградированном ПВХ. В связи с этим при изучении связи частоты этого колебания с длиной полиена в деградированном промышленном ПВХ можно заменить расчеты макромолекулы рассмотрением полиена подходящей длины.

Спектры КР *цис*-изомеров β -каротина и ликопина отличаются от спектров *транс*-изомеров этих молекул, что потенциально позволяет различать эти вещества по спектрам КР. Показано, что использование полиенов в качестве модельных объектов не подходит для описания спектров КР *цис*-изомеров каротиноидов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов.

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследования полиенов и поливинилхлорида выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90209. Исследования каротиноидов выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90172.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Elvira-Torales L.I., García-Alonso J., Periago-Castón M.J.* Nutritional Importance of Carotenoids and Their Effect on Liver Health: A Review // *Antioxidants*. 2019. V. 8. № 7. P. 229. <https://doi.org/10.3390/antiox8070229>
2. *Meléndez-Martínez A.J., Stinco C.M., Mapelli-Brahm P.* Skin Carotenoids in Public Health and Nutricosmetics: The Emerging Roles and Applications of the UV Radiation-Absorbing Colourless Carotenoids Phytoene and Phytofluene // *Nutrients*. 2019. V. 11. № 5. P. 1093. <https://doi.org/10.3390/nu11051093>
3. *von Doering W., Sotiriou-Leventis C., Roth W.R.* Thermal interconversions among 15-cis-, 13-cis-, and all-trans- β -carotene: kinetics, Arrhenius parameters, thermochemistry, and potential relevance to anticarcinogenicity of all-trans- β -carotene // *J. Amer. Chem. Soc.* 1995. V. 117. № 10. P. 2747–2757. <https://doi.org/10.1021/ja00115a010>
4. *Khoo H.-E. et al.* Carotenoids and Their Isomers: Color Pigments in Fruits and Vegetables // *Molecules*. 2011. V. 16. № 2. P. 1710–1738. <https://doi.org/10.3390/molecules16021710>
5. *Kuznetsov S.M. et al.* Raman spectroscopic detection of polyene-length distribution for high-sensitivity monitoring of photo- and thermal degradation of polyvinylchloride // *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* Elsevier B.V., 2021. V. 252. P. 119494. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.119494>
6. *Yousif E., Hasan A.* Photostabilization of poly(vinyl chloride) – Still on the run // *J. Taibah Univ. Sci. Taibah University*. 2015. V. 9. № 4. P. 421–448. <https://doi.org/10.1016/j.jtusci.2014.09.007>
7. *Kip B.J. et al.* Considerations for Raman Spectroscopic Determination of Polyene Length Distribution in Degraded Poly(vinyl chloride) // *Macromolecules*. 1992. V. 25. № 17. P. 4290–4296. <https://doi.org/10.1021/ma00043a008>
8. *Gilbert M. et al.* Assessment of PVC stabilisation using hydrotalcites – Raman spectroscopy and other techniques // *Polym. Degrad. Stab.* Moscow: Elsevier B.V., 2013. V. 98. № 8. P. 1537–1547. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2013.04.005>
9. *Hillemans J.P.H.M. et al.* An in situ Raman spectroscopic study of the degradation of PVC // *Polym. Degrad. Stab.* 1993. V. 42. № 3. P. 323–333. [https://doi.org/10.1016/0141-3910\(93\)90228-B](https://doi.org/10.1016/0141-3910(93)90228-B)
10. *Smith, Ewen.* Modern Raman spectroscopy: a practical approach / Ewen Smith, Geoff Dent. p. cm. Includes bibliographical references and index. ISBN 0-471-49668-5 (cloth : alk. paper) — ISBN 0-471-49794-0 (pbk. : alk. paper).
11. *Darvin M.E. et al.* Noninvasive selective detection of lycopen and β -carotene in human skin using Raman spectroscopy // *Laser Phys.* 2004. V. 14. № 2. P. 231–233.
12. *Ishigaki M. et al.* Unveiling the Aggregation of Lycopene in Vitro and in Vivo: UV–Vis, Resonance Raman, and Raman Imaging Studies // *J. Phys. Chem. B*. 2017. V. 121. № 34. P. 8046–8057. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b04814>
13. *Baruya A., Gerrard D.L., Maddams W.F.* Resonance Raman spectrum of degraded poly(vinyl chloride). 4. Determination of conjugated polyene sequence lengths // *Macromolecules*. 1983. V. 16. № 4. P. 578–580. <https://doi.org/10.1021/ma00238a018>
14. *Finkelshtein E.I., Shamsiev R.S.* Spectral and structural properties of carotenoids - DFT and thermochemical calculations // *J. Mol. Struct.* Elsevier B.V., 2019. V. 1197. P. 583–593. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.07.067>
15. *Darvin M.E. et al.* Optical methods for noninvasive determination of carotenoids in human and animal skin // *J. Biomed. Opt.* 2013. V. 18. № 6. P. 061230. <https://doi.org/10.1117/1.jbo.18.6.061230>
16. *Novikov V.S. et al.* DFT study of Raman spectra of polyenes and β -carotene: Dependence on length of polyene chain and isomer type // *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* Elsevier B.V., 2021. V. 255. P. 119668. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.119668>
17. *Laikov D.N., Ustynuk Y.A.* PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // *Russ. Chem. Bull.* 2005. V. 54. № 3. P. 820–826. <https://doi.org/10.1007/s11172-005-0329-x>
18. *Schaffer H.E. et al.* Conjugation length dependence of Raman scattering in a series of linear polyenes: Implications for polyacetylene // *J. Chem. Phys.* 1991. V. 94. № 6. P. 4161–4170. <https://doi.org/10.1063/1.460649>

**ANALYSIS OF NATURAL AND SYNTHETIC COMPOUNDS
CONTAINING POLYENE CHAINS USING RAMAN SPECTROSCOPY****V. S. Novikov^a, S. M. Kuznetsov^a, V. V. Kuzmin^a, K. A. Prokhorov^a, E. A. Sagitova^a,
M. E. Darvin^b, J. Lademann^b, L. Yu. Ustynyuk^c, and G. Yu. Nikolaeva^a**^a *Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*^b *Charité – Universitätsmedizin Berlin, Corporate Member of Freie Universität Berlin and Humboldt-Universität zu Berlin,
Department of Dermatology, Venerology and Allergology, Center of Experimental and Applied Cutaneous Physiology,
Berlin, Germany*^c *M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS I.A. Shcherbakov

The paper presents a theoretical analysis of the dependence of the Raman spectra of molecules containing polyene chains on the conjugation length, the structure of the side and end groups, and the type of isomer.

Keywords: Raman scattering, spectroscopy, density functional theory, polyenes, carotenoids, polyvinylchloride

УДК 534.014.2

О КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ДИССИПАТИВНЫХ СИСТЕМАХ С ДВУМЯ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

© 2021 г. А. Г. Петров^{1,*}

Представлено академиком РАН В.Ф. Журавлевым 07.04.2021 г.

Поступило 07.04.2021 г.

После доработки 16.08.2021 г.

Принято к публикации 23.08.2021 г.

Рассматриваются вынужденные линейные колебания диссипативных механических систем с двумя степенями свободы под действием периодических по времени сил. Уравнения в форме Лагранжа выражаются через три положительно определенные квадратичные формы: кинетическая энергия, диссипативная функция и потенциальная энергия. Показано, при условии равенства нулю определителя третьего порядка коэффициентов квадратичных форм все три квадратичные формы приводятся к сумме квадратов с некоторыми коэффициентами. В этом случае система уравнений четвертого порядка уравнения расщепляются на два независимых уравнения второго порядка для линейных осцилляторов, для которых решение системы находится в общем аналитическом виде. Эффективность метода демонстрируется на анализе вынужденных колебаний двойного маятника.

Ключевые слова: вынужденные линейные колебания, квадратичные формы, канонический вид, двойной маятник

DOI: 10.31857/S2686740021050072

ВВЕДЕНИЕ

Многие задачи интегрирования и качественного анализа дифференциальных уравнений значительно упрощаются после приведения исследуемых объектов к соответствующим нормальным формам. Необходимость в таком анализе возникает, например, для исследования малых колебаний механических систем [1, 2]. Консервативные механические системы характеризуются двумя квадратичными формами: кинетической и потенциальной энергией системы. Для них всегда существуют нормальные координаты, в которых обе квадратичные формы приводятся к сумме квадратов с некоторыми коэффициентами [3], а уравнения свободных и вынужденных колебаний расщепляются на независимые уравнения второго порядка (линейные осцилляторы). В диссипативных системах появляется третья квадратичная форма — функция Рэлея, определяющая линейные по скоростям обобщенные силы [1, 2].

Три квадратичные формы привести к сумме квадратов почти всегда невозможно, и поэтому система на независимые осцилляторы не расщеп-

ляется. Анализ таких систем сильно осложняется, даже в случае двух степеней свободы.

Наиболее общее условие приведения трех квадратичных форм с матрицами A , B и C к сумме квадратов получено Новиковым [4]:

$$BA^{-1}C = CA^{-1}B.$$

Для двух степеней свободы условие равносильно четырем равенствам нулю элементов соответствующей матрицы.

В данной работе вместо четырех условий получено одно простое необходимое и достаточное условие: равенство нулю определителя третьего порядка коэффициентов трех квадратичных форм. Вывод условия тоже упрощается и проводится, не опираясь на результат [4].

Дан пример применения полученного условия для анализа малых колебаний двойного маятника с учетом сил вязкого трения, линейных по скоростям [1, 2].

1. МАЛЫЕ КОЛЕБАНИЯ

Рассмотрим систему с двумя степенями свободы. Кинетическая T и потенциальная Π энергия, диссипативная функция Рэлея R и мощность внешних сил N имеют вид

¹ Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского
Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: petrovipmech@gmail.com

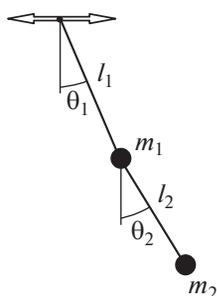


Рис. 1. Двойной маятник.

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2}(a_{11}\dot{x}_1^2 + 2a_{12}\dot{x}_1\dot{x}_2 + a_{22}\dot{x}_2^2), \\ R &= \frac{1}{2}(b_{11}\dot{x}_1^2 + 2b_{12}\dot{x}_1\dot{x}_2 + b_{22}\dot{x}_2^2), \\ \Pi &= \frac{1}{2}(c_{11}x_1^2 + 2c_{12}x_1x_2 + c_{22}x_2^2), \\ N &= (U_1\dot{x}_1 + U_2\dot{x}_2) \sin \omega t. \end{aligned} \quad (1)$$

Запишем уравнения движения механической системы, в которой Π , R и N определяют потенциальную, диссипативную и внешнюю силу, меняющуюся по гармоническому закону с амплитудами U_1, U_2 :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i} + \frac{\partial R}{\partial \dot{x}_i} + \frac{\partial \Pi}{\partial x_i} = \frac{\partial N}{\partial \dot{x}_i}, \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

В разделе 3 доказано, если определитель коэффициентов квадратичных форм равен нулю

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{22} \\ b_{11} & b_{12} & b_{22} \\ c_{11} & c_{12} & c_{22} \end{vmatrix} = 0, \quad (3)$$

то существует линейная замена

$$Y = QX, \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{pmatrix},$$

приводящая три квадратичные формы к сумме квадратов

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}(a'_{11}y_1^2 + a'_{22}y_2^2), \\ &\frac{1}{2}(b'_{11}y_1^2 + b'_{22}y_2^2), \\ &\frac{1}{2}(c'_{11}y_1^2 + c'_{22}y_2^2), \end{aligned}$$

а уравнения (2) расщепляются на два независимых уравнения второго порядка для простейших линейных осцилляторов

$$\begin{aligned} \frac{d^2 y}{dt^2} + A_i \frac{dy}{dt} + B_i y &= E_i \sin \omega t, \quad i = 1, 2, \\ E_1 &= U_1 q_{11} + U_2 q_{21}, \quad E_2 = U_1 q_{12} + U_2 q_{22}. \end{aligned} \quad (4)$$

Анализ такой системы значительно упрощается. Решение для установившихся колебаний имеет вид

$$\begin{aligned} y_i &= P_i \sin \omega t - Q_i \cos \omega t, \\ P_i &= \frac{E_i(B_i - \omega^2)}{(B_i - \omega^2)^2 + A_i^2 \omega^2}, \\ Q_i &= \frac{E_i A_i \omega}{(B_i - \omega^2)^2 + A_i^2 \omega^2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Амплитуды колебаний

$$a_i = \sqrt{P_i^2 + Q_i^2} = \frac{E_i}{\sqrt{(B_i - \omega^2)^2 + A_i^2 \omega^2}}, \quad i = 1, 2. \quad (6)$$

Для описания переходного процесса, из состояния покоя до установления необходимо решить уравнение (4) с начальными условиями $y(0) = 0, \dot{y}(0) = 0$. Решение имеет вид

$$\begin{aligned} y_i(t) &= P_i \sin \omega t - Q_i \cos \omega t + J_i(t), \quad \omega_i = \sqrt{B_i^2 - A_i^2}/4, \\ J_i(t) &= e^{-A_i t/2} \left(\left(\frac{Q_i - 2P_i \omega}{2\omega_i} \right) \sin(\omega_i t) + Q_i \cos(\omega_i t) \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Полезность полученных формул ниже демонстрируется на исследовании малых вынужденных колебаний двойного плоского маятника с учетом сил трения.

2. ДВОЙНОЙ ПЛОСКИЙ МАЯТНИК

Рассмотрим малые колебания около положения равновесия двойного плоского маятника, у которого точка подвеса движется по горизонтали по гармоническому закону $x = a \sin \omega t$ (рис. 1).

Стандартная методика [1, 2] сводит эту задачу к решению линейной системы четвертого порядка. Точное ее решение в силу большой громоздкости не выписывается и обычно ограничивается качественным приближенным анализом. Если же подчинить параметры системы единственному условию (3), то система расщепится на два простейших линейных осциллятора, точное решение которых дается весьма простыми формулами (5), (7).

Запишем уравнения маятника в форме Лагранжа (1), (2) относительно углов θ_1, θ_2 [5]. В кинетической T и потенциальной Π энергиях и диссипативной функции R учтем только квадратичные члены.

$$T = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)l_1^2\dot{\theta}_1^2 + \frac{m_2}{2}l_2^2\dot{\theta}_2^2 + m_2l_1l_2\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2,$$

$$R = \frac{1}{2}r_1\dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2}r_2(\dot{\theta}_2 - \dot{\theta}_1)^2,$$

$$\Pi = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)gl_1\theta_1^2 + \frac{1}{2}m_2gl_2\theta_2^2,$$

$$N = a\omega^2((m_1 + m_2)l_1\dot{\theta}_1 + m_2l_2\dot{\theta}_2)\sin\omega t,$$

где предполагается линейный по относительной угловой скорости закон вязкого трения в шарнирах с коэффициентами r_1, r_2 .

Из равенства нулю определителя коэффициентов квадратичных форм (3) вытекает: $\frac{r_2}{r_1} = \frac{m_2}{m_1}$, т.е. коэффициенты трения должны быть пропорциональны массам $r_1 = rm_1, r_2 = rm_2$. При этом условии все функции T, R, Π приведутся к сумме квадратов. Чтобы найти такое преобразование, сначала делается замена переменных $\theta_1 = \frac{\xi_1}{\sqrt{gl_1(m_1 + m_2)}}$,

$\theta_2 = \frac{\xi_2}{\sqrt{gl_2m_2}}$, приводящая квадратичные формы к виду

$$T = \frac{1}{2}(a'_{11}\dot{y}_1^2 + 2a'_{12}\dot{y}_1\dot{y}_2 + a'_{22}\dot{y}_2^2),$$

$$R = \frac{1}{2}(b'_{11}\dot{y}_1^2 + 2b'_{12}\dot{y}_1\dot{y}_2 + b'_{22}\dot{y}_2^2), \quad \Pi = \frac{1}{2}(y_1^2 + y_2^2),$$

$$a'_{11} = \frac{l_1}{g}, \quad a'_{22} = \frac{l_2}{g}, \quad a'_{12} = \sqrt{l_1l_2}\mu, \quad \mu = \frac{m_2}{m_1 + m_2},$$

$$b'_{11} = \frac{r}{(l_1l_2)a'_{22}}, \quad b'_{22} = \frac{r}{(l_1l_2)a'_{11}}, \quad b'_{12} = -\frac{r}{(l_1l_2)a'_{12}}.$$

Построим, следуя [3], ортогональное преобразование, приводящее первую матрицу к диагональному виду. Для этого надо найти собственное число λ_1 и единичный собственный вектор e_1, e_2 из решения системы

$$\begin{pmatrix} a'_{11} - \lambda_1 & a'_{12} \\ a'_{12} & a'_{22} - \lambda_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \end{pmatrix} = 0.$$

Второе собственное число λ_2 находится из аналогичного уравнения. Второй собственный вектор ортогонален первому. Они имеют вид

$$\lambda_1 = \frac{1}{2g}(l_1 + l_2 - (l_1 - l_2)\sqrt{1 + M}),$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2g}(l_1 + l_2 + (l_1 - l_2)\sqrt{1 + M}),$$

$$e_1 = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + M}}\right)},$$

$$e_2 = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + M}}\right)}, \quad M = \frac{4l_1l_2\mu}{(l_1 - l_2)^2}.$$

Преобразование $\xi_1 = e_1y_1 + e_2y_2, \xi_2 = -e_2y_1 + e_1y_2$ приводит первую и вторую матрицы к диагональному виду. Собственные значения матрицы R с точностью до множителя $r/(l_1l_2)$ совпадают с собственными значениями матрицы T , но меняются местами.

В преобразованных переменных функции T, R, Π и N примут вид

$$T = \frac{1}{2}(\lambda_1\dot{y}_1^2 + \lambda_2\dot{y}_2^2), \quad R = \frac{r}{2l_1l_2}(\lambda_2\dot{y}_1^2 + \lambda_1\dot{y}_2^2),$$

$$\Pi = \frac{1}{2}(y_1^2 + y_2^2),$$

$$N = \frac{a\omega^2}{\sqrt{g}}(\sqrt{m_2l_2}(-e_2y_1 + e_1y_2) + \sqrt{(m_1 + m_2)l_1}(e_1y_1 + e_2y_2)),$$

а система уравнений приведет к виду (4), в которой

$$A_1 = \frac{r\lambda_2}{l_1l_2\lambda_1}, \quad A_2 = \frac{r\lambda_1}{l_1l_2\lambda_2}, \quad B_1 = \frac{1}{\lambda_1}, \quad B_2 = \frac{1}{\lambda_2},$$

$$E_1 = \frac{a\omega^2}{\lambda_1\sqrt{g}}(-e_2\sqrt{l_2m_2} + e_1\sqrt{l_1(m_1 + m_2)}),$$

$$E_2 = \frac{a\omega^2}{\lambda_2\sqrt{g}}(e_1\sqrt{l_2m_2} + e_2\sqrt{l_1(m_1 + m_2)}).$$

Подставляя найденные коэффициенты $A_1, A_2, B_1, B_2, E_1, E_2$ в формулы (5), получим решение для установившихся колебаний маятника, а в формулы (7) – решение для переходного процесса. С помощью (6) находится амплитудная характеристика в переменных y_1, y_2 . В исходных переменных решение выражается через функции y_1, y_2 :

$$\theta_1 = \frac{e_1y_1 + e_2y_2}{\sqrt{gl_1(m_1 + m_2)}}, \quad \theta_2 = \frac{-e_2y_1 + e_1y_2}{\sqrt{gl_2m_2}}. \quad (8)$$

В частном случае $l_1 = l_2 = l$ формулы упрощаются:

$$\lambda_{1,2} = \frac{l}{g}(1 \mp \sqrt{\mu}), \quad x_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-y_1 \pm y_2),$$

$$A_1 = \frac{r}{l^2} \frac{1 + \sqrt{\mu}}{1 - \sqrt{\mu}}, \quad A_2 = \frac{r}{l^2} \frac{1 - \sqrt{\mu}}{1 + \sqrt{\mu}}, \quad (9)$$

$$B_1 = \frac{g}{l(1 - \sqrt{\mu})}, \quad B_2 = \frac{g}{l(1 + \sqrt{\mu})},$$

$$E_1 = E_2 = E_0\omega^2, \quad E_0 = a\sqrt{\frac{g}{2l}(m_1 + m_2)},$$

$$-e_1 = e_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Полное описание колебаний можно получить подстановкой найденных выражений A_i, B_i, E_i в формулы (5), (7).

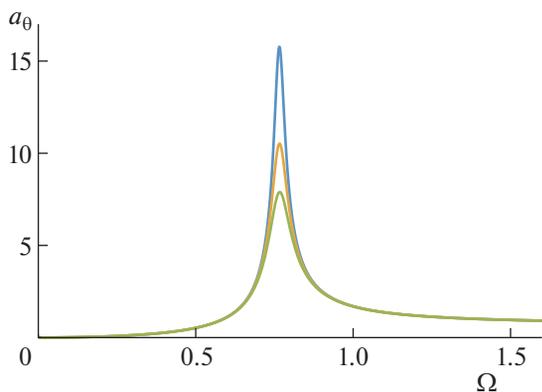


Рис. 2. Амплитудно-частотная характеристика.

Подстановкой (9) в формулу (6) находятся амплитуды нормальных переменных y_1 и y_2 и их наибольшие значения:

$$a_{yi} = \frac{E_0 \omega^2}{\sqrt{(B_i - \omega^2)^2 + A_i^2 \omega^2}},$$

$$\max(a_{yi}) = \frac{2E_0 B_i}{A_i \sqrt{4B_i - A_i^2}}, \quad i = 1, 2,$$

которые достигаются при $\omega = \frac{B_1}{\sqrt{B_1 - A_1^2}}$ и $\omega = \frac{B_2}{\sqrt{B_2 - A_2^2}}$.

С помощью (9) находится отношение максимальных амплитуд

$$\frac{\max(a_{y_2})}{\max(a_{y_1})} = \frac{(1 + \sqrt{\mu})^{3/2} \left(1 - \varepsilon^2 \frac{(1 + \sqrt{\mu})^2}{4(1 - \sqrt{\mu})} \right)^{1/2}}{(1 - \sqrt{\mu})^{3/2} \left(1 - \varepsilon^2 \frac{(1 - \sqrt{\mu})^2}{4(1 + \sqrt{\mu})} \right)^{1/2}},$$

$$\varepsilon = \frac{r}{\sqrt{gl^3}}.$$

В диапазоне параметров $\mu \in (1/2, 1)$, $\varepsilon \in (0, 1/2)$ значение $\max(a_{y_2})$ превосходит $\max(a_{y_1})$ более чем в 9 раз. Поэтому для амплитудных характеристик углов вместо формул (8) можно пользоваться упрощенными формулами

$$\theta_1 \approx \mu \theta_2, \quad \theta_2 \approx \frac{y_2}{\sqrt{2glm_2}}. \quad (10)$$

Наибольшие значения амплитуд углов θ_1 и θ_2 достигаются при частоте $\omega = \frac{B_2}{\sqrt{B_2 - A_2^2/2}}$. Используя (9) и (10), находим

$$\max(\theta_1) \approx \frac{\max(a_{y_2})}{\sqrt{2gl(m_1 + m_2)}} =$$

$$= \frac{a}{2l\varepsilon(1 - \sqrt{\mu})} \left(1 - \varepsilon^2 \frac{(1 - \sqrt{\mu})^2}{4(1 + \sqrt{\mu})} \right)^{-1/2}, \quad (11)$$

$$\max(\theta_2) \approx \frac{\max(\theta_1)}{\sqrt{\mu}}.$$

На рис. 2 изображены амплитудно-частотные характеристики для угла θ_2 при $\varepsilon = 0.2, 0.3$ и 0.4 и $m_1 = m_2$. По оси абсцисс откладывается безразмерная частота $\Omega = \frac{\omega}{\sqrt{g/l}}$, а по оси ординат – ам-

плитуда угла, отнесенная к величине $\frac{a}{l}$. При увеличении диссипационного параметра ε максимум амплитуды уменьшается по закону:

$$\max(\theta_1) \approx 2.23 \left(\frac{a}{l} \right) (\varepsilon^2 - 0.012\varepsilon^4)^{-1/2},$$

$$\max(\theta_2) \approx 1.44 \max(\theta_1).$$

Приведенные графики приближенных формул (10) неотличимы от графиков, построенных по точным формулам.

На параметры задачи следует наложить условие $\max(\theta_2) \ll 1$, чтобы линейная теория колебаний была применима.

3. ТЕОРЕМА ОБ УСЛОВИИ ПРИВЕДЕНИЯ ТРЕХ НЕВЫРОЖДЕННЫХ МАТРИЦ К ДИАГОНАЛЬНОЙ ФОРМЕ

Пусть даны три квадратичные формы двух переменных:

$$f_1 = \frac{1}{2}(a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^2),$$

$$f_2 = \frac{1}{2}(b_{11}x_1^2 + 2b_{12}x_1x_2 + b_{22}x_2^2),$$

$$f_3 = \frac{1}{2}(c_{11}x_1^2 + 2c_{12}x_1x_2 + c_{22}x_2^2).$$

Тогда для существования невырожденного преобразования, приводящего их к виду $\frac{1}{2}(a'_{11}y_1^2 + a'_{22}y_2^2)$,

$\frac{1}{2}(b'_{11}y_1^2 + b'_{22}y_2^2)$, $\frac{1}{2}(c'_{11}y_1^2 + c'_{22}y_2^2)$, необходимо и достаточно выполнения условия (3), т.е. чтобы определитель Δ , составленный из коэффициентов исходных квадратичных форм, обратился в ноль.

Доказательство. Квадратичные формы от двух переменных образуют векторное пространство размерности 3 из векторов $\mathbf{a}(a_{11}, a_{12}, a_{22})$, $\mathbf{b}(b_{11}, b_{12}, b_{22})$, $\mathbf{c}(c_{11}, c_{12}, c_{22})$. Если квадратичные формы f_1, f_2, f_3 одновременно приводятся к каноническому виду, то линейная оболочка этих форм

является подпространством размерности 2 или меньше, а следовательно, три формы линейно зависимы и определитель, составленный из координат векторов \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , равен нулю $\Delta = 0$. Это и есть условие теоремы. Наоборот, если $\Delta = 0$, то f_1 , f_2 , f_3 линейно зависимы, и при этом f_1 , f_2 линейно независимы, то f_3 линейно выражается через f_1 , f_2 , и тогда достаточно привести к каноническому виду две формы f_1, f_2 . Если же f_1 пропорциональна f_2 , то задача сводится к приведению двух форм f_2, f_3 , что и требовалось доказать.

Второе доказательство. Теорема непосредственно вытекает из критерия Новикова [4] и тождества для матриц размерности 2:

$$(AB^{-1}C - CB^{-1}A)\det(B) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ -\Delta & 0 \end{pmatrix}.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для вынужденных колебаний диссипативных механических систем с двумя степенями свободы

получено простое условие расщепления системы уравнений 4-го порядка на две независимые системы 2-го порядка для линейных осцилляторов. Эта система значительно проще исходной и позволяет получать простое аналитическое решение системы в общем виде.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена в рамках госзадания (номер госрегистрации АААА-А20-120011690138-6).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Журавлев В.Ф. Основы теоретической механики. М.: Наука, 2001.
2. Гантмахер Ф.Р. Лекции по аналитической механике. М.: Наука, 1966.
3. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1967.
4. Новиков М.А. // Известия вузов. Математика. 2014. № 12. С. 70–82.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1965.

ON VIBRATIONAL DISSIPATIVE SYSTEMS WITH TWO DEGREES OF FREEDOM

A. G. Petrov^a

^a *Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics, the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*
Presented by Academician of the RAS V. F. Zhuravlev

Forced linear oscillations of dissipative mechanical systems with two degrees of freedom under the action of time-periodic forces are considered. The Lagrange equations are expressed in terms of three positive-definite quadratic forms: kinetic energy, dissipative function, and potential energy. A simple necessary and sufficient condition for simultaneous reducibility to diagonal forms of symmetric matrices of three real quadratic forms of two variables is formulated and proved. The condition was reduced to the equality of the third-order determinant of the coefficients of quadratic forms to zero. In this case, by linear transformation, the quadratic forms are reduced to the sum of squares, and the equations are split into two independent second-order equations. The solution of the system is in a general analytical form. The effectiveness of the method is demonstrated by analyzing the forced oscillations of a double pendulum.

Keywords: forced linear oscillations, quadratic forms, canonical form, double pendulum

УДК 532.5

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ОБЛАСТЕЙ КОНТАКТА СРЕД В ТЕЧЕНИЯХ ИМПАКТА КАПЛИ С ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ

© 2021 г. Ю. Д. Чашечкин^{1,*}, А. Ю. Ильиных^{1,**}

Представлено академиком РАН Д.М. Климовым 06.07.2021 г.

Поступило 06.07.2021 г.

После доработки 06.07.2021 г.

Принято к публикации 28.07.2021 г.

Впервые проведена видеорегистрация процесса слияния капли раствора хлорного железа (концентрация 16 и 1%) с раствором роданида аммония (20%), включающего фазу формирования и реструктуризации системы наклонных петель на поверхности каверны, визуализированной продуктами химической реакции. Образующийся при слиянии жидкостей ярко окрашенный раствор роданида железа также попадает в капельки первичного контакта и группы последующих брызг. Волокна, содержащие роданид железа, образуют линейчатые и сетчатые структуры на стенках каверны и венца. На дне каверны под узлами сеток формируются выступы и мелкие кольцевые вихри на ножках. В фазе коллапса каверны выступы вытягиваются в наклонные петли длиной до 4.6 мм, вторгающиеся в принимающую жидкость. В ходе эволюции течения волокна перестраиваются с образованием новых структур. Тонко окрашенные области сохраняются длительное время и расплываются под действием процессов диффузии.

Ключевые слова: капля, импакт, распространение вещества, химические реакции, волокна, эксперимент

DOI: 10.31857/S2686740021050023

Интерес к изучению гидродинамических [1] и акустических [2] процессов при слиянии капли с жидкостью, сформированный первыми публикациями [3], возрос с развитием прикладных исследований [4] и поддерживается на высоком уровне фундаментальностью темы и ростом приложений. Видеотехника позволяет детально изучать тонкие компоненты течений – плоские струи, разлетающиеся из области первичного контакта жидкостей и с вершины венца [5, 6], шипы на их внешней кромке и группы брызг, циклически вылетающие с их вершин [7], углубляющуюся каверну [8], венец с капиллярными волнами [9], всплеск [10]. Визуализированы и капиллярные волны – кольцевые, охватывающие венец [11, 12], и более короткие, возникающие при появлении всплеска или стримера [13]. В динамике течений заметную роль играют нелинейные взаимодействия волн между собой [14] и с тонкими течениями – лигаменгами [15].

Развитие микро- и наномасштабных химических, био- и фармацевтических технологий сти-

мулирует изучение переноса вещества в капельных течениях [16] и формирования тонкой структуры в мелкой [12] и глубокой жидкости [17]. Волокна с веществом капли, образующие решетки и сетки на поверхности каверны, возникают в тонкой области конверсии доступной потенциальной поверхностной энергии (ДППЭ) на границе области контакта приповерхностных оболочек соприкасающихся жидкостей [18]. Постепенно выступы под узлами сетки трансформируются в вихорьки и далее в тонкие наклонные петли, проникающие в принимающую жидкость [19]. Петли увеличивают площадь поверхности контакта сред и активизируют процессы молекулярного выравнивания плотности смеси.

Описание смешения – одного из распространенных процессов в природных условиях и промышленных технологиях, до настоящего времени не завершено. На практике для выравнивания концентрации среды вращают весь аппарат или его подвижную часть (вертушку, мешалку), вводят струи и пузырьки. Также используется встряхивание [20] и капельное перемешивание. Структуры течений обычно визуализируются химически инертным методом подкраски капли [12, 17, 18]. Тонкие волокна (“пальцы”) также наблюдались на стенке каверны при контакте реагирующих веществ. Граница области слияния капли,

¹ Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского
Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: chakin@ipmnet.ru

**E-mail: ilynykh@ipmnet.ru

Таблица 1. Физические параметры жидкостей

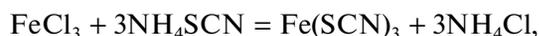
	Плотность ρ , г · см ⁻³	Норм. к.п.н. γ , см ³ с ⁻²	Кинетическая вязкость ν , см ² с ⁻¹
Роданид аммония 20%	1.043	50.8	0.009
Хлорное железо(III) 16%	1.139	65.1	0.015
Хлорное железо(III) 1%	1.006	70.2	0.01

Таблица 2. Отношения плотностей, коэффициентов поверхностного натяжения и вязкостей жидкостей капли и раствора роданида аммония

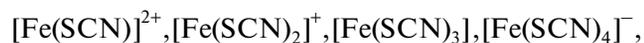
№	Капля	Принимающая жидкость	Отношения		
			плотностное, R_ρ	капиллярное, R_σ	вязкостное, R_μ
1	Вода	Роданид аммония (20%)	0.023	-0.14	-0.05
2	Хлорное железо(III) 16%		-0.044	-0.17	-0.25
3	Хлорное железо(III) 1%		0.018	-0.14	-0.05

содержащей индикатор (тимол голубой), окрашивалась в синий цвет при растекании в растворе гидроксида натрия (NaOH [21]) и в других реагирующих веществах [22]. Измерение скорости гелеобразования при растекании капли раствора альгината в растворе хлорида кальция и ее зависимости от условий опытов проведено в [23]. Дальнейшее изучение течений импакта капли с химическими реакциями необходимо для разделения влияния физических и химических процессов, совершенствования химических, био- и нефтехимических технологий.

В данной работе впервые прослежена эволюция тонкой структуры областей протекания химической реакции в течениях импакта капли. Использовались растворы роданида аммония NH₄SCN (прозрачного во всех концентрациях) и хлорного железа FeCl₃ (слабоокрашенного с желтоватым оттенком). В растворах соли диссоциируют, и при их контакте протекает комплекс химических реакций



с образованием находящихся в динамичном равновесии ярко окрашенных комплексов железа



позволяющих проследить эволюцию геометрии области реакции. Растворенный хлорид аммония постепенно распадается с образованием аммиака, который собирается в газовые пузырьки. Энергетика химических процессов в данных опытах не изучалась.

ФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ЗАДАЧИ

В набор физических величин, определяющих динамику и структуру капельных течений, входят параметры контактирующих сред (индексами

обозначены капля d , принимающая жидкость t , 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 $\gamma = \frac{\sigma_d^a}{\rho_d}$, $\gamma = \frac{\sigma_t^a}{\rho_t}$ [см³/с²] (для проведенных опытов значения приведены в табл. 1) и их отношения $R_\rho = \frac{\rho_t - \rho_d}{\rho_t + \rho_d}$ (число Агвуда), $R_\sigma = \frac{\sigma_t - \sigma_d}{\sigma_t + \sigma_d}$, $R_\mu = \frac{\mu_t - \mu_d}{\mu_t + \mu_d}$ (табл. 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 [13] сравниваются кинетическая энергия капли $E_d = \frac{MU^2}{2}$ и 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

$$W_E = \frac{E_k}{V_d}, W_\sigma = \frac{E_\sigma}{V_\sigma}.$$

В список безразмерных параметров, характеризующих капельные течения, в дополнение к числам Рейнольдса $Re = \frac{UD}{\nu}$; Фруда $Fr = \frac{U^2}{gD}$; Бонда

$Bo = \frac{gD^2}{\gamma}$; Онезорге $Oh = \frac{\nu}{\sqrt{\gamma D}}$; Вебера $We = \frac{U^2 D}{\gamma}$ (для данных опытов значения приведены в табл. 3),

Таблица 3. Безразмерные параметры процессов

Вещество капли	Re	We	Fr	Bo	Oh
Вода	13000	572	234	2.45	0.0018
Хлорное железо(III) 16%	7400	620	234	2.65	0.0033
Хлорное железо(III) 1%	12600	575	234	2.46	0.0019

Таблица 4. Энергетические параметры капли

	E_k , мкДж	E_σ , мкДж	E_R	$W_R \times 10^3$
Вода	186	3.9	48	1.7
Хлорное железо(III) 16%	212	4.1	52	1.84
Хлорное железо(III) 1%	188	3.91	47.93	1.71

входят отношения энергий $E_R = \frac{E_k}{E_\sigma}$ и их плотностей $W_R = \frac{E_k V_\sigma}{E_\sigma V_D}$ (табл. 4). Время передачи кинетической энергии капли принимающей жидкости составляет $\tau_E = \frac{D}{U} \sim 1$ мс, а поверхностной энергии в зоне первичного контакта – $\tau = \frac{\delta_c}{U} \sim 10$ нс.

В силу неравномерности распределения вещества капли по поверхности венца и каверны и полная энергия, и импульс также распределяются неравномерно и достигают наибольшей плотности в узлах сетки [18], которые и являются локальными областями роста вихревых выступов и тонких петель [19].

Большое число размерных параметров и безразмерных комплексов отражает многомасштабность группы протекающих процессов (подробнее временные и пространственные масштабы проанализированы в [17]).

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Опыты выполнены на стенде ТБП, входящем в состав комплекса “УНУ ГФК ИПМех РАН” [24]. Свободно падающие капли диаметром $D = 4.2$ мм (контактная скорость $U = 3.1$ м/с, выбран режим выраженного всплеска [2, 3, 10, 18]) сливались с раствором роданида аммония, налитого в квадратную кювету размером 10×10 см² (толщина слоя $h_f = 3$ см).

Область падения капли освещалась сверху светодиодными источниками Optronis MultiLED со световым потоком 7700 лм. Выбор положения осветителей определялся критерием максимальной контрастности тонких структур, регистрируемых видеокамерой Optronis CR3000x2 (частота съемки 5000 кадров/с, линия визирования располагалась горизонтально).

Перед началом опытов определялись параметры приготовленных растворов роданида аммония (20%) и хлорного железа (1, 4, 8, 16%). Коэффициенты поверхностного натяжения измерялись методом кольца тензиометром ТС-1 Lauda (Германия) [25], кинематической вязкости – капиллярным вискозиметром ВПЖ-3. Рабочие жидкости хранились в закрытых сосудах для уменьшения влияния оседающей на открытой поверхности лабораторной пыли. Условия съемки позволяли последовательно регистрировать падение капли, эволюцию венца, каверны и вторичных течений вплоть до полного затухания движений.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Систематическое изучение формирования и последующей эволюции наклонных петель ранее было проведено на примере погружения капли раствора чернил или железного купороса, плотность которых превышает плотность принимающей жидкости (воды, $R_p = -0.09$ [19]). Для проверки структурной устойчивости процесса образования петель в течениях импакта капли в данной работе изучено падение капли более легкой жидкости – чистой воды в раствор роданида аммония ($R_p = 0.023$). Выборки из видеogramмы картины течения приведены на рис. 1. Начальные кадры процесса слияния капли здесь не приводятся, поскольку, как показало сравнение данных, картина течения практически не отличается от изученной в [17–19].

В фазе оседания зубцы на кромке венца сглаживаются, по стенкам на дно каверны сбегает капиллярные волны (рис. 1а, $t = 20$ мс). Различие деталей геометрии внутренней стенки свидетельствует об отсутствии аксиальной симметрии в структуре трехмерных волновых полей. Справа над венцом видна выброшенная капелька диаметром $d_s = 0.7$ мм.

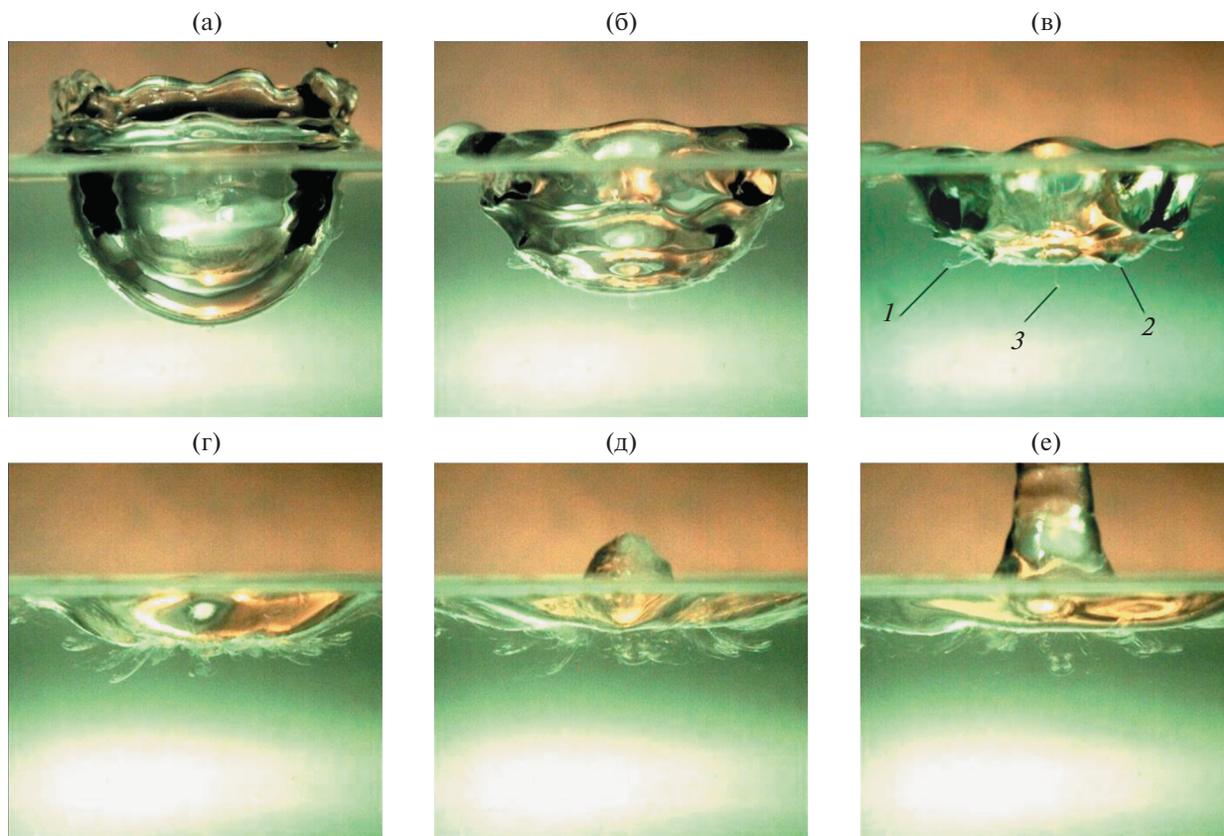


Рис. 1. Формирование и эволюция наклонных петли при слиянии капли воды с раствором роданида аммония, а–е: $t = 20, 36, 41, 47, 54, 65$ мс.

Усложнение структуры поля капиллярных волн с гладкими впадинами и острыми гребнями проявляется при $t = 36$ мс (рис. 1б), где выделяются два заостренных гребня на высоте $h_c = 3$ и 5.6 мм от дна каверны, аксиально промодулированных с переменным шагом $2 < \Delta l_\phi < 6$ мм. В окрестности первого гребня к поверхности жидкости примыкают зародыши волокнистых структур, плотно покрывающие правую и левую части каверны.

По мере развития коллапса впадины трехмерных капиллярных волн на стенке каверны растягиваются, а гребни сжимаются вплоть до образования заострений (рис. 1в, $t = 41$ мс). При этом все дно каверны покрывается короткими волокнами толщиной $0.1 < \Delta t_f < 0.2$ мм, длина и число которых растут по мере сжатия каверны.

Наиболее длинные петли наблюдаются в фазе роста всплеска, вершина которого покрыта тонкими впадинами с заостренными стенками (рис. 1д, $t = 54$ мс). Сходящееся течение частично втягивает сокращающиеся волокна в поверхностный слой к основанию растущего всплеска (рис. 1е, $t = 65$ мс). Факт образование петель при падении капли и большей [19], и меньшей (рис. 1) плотно-

сти, чем у принимающей жидкости, указывает на определяющее влияние конверсии ДППЭ, продукты трансформации которой [13] сохраняются вместе с продуктами химической реакции в узлах окрашенной сетки [19].

Размеры петель со временем меняются немонотонно. Длина петель второго яруса на интервале $10 < t < 30$ мс аппроксимируется линейной зависимостью $l(t) = 0.028t + 0.6$ ($[l] = \text{мм}$, $[t] = \text{мс}$, далее везде), при $30 < t < 54$ мс $l(t) = 10^{-8}t^5 + c$, где $c = 1.2$. Петли максимальной длины наблюдаются при $t = 54$ мс. Изменения длин петель с периодом $5 < \Delta t < 7$ мс на интервале $35 < t < 54$ мс связаны с прохождением гребней и впадин трехмерных капиллярных волн.

Угловое положение петель, представленное на рис. 2б, указывает на неоднородность течений на отдельных горизонтах. Струйки у основания каверны (третьего яруса 2 и донная 3) растут достаточно энергично $l(t) = 10^{-8}t^5 + c$ ($[l] = \text{мм}$, $[t] = \text{мс}$, $c = 0.5$ и 0 соответственно). При коллапсе каверны струйки первого и второго ярусов неравномерно поворачиваются с периодом $7 < \Delta t < 9$ мс в положение, близкое к вертикальному.

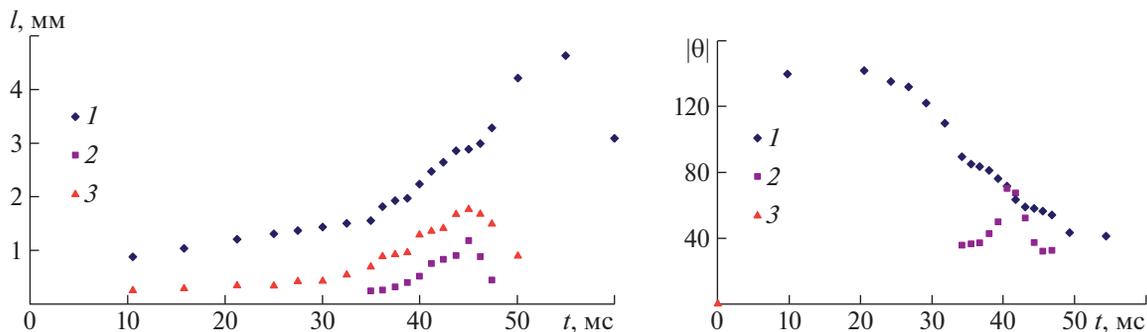


Рис. 2. Эволюция длины и углового положения петель: 1, 2 – второго и третьего ярусов (отсчет от свободной поверхности), 3 – центральной донной струйки.

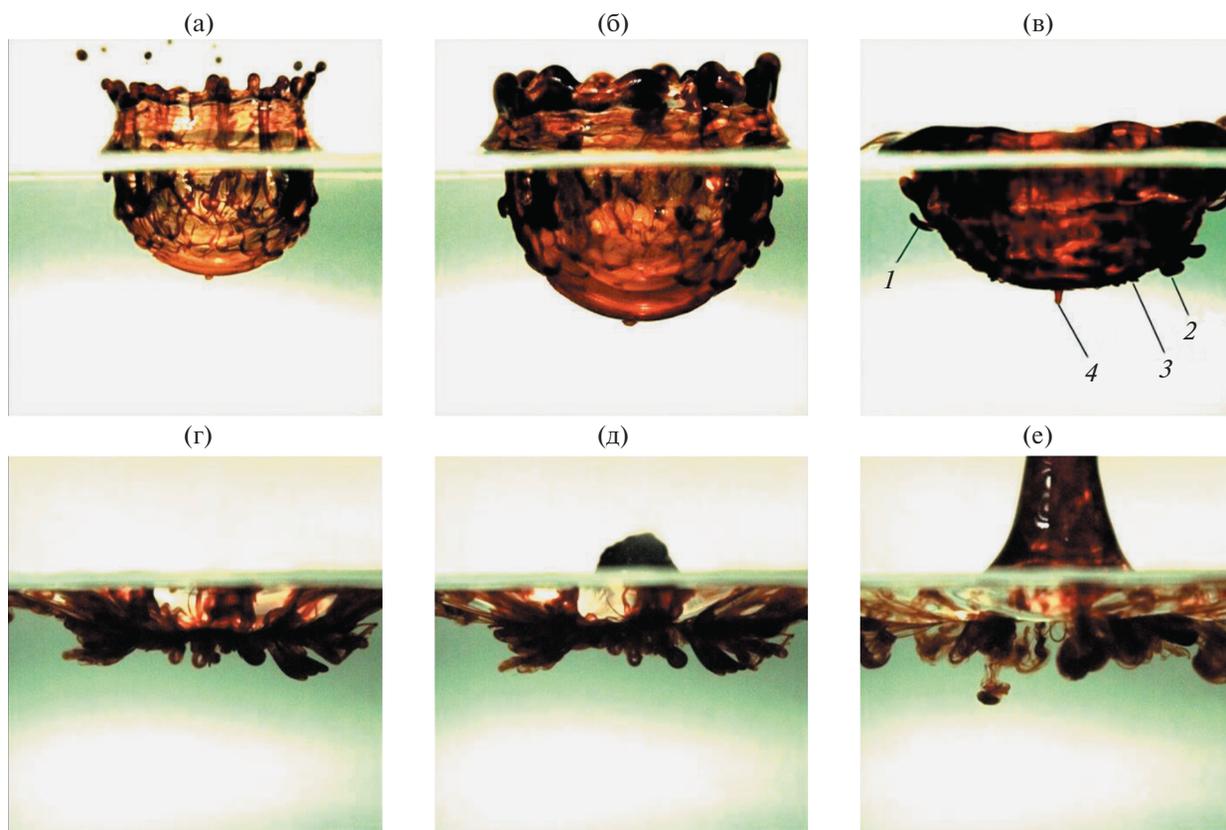


Рис. 3. Эволюция картины течения при слиянии капли 16% раствора хлорного железа с 20% раствором роданида аммония, а–е: $t=7.0, 18, 36, 48, 52, 80$ мс.

Эволюция картины течения с химическими реакциями при слиянии растворов с высокой концентрацией реагирующих веществ (хлорного железа 16%, роданида аммония 20%) показана на рис. 3. В фазе роста каверны все компоненты течения: венец, вылетающие капли, каверна и мелкие вихорьки у ее стенки ярко и неравномерно окрашены (рис. 3а, $t = 7$ мс).

На фоне диффузной окраски всей области реакции выделяются ярко окрашенные волокна и расположенные ярусами вихорьки (на расстоя-

нии $\Delta h = 2.5, 4.0, 5.4, 7.3, 8.5$ мм от дна каверны), связанные по вертикали тонкими волокнами, образующими ячейки с шагом $1.2 < \Delta l_c < 2.2$ мм. На правой стенке каверны видны четыре выступа – заправки растущих вихрей, на левой – также четыре (один примыкает к свободной поверхности). Центральный выступ на дне каверны – след первичного контакта капли с принимающей жидкостью – области с максимальным значением плотности преобразованной ДППЭ.

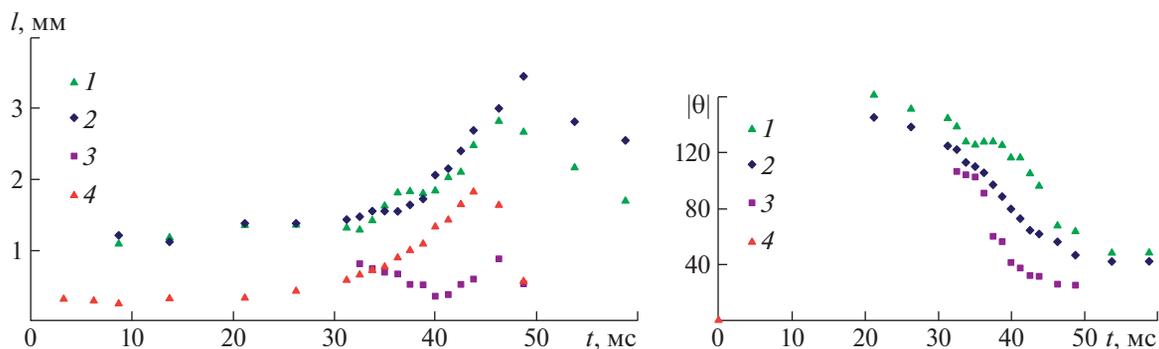


Рис. 4. Эволюция длины и углового положения петель: 1–3 – первого, второго и третьего ярусов, 4 – центральной донной струйки.

По мере увеличения толщины слоя прореагировавших веществ плотность окраски повышается (рис. 3б, $t = 18$ мс) с сохранением сетки с вертикальными и наклонными волокнами.

В фазе коллапса дно каверны покрывается семейством локальных выступов. Яркие волокна визуализируют аксиальные капиллярные волны на стенке венца. Неравномерная окраска венца указывает на сложную структуру распределения прореагировавшего вещества (рис. 3в, $t = 36$ мс).

В остатке каверны на рис. 3г ($t = 48$ мс) продукты реакции распределены крайне неравномерно и образуют плотные окрашенные участки шириной $1.3 < \Delta l_\phi < 3.6$ мм, разделенные просветами. Ко дну каверны примыкает система плотно окрашенных полос.

По мере эволюции течений меняется форма удлиняющихся петель, внутри появляются прозрачные участки (рис. 3д, $t = 52$ мс). Оголовок растущего всплеска покрыт мелкими ямками с острыми стенками. Прозрачное основание всплеск при $t = 52$ мс над поверхностью жидкости сменяется ярко окрашенным оголовком (рис. 3е, $t = 80$ мс).

Со временем равномерно окрашенные ленты под каверной распадаются на отдельные тонкие волокна, образующие вытянутые и круговые петли. Выступы на стенке каверны (при $t = 36$ мс) трансформируются в мелкие кольцевые вихри, движущиеся вглубь жидкости ($t = 80$ мс). Прореагировавшее вещество в вихрях также распределено в форме тонких окрашенных волокон.

Зависимости длин петель и их угловых положений от времени приведены на рис. 4. Максимальная длина достигается при $t = 44$ мс для донной петли и $t = 49$ мс для боковых. Изменение линейного размера со временем аппроксимируется зависимостью $l(t) = 10^{-8}t^5 + c$, $l = [\text{мм}]$, $t = [\text{мс}]$ ($c \sim 1$ для боковых и $c = 0.2$ для донной), на которую накладываются волнообразные вариации с периодичностью $5 < \Delta t < 7$ мс.

При уменьшении концентрации раствора хлорного железа в капле (1%) при сохранении в принимающей жидкости (20% раствор аммония) картина течения становится более контрастной. В ней представлены тонкие волокна, преимущественно вертикальные в венце, как и в [17, 18], а также пятна в узлах сетки. Именно участки с повышенной концентрацией прореагировавшего вещества трансформируются в выступы, затем в кольцевые вихорьки и, наконец, в наклонные петли. Один из вихорьков – капелька в центре каверны, второй – в центре на дне (рис. 5а, $t = 10$ мс). На левой стенке видны шесть растущих вихрей, на правой – семь. На дне правой стенки к каждому зарождающемуся вихорьку подходит яркое волокно.

Объем прореагировавших веществ и интенсивность окраски постепенно растут и в остатке венца, и на стенках каверны (шаг азимутальной структуры $1.0 < l_\phi < 1.8$ мм). Растущие зародыши вихревых систем на правой стенке становятся более контрастными. Выступ в центре дна каверны развивается в кольцевой вихрь с выраженной шляпкой и ободком (рис. 5б, $t = 27$ мс).

При коллапсе продукты реакции плотно покрывают дно каверны. В окраске выражены три яруса. Спиральные структуры указывают на вихревую природу выступов, которые на отдельных участках отделились от ее стенок и стали дрейфовать в виде колец (рис. 5в, $t = 35$ мс). Петли, расположение которых становится более упорядоченным, постепенно растягиваются и поворачиваются течением. Наибольшую длину имеет центральная струйка – след первичного контакта падающей капли с принимающей жидкостью (рис. 5г, $t = 41$ мс).

В фазе роста всплеска (рис. 5д, $t = 52$ мс) выражены все компоненты течения: остаток каверны, петли окрашенной жидкости, неровная вершина всплеска. Распределение окраски в петлях в толще жидкости разбивается на две группы: сплошную диффузную и разделенную волокнистую.

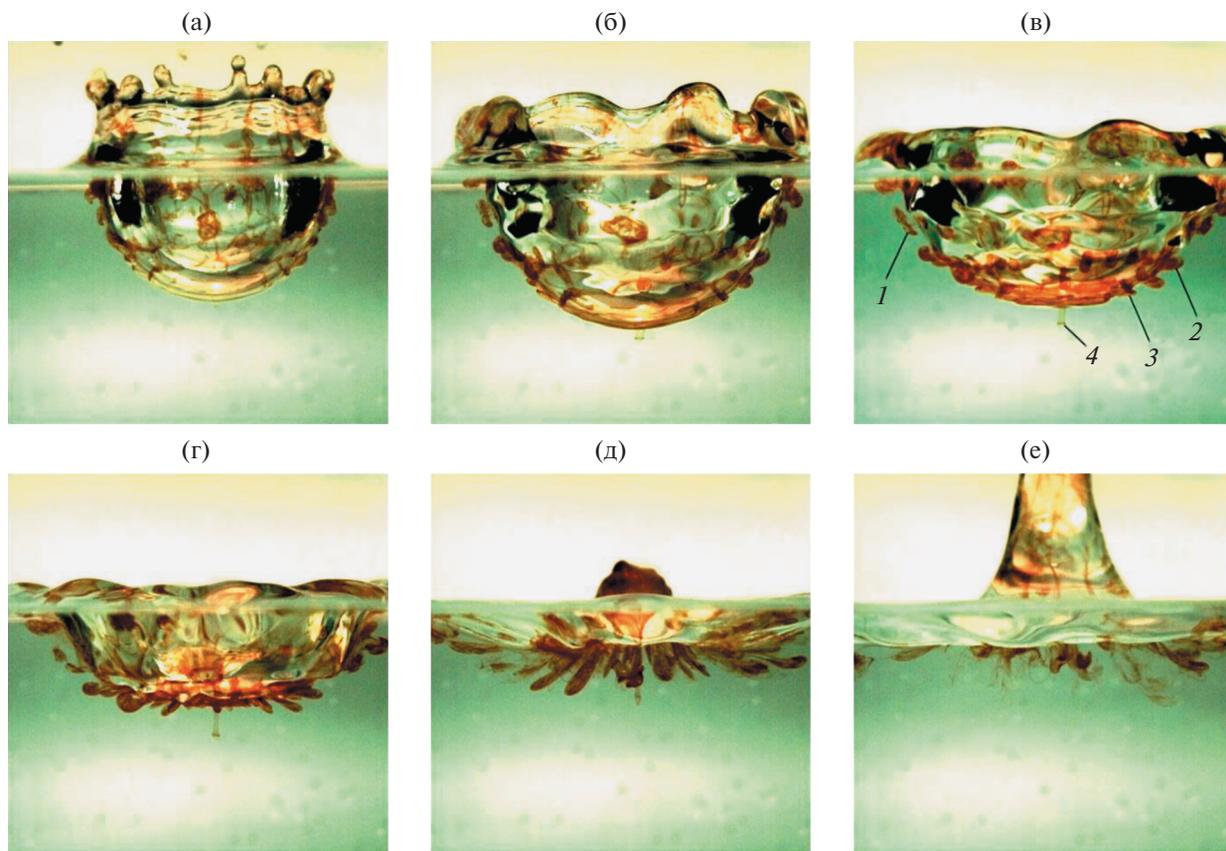


Рис. 5. Эволюция картины течения при слиянии капли 1% раствора хлорного железа с 20% раствором роданида аммония, а–е: $t = 10, 27, 35, 41, 52, 79$ мс.

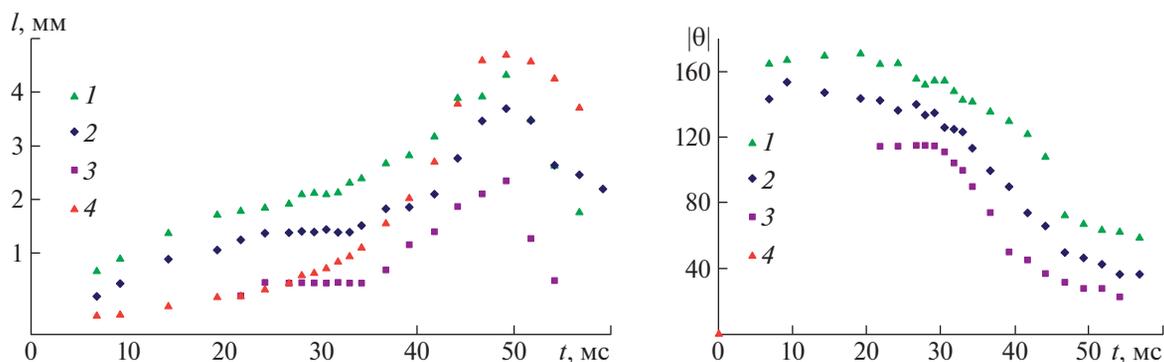


Рис. 6. Эволюция длины и углового положения петель: 1–3 – первого, второго и третьего ярусов, 4 – центральной донной струйки.

Продукты реакции распределены в волокнистых структурах в толще жидкости и в растущем всплеске, где представлены как вертикально ориентированные волокна, так и горизонтальные кольца, напоминающие картину капиллярных волн (рис. 5е, $t = 79$ мс).

При сохранении качественных особенностей эволюции структуры геометрия областей окра-

шенной жидкости при относительно низкой концентрации хлорного железа на рис. 6 отличается от приведенной на рис. 2 и 4 (за исключением донной струйки, геометрические параметры которой сохраняются $l(t) = at^5 + c$, $a = 15 \times 10^{-9}$, $c = 0.4$).

Здесь на начальном этапе рост боковых вихорьков описывается зависимостью $l_j \sim a\sqrt{t}$ ($a_1 =$

$= 0.3$, $a_2 = 0.28$), которая при $t > 27$ мс переходит в универсальную $l(t) \sim at^5 + b$ (при $a = 10^{-8}$, $b \sim 1$). Вихревые петли достигают максимальной длины при $t = 49$ мс. Длительное время угловое положение петель меняется незначительно ($t < 30$ мс), затем происходит резкий свал и далее при $t > 47$ мс их положение стабилизируется.

Сравнение графиков на рис. 2, 4, 6 показывает, что длина волокнистых петель практически не зависит от концентрации хлорного железа и достигает максимума при погружении капли воды в роданид аммония.

Максимальные наблюдаемые размеры всех петель наблюдаются при $t \approx 50$ мс, что соответствует времени появления вершины кумулятивной струи над свободной поверхностью принимающей жидкости и началом этапа ее быстрого роста, сопровождающегося конвергенцией жидкости с затягиванием вихревых петель в приповерхностный слой и всплеск.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-19-00598). Эксперименты проведены на стендах УИУ “ГФК ИПМех РАН”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chashechkin Yu.D., Plynykh A.Yu. Total coalescence, rebound and fast partial bounce: three kinds of interaction of free fallen drop with a target fluid // *FDMP*. 2020. V. 16. № 4. P. 801–811.
2. Prosperetti A., Oguz H.N. The impact of drops on liquid surfaces and the underwater noise of rain // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1993. V. 25. P. 577–602.
3. Worthington A.M. A Study of splashes. Longmans, Green, London, 1908. 129 p.
4. Ribeiro D.F.S., André R. R. Silva F.R.R., Panão M.R.O. Insights into Single Droplet Impact Models upon Liquid Films Using Alternative Fuels for Aero-Engines (Review) // *Appl. Sci.* 2020. V. 10. 6698.
5. Zhang L. V., Toole J., Fezzaa K., Deegan R.D. Evolution of the ejecta sheet from the impact of a drop with a deep pool // *J. Fluid Mech.* 2012. V. 690. P. 5–15.
6. Agbaglah G., Thoraval M., Thoroddsen S., Zhang L., Fezzaa K., Deegan R. Drop impact into a deep pool: vortex shedding and jet formation // *J. Fluid Mech.* 2015. V. 764. P. R1–12.
7. Чашечкин Ю.Д., Ильиных А.Ю. Множественные выбросы брызг при ударе капли // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2020. Т. 494. С. 42–46.
8. Engel O.G. Crater depth in fluid impacts // *J. Appl. Phys.* 1966. V. 37. P. 1798–1808.
9. Чашечкин Ю.Д., Прохоров В.Е. Гидродинамика удара капли: короткие волны на поверхности венца // ДАН. 2013. Т. 451. № 1. С. 41–45.
10. Castillo-Orozco E., Davanlou A., Choudhury P.K., Kumar R. Droplet impact on deep liquid pools: Rayleigh jet to formation of secondary droplets // *Phys. Rev.* 2015. E92, 053022.
11. Zhu G.-Z. Li Z.-H., Fu D.-Y. Experiments on ring wave packet generated by water drop // *Chinese Science Bulletin.* 2008. V. 53. № 11. P. 1634–1638.
12. 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.
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.
14. Руденко О.В. Разрушение сингулярности профиля сильно нелинейной волны в диссипативной среде // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2020. Т. 492. № 1. С. 63–67.
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.
16. Berberović E., van Hinsberg N. P., Jakirlić S., Roisman I. V., Tropea C. Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution // *Phys. Rev.* 2009. E79. 036306.
17. Чашечкин Ю.Д., Ильиных А.Ю. Полосчатые структуры в картине распределения вещества капли по поверхности принимающей жидкости // ДАН. 2018. Т. 481. № 2. С. 145–150.
18. 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.
19. Чашечкин Ю.Д., Ильиных А.Ю. Формирование системы наклонных петель в течениях импакта капли // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2021. Т. 499. С. 48–57.
20. Villiermaux E. Mixing Versus Stirring // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2019. V. 51. P. 245–273.
21. Tsuji K., Müller S.C. Chemical Reaction Evolving on a Droplet // *The Journal of Physical Chemistry Letters.* 2012. V. 3. P. 977–980.
22. Müller S.C. Observation of chemical reactions induced by impact of a droplet // *The micro-world observed by ultra high-speed cameras.* Springer, Cham. 2018. P. 343–354.
23. Haldar K., Chakraborty S. Investigation of chemical reaction during sodium alginate drop impact on calcium chloride film // *Phys. Fluids.* 2019. V. 31. 072102.
24. 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/uniquequip/gfk/#equip>.
25. Lauda <https://www.lauda-scientific.de/en/products/tensiometers>

VISUALIZATION OF THE MEDIA CONTACT DOMAINS AT THE DROP IMPACT FLOW WITH CHEMICAL REACTIONS

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 in the flow pattern of a drop impact with chemical reactions has been traced by the methods of high-resolution photo and video recording for the first time. Observations of the flow pattern when a drop of a solution of ferric chloride (concentrations 16 and 1%) merges with a solution of ammonium thiocyanate (20%) allow to trace the geometry of the regions of the reacted substance, visualized by a brightly colored solution of iron thiocyanate. In the flow pattern, including the splashes of the primary contact, cavity, crown, the geometry of the location of the reaction products on the walls of the cavity, crown, and in inclined loops up to 4.6 mm long, invading into the target fluid, is traced. The loops stretch out from small ledges, above which are the nodes of the nets formed by the fibers containing the products of the chemical reaction. The fibrous structures of the flow pattern develop, stay for a long time, and spread out under the influence of diffusion.

Keywords: colored drop, substance distribution, fibers, experiment

УДК 539.3

О ВЛИЯНИИ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ НА ТЕРМОАКУСТИКУ МАТЕРИАЛОВ

© 2021 г. Академик РАН Н. Ф. Морозов^{1,2,*}, Д. А. Индейцев^{1,2,5,**}, К. Л. Муратиков^{3,***},
Б. Н. Семёнов^{1,2,****}, Д. С. Вавилов^{1,4,*****}, А. А. Кудрявцев^{5,*****}

Поступило 21.07.2021 г.

После доработки 27.08.2021 г.

Принято к публикации 31.08.2021 г.

Показано, что присутствие дефектов в материале при определенной длительности теплового воздействия приводит к необходимости учета зависимости коэффициента линейного теплового расширения от их подвижности, которая определяет его операторный вид. На примере динамической задачи термоупругости, где в качестве дефекта выступает инерционное включение, показано изменение термоакустического сигнала, вызванного его наличием. Построена передаточная функция данного оператора, поведение которой согласуется с результатами эксперимента.

Ключевые слова: дефекты, динамическая термоупругость, коэффициент линейного теплового расширения

DOI: 10.31857/S2686740021050059

Как известно [1, 2], релаксационный процесс характеризует стремление любой физической системы к равновесию. Такое стремление происходит далеко не с одинаковой скоростью для всех внутренних степеней свободы, описывающих динамику физической системы, и представляет собой многоступенчатый процесс множеством времен релаксаций, каждое из которых описывает его на различных масштабных уровнях. Для задач классической механики сплошной среды, в силу рассмотрения только коллективного движения частиц в элементарном объеме сплошной среды, процессы релаксации удовлетворяют известным уравнениям Эйлера и отличаются толь-

ко в силу использования разных уравнений состояния сплошной среды.

Другая ситуация возникает, когда описание материала требует учета влияния на коллективное движение частиц новых степеней свободы, к примеру, их относительного движения или появления примесных частиц, дефектов. В этом случае обычно используется модель взаимопроникающих континуумов [3] или функционал свободной энергии с параметром концентрации примеси [4], которые позволяют получать новые уравнения состояния с эффективными параметрами, меняющимися согласно кинетическим и диффузионным уравнениям. В этом случае при динамическом воздействии на такую систему общий релаксационный процесс имеет два спектральных отклика. Первый из них определяется характерными временами динамического процесса, связанного с распространением волн в занимаемых областях сплошной среды. Кроме этого, на коллективную динамику частиц физической системы накладывается процесс, порождаемый движением дополнительных степеней свободы, которые обычно определяются диффузионными уравнениями с параметрами, зависящими от микроструктуры.

Таким образом, возникает самостоятельная проблема выделения из общего сигнала информации о содержании в материале дефектов различной природы, в частности включений и вакансий. Чтобы учесть их влияние, предлагается использовать двухкомпонентную модель матери-

¹ Институт проблем машиноведения

Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

³ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Военно-космическая академия им. А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия

⁵ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: n.morozov@spbu.ru

**E-mail: dmitry.indeitsev@gmail.com

***E-mail: klm.holo@gmail.com

****E-mail: b.semenov@spbu.ru

*****E-mail: londr@yandex.ru

*****E-mail: kudryavtsev_aa@spbstu.ru

ала [5], согласно которой его плотность равна суммарной плотности каждой из компонент. Тогда принимается, что связь между шаровой частью тензора напряжений σ и изменением плотности материала $\Delta\rho$ имеет вид

$$\sigma = -3K \left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0} + \frac{\Omega\Delta\rho_f}{\rho_0} \right), \quad (1)$$

где $\Delta\rho_f$ – изменение плотности дефектов, ρ_0 – исходная плотность материала в недеформированном состоянии, K – модуль объемного расширения. Параметр Ω принимает значение 1 для включений и -1 в случае вакансий. При справедливости закона Фика плотность дефектов удовлетворяет диффузионному уравнению с источником членом $F(\rho_f, T)$, зависящим от температуры T и определяющим скорость производства дефектов [4]. Если считать, что вся область с дефектами охвачена диффузионным процессом, то раскладывая функцию F в ряд Тейлора около равновесного состояния $F(\rho_{f0} + \Delta\rho_f, T_0 + \vartheta) \approx F(\rho_{f0}, T_0) + \frac{A}{\tau_F} \Delta\rho_f + B\vartheta$ и вво-

дя характерное время $\tau_f = \frac{l^2}{D}$, можно рассматривать релаксационную модель, описываемую линейным уравнением

$$\Delta\dot{\rho}_f + \frac{1}{\tau_r} \Delta\rho_f = B\dot{\vartheta} - \rho_{f0}\dot{\epsilon}. \quad (2)$$

Здесь введены следующие обозначения: ρ_{f0} – исходная плотность дефектов, T_0 – равновесная температура, l – размер области, D – коэффициент диффузии, $\tau_r = \frac{\tau_f \tau_F}{\tau_F - A\tau_f}$ – эффективное время релаксации, τ_F – время образования дефекта. Константы A и B определяются физическим законом, управляющим источниковым членом, в качестве которого, к примеру, может быть взято соотношение Аррениуса [6]. В отсутствие собственной кинематики и источникового члена влияние дефектов сводится к изменению модуля объемного расширения, новое значение которого определяется выражением $K_{ef} = K \left(1 + \Omega \frac{\rho_{f0}}{\rho_0} \right)$. После интегрирования уравнения (2) и подстановки полученного результата в уравнение (1), при выполнении условий $\frac{\rho_{f0}}{\rho_0} \ll 1$ и $e^{-\frac{l}{l_r}} \ll 1$, оно приобретает вид, соответствующий модели упруго-вязкого материала Кельвина–Фойгтса дополнительным слагаемым, определяющим операторную зависимость от времени коэффициента линейного теплового расширения. При использовании преобразования Лапла-

са $f^L = \int_0^\infty f(t)e^{-pt} dt$ закон деформирования твердого тела может быть представлен в форме аналогичной закону Дюамеля–Неймана

$$\sigma^L = 3K(p)(\epsilon^L - 3\alpha(p)\vartheta^L), \quad (3)$$

однако модули $K(p)$ и $\alpha(p)$ не являются константами, а имеют динамический характер. При этом наиболее существенное влияние на термоакустический сигнал оказывает зависимость $\alpha(p)$ [7].

В качестве примера рассматривается модельная одномерная задача, где дефект в виде сосредоточенной массы расположен на торце полубесконечного стержня с модулем Юнга E и плотностью ρ . Будем полагать, что для него выполняются закон Фурье и соотношение Дюамеля–Неймана. Тогда динамические уравнения термоупругости [8] имеют вид

$$k \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} - \frac{\partial \vartheta}{\partial t} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \alpha \frac{\partial \vartheta}{\partial x}. \quad (5)$$

Здесь введены следующие обозначения: u – смещение материальной точки, k – коэффициент температуропроводности, $c_0 = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$ – скорость

звука, α – коэффициент линейного теплового расширения. Описание динамики дефекта в виде сосредоточенного включения массой m требует введения дополнительной степени свободы $q_f(t)$, отвечающей его перемещению и удовлетворяющей уравнению $m\ddot{q}_f = F$, где через F обозначены силы, действующие на него со стороны стержня. Вид данной силы зависит от условий сопряжения. Здесь рассматривается простейший случай абсолютно жесткого контакта, когда перемещение дефекта на торце совпадает с перемещением стержня. Напряжения, возникающие в данной точке, уравновешиваются действием сил инерции от сосредоточенной массы. Действие теплового источника на границе задается в виде потока тепла, определяемого функцией $W(t)$. В этом случае граничные условия для системы уравнений (4)–(5) принимают вид

$$k \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \Big|_{x=0} = -W(t), \quad \vartheta \Big|_{x \rightarrow \infty} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\chi h}{c_0^2} \ddot{u} + \alpha \dot{\vartheta}, \quad u \Big|_{x \rightarrow \infty} = 0, \quad (7)$$

где h – это линейный размер дефекта, а через $\chi = \frac{\rho_f}{\rho}$ обозначено отношение плотности дефекта

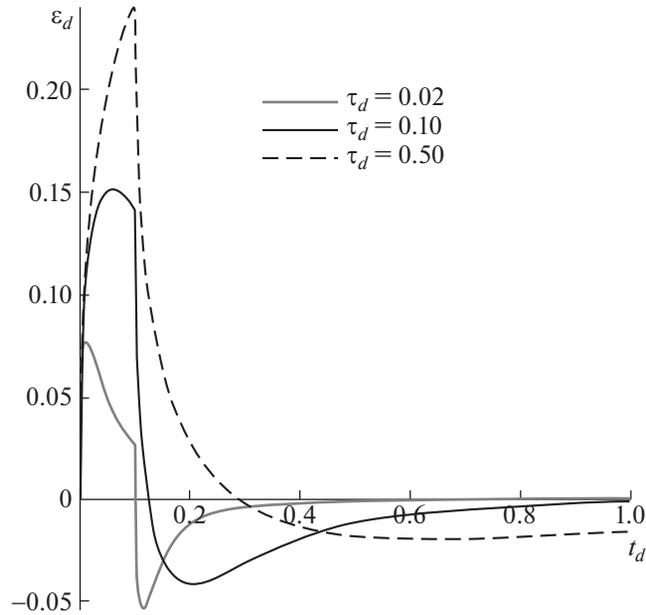


Рис. 1. Зависимость деформации от времени.

к плотности материала. Перейдя к безразмерным переменным $x_d = \frac{c_0 x}{k}$, $t_d = \frac{c_0^2 t}{k}$ и решив систему (4)–(7) с помощью преобразования Лапласа, нетрудно найти аналитическое представление для температуры ϑ и деформации $\varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}$ в изображениях

$$\vartheta^L = \frac{W^L}{c_0 \vartheta_0 \sqrt{p}} e^{-\sqrt{p} x_d}, \quad (8)$$

$$\varepsilon^L = \frac{\alpha W^L \sqrt{p}}{c_0 (p-1)} \left(\frac{(\tau_d \sqrt{p} + 1) e^{-\sqrt{p} x_d}}{\tau_d p + 1} - \frac{e^{-\sqrt{p} x_d}}{p} \right), \quad (9)$$

где $\tau_d = \frac{c_0 \chi h}{k}$ – безразмерное время релаксации, представляющее собой отношение произведения плотности дефекта на его линейный размер к акустическому сопротивлению среды. Данный параметр характеризует как свойства дефекта, так и самой среды, от которых зависит релаксационный процесс возвращения системы к исходному состоянию. При $\tau_d = 0$ выражение (9) переходит в хорошо известное решение, приведенное во многих работах [9, 10], которое мы обозначим через ε_c^L .

Используя его, выражение (9) можно представить в виде суммы $\varepsilon^L = \varepsilon_c^L + \varepsilon_D^L$, где второе слагаемое

$$\varepsilon_D^L = -\frac{\tau_d \alpha W^L e^{-\sqrt{p} x_d}}{c_0 (\sqrt{p} + 1) (\tau_d p + 1)}, \quad (10)$$

связанное с наличием инерционного включения, представляет собой акустическую волну, имеющую в районе фронта противоположный знак по отношению к классическому решению. Когда тепловой поток на границе $W(t)$ имеет форму прямоугольного импульса высотой W_0 и длительностью t_0 , т.е. $W(t) = W_0 (H(t) - H(t - t_0))$, где $H(t)$ – функция Хевисайда, то зависимость нормированной де-

формации $\varepsilon_d = \frac{\varepsilon_D c_0}{\alpha W_0}$ от времени, которая при числовых значениях параметров, близких к характеристикам алюминия ($c_0 = 6 \times 10^3$ м/с, $k = 1 \times 10^{-4}$ м²/с) и $t_{0d} = \frac{c_0^2 t_0}{k} = 0.1$ соответствует пикосекундному воздействию, для $x_d = 0$ приведена на рис. 1.

Из представленного результата следует, что наибольшее влияние на амплитуду акустического сигнала имеет место, когда длительность импульса много меньше или сопоставима с временем релаксации τ_d .

На границе области, где размещено инерционное включение, решение (9) с учетом выражения (8) можно записать в форме

$$\varepsilon^L \Big|_{x_d=0} = (\alpha - \alpha_D(p)) \vartheta^L, \quad (11)$$

аналогичной закону Дюамеля–Неймана при свободном расширении тела. Динамическая составляющая коэффициента линейного теплового рас-

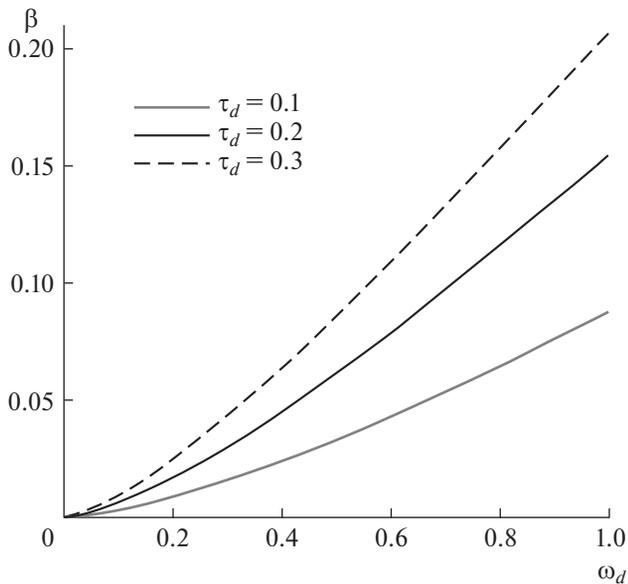


Рис. 2. Спектральная характеристика.

ширения $\alpha_D(p)$, зависящая от времени релаксации, определяется передаточной функцией

$$\beta(p) = \frac{\alpha_D(p)}{\alpha} = \frac{\tau_d p^{\frac{3}{2}}}{(\sqrt{p} + 1)(\tau_d p + 1)}. \quad (12)$$

Зависимость эффективного коэффициента линейного теплового расширения от частоты на основе релаксационного уравнения (2) была введена в работе [11] с целью описания влияния точечных дефектов в алюминиевых мембранах на термоакустический сигнал при лазерном воздействии с частотой модуляции в несколько кГц. На рис. 2 приведена спектральная характеристика данной функции для пикосекундного воздействия, где ω_d – безразмерная частота.

Из рис. 2 видно, что инерционное включение изменяет высокочастотную составляющую акустического сигнала, тогда как низкочастотная часть будет определяться эволюционным уравнением дефектной структуры.

Таким образом, наличие дефектов, занимающих поверхностную область в материале, может оказывать существенное влияние на спектральную характеристику коэффициента линейного теплового расширения, особенно при нестационарном воздействии. Показано, что при определенной длительности теплового воздействия оно приводит к уменьшению амплитуды волны деформаций, что важно с точки зрения как диагностики дефектной структуры, так и оценки напряженного состояния. В данной работе рассмотрен случай, когда она представляет собой сосредоточенное включение, характеризующееся линей-

ным размером и расположенное на границе полубесконечной области, а время релаксации определяется временем пробега акустической волны по его длине. В общем случае, когда дефекты занимают поверхностный слой, определение данного параметра требует решения контактной задачи на границе между поверхностным слоем и чистым материалом.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследования выполнены при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках реализации программы Научного центра мирового уровня по направлению “Передовые цифровые технологии” СПбПУ (соглашение от 17.11.2020 № 075-15-2020-934).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ковалевский М.Ю., Мацкевич В.Т., Чернышов Н.Н. К теории релаксационных процессов в твердом теле // Вопросы атомной науки и техники. 2006. № 4. С. 76–78.
2. Кирсанов Ю.А., Кирсанов А.Ю., Юдахин А.Е. Измерение времени тепловой релаксации и демпфирования температуры в твердом теле // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55. № 1. С. 122–128.
3. Куропатенко В.Ф. Модель многокомпонентной среды // ДАН. 2005. Т. 403. № 6. С. 761–763.
4. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1975. С. 415.
5. Индейцев Д.А., Наумов В.Н., Семёнов Б.Н. Динамические эффекты в материалах со сложной структурой // Вестн. Самарского гос. ун-та. 2007. № 4. С. 140–168.
6. Штиллер В. Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика. М.: Мир, 2000. С. 176.
7. Глазов А.Л., Морозов Н.Ф., Муратиков К.Л. Теоретическое и экспериментальное исследование лазерного фотоакустического эффекта вблизи отверстия в металлических пластинах с внутренними напряжениями // Физическая мезомеханика. 2019. Т. 22. № 2. С. 49–58.
8. Даниловская В.И. Об одной динамической задаче термоупругости // ПММ. 1952. Т. 16. № 3. С. 342–344.
9. Коваленко А.Д. Термоупругость. Киев: Вища школа. 1975. 216 с.
10. Новацкий В. Динамические задачи термоупругости. М.: Мир, 1970. 254 с.
11. Glazov A.L., Muratikov K.L. Generalized thermoelastic effect in real metals and its application for describing photoacoustic experiments with Al membranes // J. Appl. Phys. 2020. Т. 128. № 9. С. 095106.

ON THE INFLUENCE OF RELAXATION PROCESSES ON THERMOACOUSTICS OF MATERIALS

Academician of the RAS **N. F. Morozov^{a,b}**, **D. A. Indeitsev^{a,b,e}**, **K. L. Muratkov^c**,
B. N. Semenov^{a,b}, **D. S. Vavilov^{a,d}**, and **A. A. Kudryavtsev^e**

^a *Institute for Problems in Mechanical Engineering of the Russian Academy of Sciences, Saint-Petersburg, Russian Federation*

^b *Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, Russian Federation*

^c *Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, Saint-Petersburg, Russian Federation*

^d *A.F. Mozhaysky Military-Space Academy, Saint-Petersburg, Russian Federation*

^e *Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic University, Saint-Petersburg, Russian Federation*

In the present article it is shown that the presence of defects in material for a certain duration of heat exposure leads to the necessity of taking into account the dependence of the linear thermal expansion coefficient on their mobility, which determines its operator form. Using the example of the dynamic thermoelastic problem with an inertial inclusion acting as the defect, the change in the thermoacoustic signal caused by its presence is demonstrated. The transfer function of this operator is obtained, the behavior of which corresponds to the experimental result.

Keywords: defects, dynamic thermoelasticity, linear thermal expansion coefficient

УДК 532.516: 532.574.4

РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ–СТОКСА С ОГРАНИЧЕНИЯМИ СИММЕТРИИ И ИХ СВЯЗЬ С ПЕРЕХОДНЫМИ И ТУРБУЛЕНТНЫМИ ТЕЧЕНИЯМИ В КРУГЛОЙ ТРУБЕ

© 2021 г. В. Г. Приймак^{1,*}

Представлено академиком РАН Г.С. Голицыным 14.07.2021 г.

Поступило 21.07.2021 г.

После доработки 01.08.2021 г.

Принято к публикации 02.08.2021 г.

Общепринятая математическая модель, описывающая ламинарно-турбулентный переход в круглой трубе, основана на полной системе уравнений Навье–Стокса. Рассчитанная динамика хаотична и слишком сложна для расшифровки сценариев перехода к турбулентности и построению на этой основе более простых физических моделей. В работе исследуется возможность упрощения математической модели, ограничивающей динамику зеркальной и вращательной симметриями скорости. Показано, что в обоих случаях переходные и турбулентные течения не могут быть правильно рассчитаны, что делает недостаточно обоснованным использование ограничений симметрии при построении более простых моделей турбулентности.

Ключевые слова: уравнения Навье–Стокса, решения с ограничениями симметрии, ламинарно-турбулентный переход, течение в круглой трубе

DOI: 10.31857/S2686740021050084

Задача об устойчивости течения Пуазейля в трубе является тестовой для исследования докритического перехода. В отсутствие ограничений симметрии течение вязкой несжимаемой жидкости в круглой трубе $\Omega = \{\mathbf{r} = (r, \varphi, x): 0 \leq r < R, 0 \leq \varphi < 2\pi, |x| < \infty\}$ описывается здесь уравнениями Навье–Стокса

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \Pi + \nu \Delta \mathbf{v} + \mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}, \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{в } \Omega, \quad (1)$$

где $\mathbf{v} = [v, w, u]$ – скорость, $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v}$, $\Pi = \frac{p}{\rho} + \frac{\mathbf{v}^2}{2}$, p – давление, Δ – векторный лапласиан, ν и ρ – постоянные кинематическая вязкость и плотность.

Уравнения (1) дополняются начальными условиями для скорости. В качестве граничных условий используются периодичность в осевом и азимутальном направлениях и условие прилипания на стенке

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(r, \varphi, x, t) &= \mathbf{v}(r, \varphi, x + X, t), \\ \mathbf{v}(r, \varphi, x, t) &= \mathbf{v}(r, \varphi + 2\pi, x, t), \quad \mathbf{v}|_{r=R} = 0. \end{aligned}$$

Здесь X – параметр математической модели.

Для переменной Π , которую можно трактовать как множитель Лагранжа для условия несжимаемости, не требуется задания граничных условий. Расчеты проводятся при условии постоянства расхода жидкости

$$U(t) = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} d\varphi u(r, \varphi, x, t) = \text{const.}$$

Пространственная дискретизация краевой задачи включает тригонометрическую аппроксимацию методом Галёркина по переменным x, φ :

$$\mathbf{v} = \sum_{n=-N}^N \sum_{m=-M}^M \mathbf{v}_{nm}(r, t) \exp(i\alpha_m x + in\varphi), \quad (2)$$

$$\mathbf{v}_{nm}^* = \mathbf{v}_{-n, -m}, \quad i^2 = -1, \quad \alpha_m = \frac{2\pi m}{X},$$

и чебышевскую псевдоспектральную аппроксимацию с узлами коллокации $r_j = R \cos\left(\frac{\pi j}{2Q}\right), j = 0, 1, \dots, Q$, по r .

Заметим, что коэффициенты уравнений (1) пропорциональны $1/r$ и $1/r^2$. Наличие особенностей на оси трубы не связано с физикой течения, является следствием использования цилиндрических координат, и требует подходящей регуляри-

¹ Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: vgpriymak@mail.ru

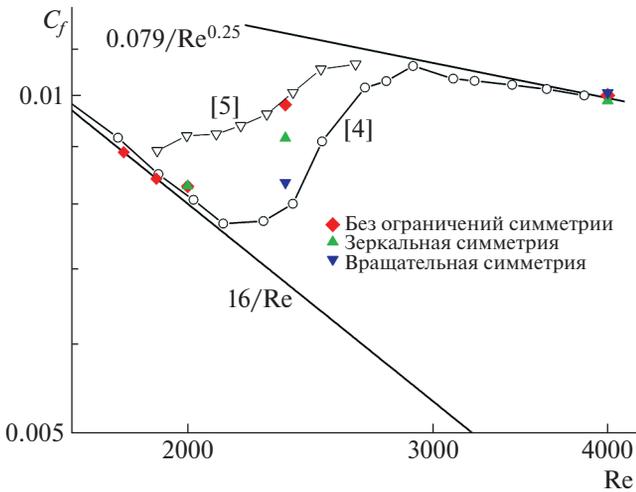


Рис. 1. Зависимость коэффициента сопротивления $C_f = -\frac{\langle \partial p / \partial x \rangle_{r\varphi x t} R}{\rho U^2}$ от числа Рейнольдса для режимов течений без ограничений симметрии, с зеркальной и вращательной симметриями; $\langle \partial p / \partial x \rangle_{r\varphi x t}$ — усредненный по пространству и времени градиент давления. Нижняя $C_f = 16/Re$ и верхняя $C_f = 0.079/Re^{0.25}$ прямые отвечают соответственно ламинарному закону сопротивления и закону сопротивления Блазиуса.

зации для сохранения спектральной точности. С этой целью здесь используются интерполяционные полиномы для $\mathbf{v}_{nm}(r, t)$ приближенно следующие асимптотике аналитических функций при $r \rightarrow 0$ [1, теорема 1]. В итоге обеспечивается не-сингулярность уравнений Навье–Стокса и их дивергенции.

Численное моделирование на основе рассмотренной математической модели адекватно описывает (см. [2]) как перемежаемые, так и установившиеся турбулентные режимы течений при числах Рейнольдса $1950 \leq Re \leq 4000$, $Re = \frac{2RU}{v}$. Расчеты проводятся на больших промежутках времени, с высоким пространственным разрешением, и очень трудоемки. При этом рассчитанная динамика хаотична и сложна для расшифровки сценариев перехода к турбулентности.

Между тем, математическая модель имеет богатую группу симметрии $O(2)_\varphi \times SO(2)_x$ (индексы φ, x отвечают азимутальному вращению и сдвигу вдоль оси трубы), которая потенциально может быть использована как для упрощения самой математической модели, так и при построении более простых, чем уравнения Навье–Стокса, физических моделей ламинарно-турбулентного перехода. Здесь мы анализируем результаты и возможности использования двух популярных

случаев симметрии, ограничивающих динамику зеркальной (отражение относительно $\varphi = 0$)

$$[v, w, u](r, \varphi, x, t) = [v, -w, u](r, -\varphi, x, t), \quad (3)$$

и вращательной (π -периодичность)

$$[v, w, u](r, \varphi, x, t) = [v, w, u](r, \varphi + \pi, x, t) \quad (4)$$

симметриями.

Чтобы выяснить, существуют ли долгоживущие статистически стационарные решения уравнений Навье–Стокса с ограниченной динамикой и какова их связь с переходными и турбулентными течениями, при $Re = 2000, 2350$ и 4000 проведены расчеты трех видов — без ограничений симметрии, с зеркальной и вращательной симметриями. Указанным Re отвечают (см. [3]) различные стадии перехода к турбулентности. В предыдущей работе [1] кратко рассмотрен лишь случай зеркальной симметрии (3) при $Re = 4000$.

Все расчеты проведены по алгоритму [1]; в трубе длиной $X = 120\pi R$; с $(Q + 1) \times (2N + 1) \times (2M + 1) = 33 \times 81 \times 2401$ спектральными модами по r, φ, x ; на больших промежутках времени $T \approx 3 \times 10^4 R/U$; с использованием графического ускорителя Tesla K80.

Рисунок 1 может рассматриваться как карта рассчитанных режимов течений. Каждой темной точке на плоскости (C_f, Re) , где C_f — коэффициент сопротивления, соответствует статистически стационарная стадия одного из численных решений настоящей работы. Экспериментальные черно-белые точки из [4, 5] служат, скорее, не для количественного сопоставления с расчетами, а для указания примерных границ области ламинарно-турбулентного перехода.

Оказалось, что при $Re = 4000$ (однородный вдоль трубы турбулентный режим) значения C_f практически совпадают для решений уравнений Навье–Стокса без ограничений симметрии, с зеркальной и вращательной симметриями. Напротив, в области деления турбулентных клубов (puffs) и образования цепочек дочерних клубов ($Re = 2350$) значения коэффициента сопротивления существенно различаются для решений различной симметрии. И, наконец, при $Re = 2000$ (область изолированных клубов, окруженных ламинарным течением) значения C_f снова совпадают у решений общего вида и решений с зеркальной симметрией. Решений с вращательной симметрией при $Re = 2000$ рассчитать не удалось.

Уточним, что при $Re = 2000$ нами рассматривался режим с единственным турбулентным клубом на длине периодичности X . Для контроля, мы показываем также рассчитанные при $Re = 1800$ и 1900 режимы, которые совпадают с течением Пуазейля и отвечают ламинарному закону сопро-

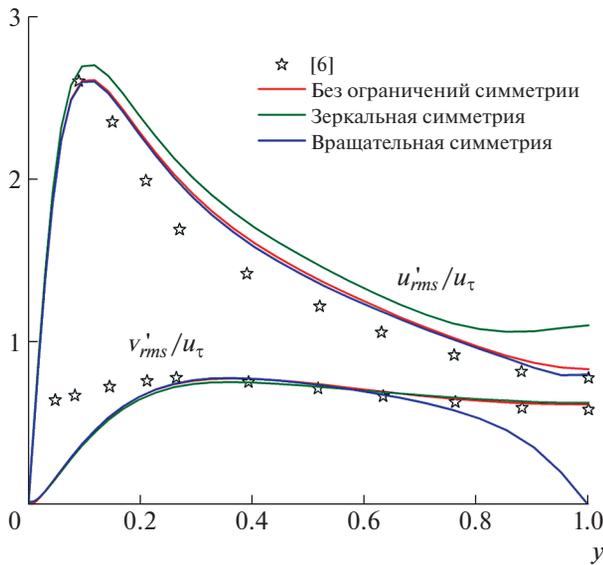


Рис. 2. Среднеквадратичные пульсации продольной u и радиальной v компонент скорости как функции расстояния $y = 1 - r/R$ от стенок трубы (u_τ – динамическая скорость). Изображены также данные эксперимента [6].

тивления $C_f = 16/Re$. Такие режимы удовлетворяют, конечно, условиям симметрии (3) и (4).

На рис. 2 сопоставляются профили среднеквадратичных пульсаций продольной и радиальной компонент скорости, рассчитанные при $Re = 4000$ без ограничений симметрии, с зеркальной симметрией и с вращательной симметрией. Несмотря на совпадение значений C_f , мы видим, что использование в расчетах соотношений симметрии (3), (4) является довольно рискованным решением: некоторые характеристики течения не могут быть правильно вычислены, в то время как другие лишь слабо чувствительны к ограничениям симметрии. То же верно и в области ядра турбулентных клубов при $Re = 2000$ и 2350 .

Аналогичная картина наблюдается для распределений среднеквадратичных пульсаций азимутальной компоненты скорости (рис. 3) и продольной компоненты завихренности (рис. 4), полученных в расчетах с различными предположениями о симметрии течения.

Отметим в этом контексте, что, если начальное поле скорости удовлетворяет условиям симметрии, то эти условия воспроизводятся в произвольный момент времени даже при использовании универсального компьютерного кода. Дело в том, что половина мод Фурье в (2) равна нулю как для условий (3), так и для условий (4), а ошибки округления перестают играть дестабилизирующую роль: результат умножения ненулевого значения переменной на машинный ноль (при вы-

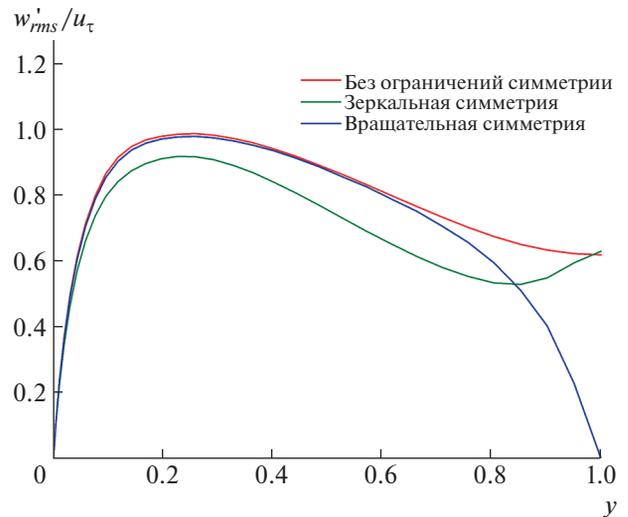


Рис. 3. Профили среднеквадратичных пульсаций азимутальной компоненты скорости.

числении квадратичных нелинейных членов) интерпретируется компьютером как машинный ноль. В результате мы можем даже не подозревать, что вычисляем симметричные решения вместо решений общего вида.

В работе показано, что численные решения уравнений Навье–Стокса с ограничениями симметрии (3), (4) могут существовать в области переходных чисел Рейнольдса, но не всегда корректно описывают гидродинамические характеристики течений. Последнее может привести к ошибкам при интерпретации результатов таких расчетов; при расшифровке механизмов лами-

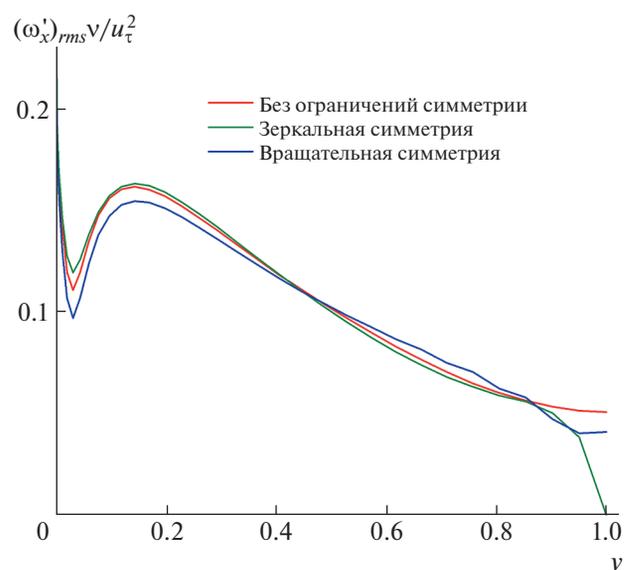


Рис. 4. Профили среднеквадратичных пульсаций продольной компоненты завихренности.

нарно-турбулентного перехода; при построении (см., например, [7–9]) упрощенных физических моделей, основанных на соотношениях симметрии.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор благодарен О.Г. Чхетиани за полезные обсуждения работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Priymak V.G., Miyazaki T.* Accurate Navier-Stokes investigation of transitional and turbulent flows in a circular pipe // *J. Comput. Phys.* 1998. V. 142. P. 370–411.
2. *Priymak V.G.* Direct numerical simulation of quasi-equilibrium turbulent puffs in pipe flow // *Phys. Fluids.* 2018. V. 30. 064102.
3. *Barkley D.* Theoretical perspective on the route to turbulence in a pipe // *J. Fluid Mech.* 2016. V. 803. P. 1.
4. *Patel V.C., Head M.R.* Some observations on skin friction and velocity profiles in fully developed pipe and channel flows // *J. Fluid Mech.* 1969. V. 38. P. 181–201.
5. *Samanta D., de Lozar A., Hof B.* Experimental investigation of laminar turbulent intermittency in pipe flow // *J. Fluid Mech.* 2011. V. 681. P. 193–204.
6. *Shemer L., Wygnanski I., Kit E.* Pulsating flow in a pipe // *J. Fluid Mech.* 1985. V. 153. P. 313–337.
7. *Ritter P., Mellibovsky F., Avila M.* Emergence of spatio-temporal dynamics from exact coherent solutions in pipe flow // *New J. Phys.* 2016. V. 18. 083031.
8. *Никитин Н.В., Пиманов В.О.* О поддержании колебаний в локализованных турбулентных структурах в трубах // *Изв. РАН. МЖГ.* 2018. № 1. С. 68–76.
9. *Budanur N.B., Dogra A.S., Hof B.* Geometry of transient chaos in streamwise-localized pipe flow turbulence // *Phys. Rev. Fluids.* 2019. V. 4. 102401.

NAVIER–STOKES SOLUTIONS WITH SYMMETRY RESTRICTIONS AND THEIR RELATION WITH TRANSITIONAL AND TURBULENT PIPE FLOWS

V. G. Priymak^a

^a *A.M. Obukhov Institute of Atmospheric Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*
Presented by Academician of the RAS G.S. Golitsyn

The prevailing mathematical model describing laminar-turbulent transition in a circular pipe is based on a full system of Navier–Stokes equations. Calculations using this model are very expensive, also the computed dynamics is chaotic and too complex to decode the transition scenario. In the present study we consider certain simplifications, including popular cases restricting the dynamics to reflectional and rotational symmetries. We show that in these two cases transitional and turbulent flows cannot be properly computed.

Keywords: Navier–Stokes equations, symmetry restrictions, laminar-turbulent transition, flow in a circular pipe

УДК 531.44

О РАВНОВЕСИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА, ОПИРАЮЩЕГОСЯ ОДНОЙ ТОЧКОЙ НА ШЕРОХОВАТУЮ ПЛОСКОСТЬ

© 2021 г. Г. М. Розенблат^{1,*}

Представлено академиком РАН В. Ф. Журавлёвым 24.05.2021 г.

Поступило 29.05.2021 г.

После доработки 07.08.2021 г.

Принято к публикации 20.08.2021 г.

Рассматривается задача о возможном и обязательном (в смысле Джеллетта) равновесии твердого тела, которое контактирует одной своей точкой с шероховатой плоскостью и находится под действием произвольной системы сил. Распределения масс в теле (т.е. центральный тензор инерции и положение центра масс тела относительно точки опоры) предполагаются произвольными. В точке контакта тела с опорой (односторонняя связь) действует сила сухого трения, подчиняющаяся классическому закону Кулона–Эйлера. Получены необходимые и достаточные условия обязательного равновесия. Эти условия выражаются простыми аналитическими формулами. Приводится сравнение с соответствующими результатами для плоского случая, полученными ранее.

Ключевые слова: сухое трение, статическое равновесие, точечный контакт, обязательное равновесие, односторонняя связь

DOI: 10.31857/S2686740021050096

ВВЕДЕНИЕ

Задачи о возможных и обязательных условиях равновесия твердого тела при наличии сухого трения восходят к Дж.Х. Джеллетту [1]. Возможное равновесие означает существование таких сил трения покоя и нормальных реакций связей, подчиняющихся закону Кулона–Эйлера, которые в состоянии статически уравновесить приложенную к телу систему сил (т.е. удовлетворить обычным уравнениям статики для твердого тела, в предположениях закона Кулона для возникающих сил трения покоя). Обязательное равновесие (при наличии возможного равновесия) означает отсутствие возможности начала безотрывного скольжения тела из рассматриваемого состояния с нулевыми начальными скоростями.

В данной работе изучается равновесие твердого тела, которое контактирует одной своей точкой с шероховатой плоскостью (точечный контакт с трением и односторонней связью). К телу приложена произвольная система внешних сил. Для рассматриваемой модели задача об обязательном равновесии решается следующим образом. Обозначим через O точку контакта тела с опорой (см. рис. 1). Пусть эта точка начинает дви-

гаться с произвольным ускорением w_O в опорной плоскости так, что тело совершает безотрывное ускоренное движение с нулевыми начальными скоростями. Кроме того, тело начинает вращаться с некоторым угловым ускорением ϵ .

В результате такого движения в точке опоры возникает сила сухого трения скольжения, которая подчиняется следующему классическому закону Кулона (в модификации Пэнлеве [2] для начала скольжения):

$$F_{fr} = -\frac{fNw_O}{|w_O|}, \quad (1)$$

где f – коэффициент трения, $w_O \neq 0$ – вектор ускорения точки O , $N > 0$ – нормальная реакция в точке O . Отметим, что при наличии вращения тела вокруг нормали к опорной плоскости закон (1) является весьма приближенным, а для более точного анализа должны использоваться более совершенные модели (см., например, модель трения Контенсу–Журавлёва [3, 4]).

Вводим неподвижную систему координат $Oxyz$, для которой ось Oz совпадает с нормалью к опорной плоскости, а плоскость Oxy совпадает с опорной плоскостью (см. рис. 1). Далее, при условии нулевых начальных скоростей точек тела, составляем 6 уравнений динамики для введенных ускорений (три уравнения для движения центра масс и три уравнения для кинетического момента относительно центра масс тела). В этих

¹Московский автомобильно-дорожный государственный технический университет (МАДИ), Москва, Россия

*E-mail: gr51@mail.ru

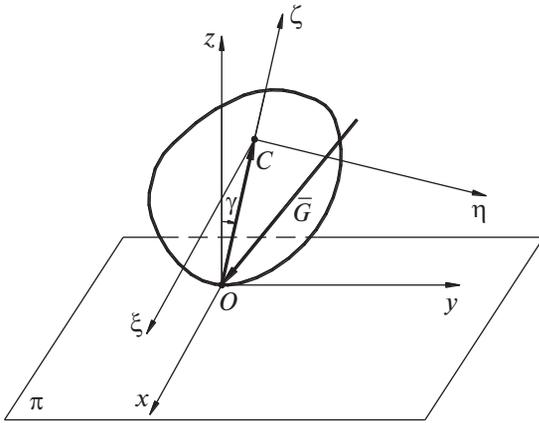


Рис. 1. Твердое тело, опирающееся одной точкой на шероховатую плоскость: π – опорная плоскость; O – точка опоры; C – центр масс тела; G – вектор равнодействующей всех активных внешних сил; $Oxyz$ – система координат с началом в опорной точке O , для которой ось Oz направлена по нормали к плоскости π , плоскость Oxy совпадает с плоскостью π , а вектор OC лежит в плоскости Oyz ; $C\xi\eta\zeta$ – система координат с началом в центре масс C , для которой ось $C\zeta$ направлена по вектору OC , а ось $C\xi$ параллельна оси Ox ; γ – угол, образуемый вектором OC с положительным направлением оси Oz .

уравнениях будут присутствовать ровно 6 неизвестных величин: $\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z, w_{Ox}, w_{Oy}, N$. При решении полученной системы необходимо учесть, что $N > 0, |w_O| > 0$. Тогда условия, при которых полученная система уравнений вместе с указанными неравенствами несовместна, при наличии возможного равновесия, и будут представлять собой условия обязательного равновесия.

В настоящей работе такие условия при произвольных параметрах системы получены в рамках классической модели Кулона (1). Некоторые результаты решения рассматриваемой задачи для частных случаев распределения масс в твердом теле были получены ранее в работах [5, 6]. Отметим, что вопросы неединственности и парадоксальности для задач равновесия и движения в механике твердых тел с сухим трением рассматриваются также в работах [7–11].

1. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ, ОСНОВНЫЕ ПРЕДПОЛОЖЕНИЯ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается твердое тело (см. рис. 1), опирающееся одной своей точкой O на шероховатую плоскость, которая создает силу сухого трения в соответствии с моделью Кулона (1). Пусть к телу приложена произвольная система сил, которая обеспечивает возможное (статическое) его равновесие. Известно, что для этого необходимо и до-

статочно, чтобы эта система сил приводилась в точке O к равнодействующей G , линия действия которой проходит через точку контакта O (см. рис. 1) и лежит внутри конуса трения для точки O (угол полураствора этого конуса равен углу трения $\phi_0 = \arctg f$, а ось конуса направлена по нормали к плоскости). Причем, так как связь в точке O является односторонней, должно быть выполнено условие $G_z < 0$. Таким образом, сила G удовлетворяет неравенствам

$$G_x^2 + G_y^2 \leq f^2 G_z^2, \quad G_z < 0. \quad (2)$$

Пусть C – центр масс тела. Без ограничения общности будем считать, что вектор OC лежит в плоскости Oyz (в системе координат $Oxyz$, описанной во введении). Обозначим через γ – угол, образуемый вектором OC с положительным направлением оси Oz (см. рис. 1). Будем считать, что $\gamma \in (0, \frac{\pi}{2})$ (это также не умаляет общности).

Введем систему координат $C\xi\eta\zeta$, для которой ось $C\zeta$ направлена по вектору OC , плоскость $C\eta\zeta$ совпадает с плоскостью Oyz , а ось $C\xi$ параллельна оси Ox . Таким образом, система координат $C\xi\eta\zeta$ получена из системы $Oxyz$ поворотом на угол γ вокруг оси Ox по часовой стрелке и параллельным переносом на вектор OC (см. рис. 1).

Пусть ψ – угол отклонения вектора G от плоскости $C\eta\zeta$. Поясним более подробно: ψ – угол, образуемый вектором G с его ортогональной проекцией на плоскость $C\eta\zeta$. На рис. 1 этот угол не изображен, отметим лишь, что в общем случае угол ψ не совпадает с углом между векторами G и CO . Для проекции вектора G на ось $C\xi$ получим

$$G_\xi = G \sin \psi. \quad (3)$$

Для модуля проекции вектора G на плоскость $C\eta\zeta$ имеем $G_{\zeta\eta} = G \cos \psi$. Пусть ϕ – угол, образуемый направлением проекции $G_{\zeta\eta}$ с положительным направлением оси $C\zeta$ (если $\phi = 0$, то угол ψ совпадает в точности с углом между направлением вектора G и вектором OC). Тогда получим для проекций вектора G на оси $C\eta$ и $C\zeta$ следующие выражения:

$$G_\eta = -G \cos \psi \sin \phi, \quad G_\zeta = -G \cos \psi \cos \phi. \quad (4)$$

Запишем условия того, что вектор G принадлежит конусу трения. Для этого в системе координат $C\xi\eta\zeta$ подсчитаем угол между единичным вектором e_ζ оси Oz и единичным вектором e_G оси вектора $(-G)$. Используя (3) и (4), имеем

$$e_G = (-\sin \psi, \cos \psi \sin \phi, \cos \psi \cos \phi)^T, \quad (5)$$

$$e_\zeta = (0, -\sin \gamma, \cos \gamma)^T.$$

Из (5) получаем для косинуса угла δ между векторами e_z, e_G соотношение

$$\cos \delta = \cos \psi \cos(\gamma + \varphi).$$

Из последнего соотношения вытекает, что условие $|\operatorname{tg} \delta| < f$ выполнено при соблюдении неравенства

$$\cos^2 \psi \cos^2(\gamma + \varphi) > (1 + f^2)^{-1}. \quad (6)$$

Таким образом, постановка задачи такова. Пусть сила G , приложенная к твердому телу, удовлетворяет условиям (2) и проходит через точку контакта O . Углы φ, ψ , которыми задается указанным выше образом ее линия действия, тогда удовлетворяют соотношениям (6). В этом случае реализуется возможное (статическое) равновесие тела. Требуется определить дополнительные условия, которые обеспечивают обязательное равновесие тела, как это было описано выше во введении.

2. ДИНАМИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ПРИ НАЧАЛЕ СКОЛЬЖЕНИЯ ТЕЛА

Пусть J – симметричная положительно определенная матрица инерции тела для точки C в системе $C\xi\eta\zeta$, а $B = J^{-1}$ – обратная ей матрица, которая также является симметричной и положительно определенной. Элементы матрицы B будем далее обозначать $b_{ij}, i, j = 1, 2, 3$.

Пусть возникает начальное скольжение точки O с ускорением w_0 в плоскости Oxy . Обозначим: $w = |w_0| > 0$ – модуль этого ускорения, α – угол, который образует вектор ускорения w_0 с положительным направлением оси Ox . Пусть при таком движении $\varepsilon_\xi, \varepsilon_\eta, \varepsilon_\zeta$ – проекции вектора углового ускорения тела на оси системы $C\xi\eta\zeta$.

К телу в процессе возникающего движения приложены три силы:

- 1) сила нормальной реакции $N > 0$, направленная по оси Oz ,
- 2) сила трения скольжения, направленная против вектора w_0 , расположенная в плоскости Oxy и равная по модулю fN ,
- 3) сила G – равнодействующая всех внешних сил, приложенных к телу, которая проходит через точку контакта O и удовлетворяет условиям (2).

Тогда уравнения движения центра масс тела C в проекциях на оси системы $C\xi\eta\zeta$ имеют вид (массу тела m и расстояние OC считаем единичными, G – модуль равнодействующей внешних сил):

$$\begin{aligned} w \cos \alpha + \varepsilon_\eta &= G \sin \psi - fN \cos \alpha, \\ w \sin \alpha \cos \gamma - \varepsilon_\xi &= \\ &= -G \cos \psi \sin \varphi - fN \sin \alpha \cos \gamma - N \sin \gamma, \\ w \sin \alpha \sin \gamma &= -G \cos \psi \cos \varphi - fN \sin \alpha \sin \gamma + N \cos \gamma. \end{aligned} \quad (7)$$

Уравнения теоремы об изменении кинетического момента тела относительно центра масс в системе $C\xi\eta\zeta$ дают следующие выражения для проекций вектора углового ускорения ε тела на оси системы $C\xi\eta\zeta$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_\xi &= b_{11}M_1 + b_{12}M_2, \\ \varepsilon_\eta &= b_{12}M_1 + b_{22}M_2, \quad \varepsilon_\zeta = b_{31}M_1 + b_{32}M_2, \\ M_1 &= N(-\sin \gamma - f \sin \alpha \cos \gamma) - G \cos \psi \sin \varphi, \\ M_2 &= Nf \cos \alpha - G \sin \psi. \end{aligned} \quad (8)$$

В (8) параметры b_{ij} – суть элементы матрицы $B = J^{-1}$. Подставляя (8) в (7) и обозначая

$$g = \frac{G}{N}, \quad u = f + \frac{w}{N}, \quad (9)$$

получим следующие три уравнения:

$$\begin{aligned} u \cos \alpha - b_{12}(\sin \gamma + f \sin \alpha \cos \gamma + \\ + g \cos \psi \sin \varphi) + b_{22}(f \cos \alpha - g \sin \psi) &= g \sin \psi, \\ u \sin \alpha \cos \gamma - b_{12}(f \cos \alpha - g \sin \psi) + \\ + b_{11}(\sin \gamma + f \sin \alpha \cos \gamma + g \cos \psi \sin \varphi) &= \\ &= -g \cos \psi \sin \varphi - \sin \gamma, \\ u \sin \alpha \sin \gamma &= \cos \gamma - g \cos \psi \cos \varphi. \end{aligned} \quad (10)$$

Так как должны быть выполнены неравенства $w > 0, N > 0$, то из (9) следует, что выполняются неравенства

$$g > 0, \quad u > f. \quad (11)$$

Из последнего уравнения системы (10) находим g :

$$g = \cos \gamma \frac{1 - u \sin \alpha \operatorname{tg} \gamma}{\cos \psi \cos \varphi} > 0. \quad (12)$$

Уравнение (12), в силу обозначений (9), определяет нормальную реакцию N . Таким образом, задача свелась к решению двух нелинейных уравнений относительно двух неизвестных u, α :

$$\begin{aligned} [(u + b_{22}f) \cos \alpha + (-b_{12}f \cos \gamma) \sin \alpha] - \\ - g [b_{12} \cos \psi \sin \varphi + (1 + b_{22}) \sin \psi] = b_{12} \sin \gamma, \\ [(u + b_{11}f) \sin \alpha \cos \gamma + (-b_{12}f) \cos \alpha] + \\ + g [b_{12} \sin \psi + (1 + b_{11}) \cos \psi \sin \varphi] = -(1 + b_{11}) \sin \gamma. \end{aligned} \quad (13)$$

В системе (13) переменная g дается формулой (12), и должны быть выполнены неравенства (11). Кроме того, необходимо учитывать, что, в силу положительной определенности матрицы B , выполняются следующие неравенства

$$b_{11} > 0, \quad b_{22} > 0, \quad b_{11}b_{22} - b_{12}^2 > 0. \quad (14)$$

Задача об обязательном равновесии тела тогда сводится к поиску условий, при которых система (13) с неравенствами (11), (12) и (14) не имеет решений относительно неизвестных α , u .

Преобразуем систему (13), вводя для краткости записи формул обозначения

$$\begin{aligned} x &= \sin \alpha, & y &= \cos \alpha, & v &= \frac{u}{f}, \\ a &= \operatorname{tg} \gamma, & b &= \operatorname{tg} \varphi, & \varepsilon &= \frac{\operatorname{tg} \Psi}{\cos \varphi}. \end{aligned} \quad (15)$$

Отметим, что для обозначений (15), в силу исходных предположений, должны соблюдаться следующие условия:

$$x^2 + y^2 = 1, \quad v \geq 1, \quad a > 0.$$

Подставляя величину g из (12) в уравнения (13), с учетом обозначений (15), получим линейную относительно x, y систему уравнений второго порядка:

$$xc_{11} + yc_{12} = h_1, \quad xc_{21} + yc_{22} = h_2. \quad (16)$$

В (16) для краткости записи введены обозначения

$$\begin{aligned} c_{11} &= v[b_{12}ab + (1 + b_{22})\varepsilon a] - b_{12}, \\ c_{12} &= \frac{(v + b_{22})}{\cos \gamma}, \\ c_{21} &= v[1 - (1 + b_{11})ab - b_{12}\varepsilon a] + b_{11}, \\ c_{22} &= -\frac{b_{12}}{\cos \gamma}, \\ h_1 &= \frac{[b_{12}(a + b) + (1 + b_{22})\varepsilon]}{f}, \\ h_2 &= -\frac{[(1 + b_{11})(a + b) + b_{12}\varepsilon]}{f}. \end{aligned} \quad (17)$$

Решение (по формулам Крамера) линейной системы второго порядка (16) имеет вид

$$x = \frac{\Delta_x(v)}{\Delta(v)}, \quad y = \frac{\Delta_y(v)}{\Delta(v)}. \quad (18)$$

В (18) определитель и миноры для системы (16) даются следующими формулами:

$$\Delta(v) = \frac{(k_2v^2 + k_1v + k_0)}{\cos \gamma}, \quad (19)$$

$$k_2 = (1 + b_{11})ab + b_{12}\varepsilon a - 1, \quad k_0 = b_{12}^2 - b_{11}b_{22},$$

$$k_1 = (b_{22} + b_{11}b_{22} - b_{12}^2)ab - b_{12}\varepsilon a - b_{11} - b_{22},$$

$$\Delta_x(v) = \frac{(l_1v + l_0)}{\cos \gamma}, \quad \Delta_y(v) = (m_1v + m_0),$$

$$l_1 = \frac{[(1 + b_{11})(a + b) + b_{12}\varepsilon]}{f},$$

$$l_0 = \frac{[(b_{22} + b_{11}b_{22} - b_{12}^2)(a + b) - b_{12}\varepsilon]}{f}, \quad (20)$$

$$m_1 = -\frac{[b_{12}(a + b) + (1 + b_{22})\varepsilon + a^2\varepsilon((1 + b_{11})(1 + b_{22}) - b_{12}^2)]}{f},$$

$$m_0 = \frac{[b_{12}(a + b) + \varepsilon(b_{12}^2 - b_{11} - b_{11}b_{22})]}{f}.$$

Далее рассмотрим некоторые частные случаи расположения равнодействующей G относительно твердого тела.

3. РАВНОДЕЙСТВУЮЩАЯ G ПРОХОДИТ ЧЕРЕЗ ЦЕНТР МАСС ТЕЛА И ТОЧКУ КОНТАКТА

В этом случае вектор G направлен по вектору CO . Тогда имеем, с учетом обозначений (15), $\varphi = \psi = 0 \rightarrow b = \varepsilon = 0$. Уравнения (16) и неравенство (12) упрощаются и принимают следующий вид:

$$xc_{11} + yc_{12} = \frac{b_{12}a}{f}, \quad xc_{21} + yc_{22} = -\frac{(1 + b_{11})a}{f}, \quad (21)$$

$$g = 1 - v f x a > 0, \quad v > 1,$$

где, согласно (15) и (17), введены обозначения

$$\begin{aligned} x &= \sin \alpha, & y &= \cos \alpha, & c_{11} &= -b_{12}, & c_{12} &= \frac{(v + b_{22})}{\cos \gamma}, \\ c_{21} &= v + b_{11}, & c_{22} &= -\frac{b_{12}}{\cos \gamma}. \end{aligned} \quad (22)$$

Решение системы (21) относительно неизвестных x, y таково:

$$\begin{aligned} x &= -\frac{\mu_1[(1+b_{11})(v+b_{22})-b_{12}^2]}{\Delta}, \\ y &= \frac{\mu_2 b_{12}(v-1)}{\Delta}, \end{aligned} \quad (23)$$

где обозначено

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \frac{(\operatorname{tg}\gamma)}{f}, \quad \mu_2 = \sin \gamma, \quad v = \frac{u}{f}, \\ \Delta &= (v+b_{11})(v+b_{22})-b_{12}^2. \end{aligned} \quad (24)$$

В силу неравенств (6), (11) и (14) для введенных в (24) параметров имеют место неравенства

$$0 < \mu_1 \leq 1, \quad 0 < \mu_2 \leq 1, \quad v > 1, \quad \Delta > 0. \quad (25)$$

Утверждение 1. Решение (23) системы (21) при $v \geq 1$ и условии статического (возможного) равновесия удовлетворяет строгому неравенству

$$x^2 + y^2 < 1. \quad (26)$$

Доказательство утверждения 1 сводится к непосредственной проверке неравенства (26) для величин x, y , даваемых выражениями (23). Приведем кратко основные моменты. Неравенство (26) эквивалентно следующему неравенству:

$$\begin{aligned} &[(v+b_{11})(v+b_{22})-b_{12}^2]^2 > \\ &> \mu_1^2[(1+b_{11})(v+b_{22})-b_{12}^2]^2 + \\ &+ \mu_2^2 b_{12}^2 (v-1)^2, \quad v \in (1, \infty). \end{aligned} \quad (27)$$

В силу неравенств (25), неравенство (27) следует из неравенства

$$\begin{aligned} &[(v+b_{11})(v+b_{22})-b_{12}^2]^2 > \\ &> [(1+b_{11})(v+b_{22})-b_{12}^2]^2 + \\ &+ b_{12}^2 (v-1)^2, \quad v \in (1, \infty). \end{aligned} \quad (28)$$

Представляя левую часть неравенства в виде

$$[(v-1)(v+b_{22})+(1+b_{11})(v+b_{22})-b_{12}^2]^2,$$

получим, что (28) эквивалентно неравенству

$$\begin{aligned} &(v-1)(v+b_{22})^2 + 2(v+b_{22}) \times \\ &\times [(1+b_{11})(v+b_{22})-b_{12}^2] > (v-1)b_{12}^2, \quad v \in (1, \infty). \end{aligned} \quad (29)$$

Неравенство (29), с использованием неравенств (14), проверяется непосредственно. Утверждение 1 доказано.

З а м е ч а н и е 1. Утверждение 1 кажется достаточно очевидным. Однако ниже будет показано, что для сколь угодно малого отклонения равнодействующей G от направления вектора OC существуют такие распределения масс в теле, при которых может начаться проскальзывание, и, следовательно, равновесие не будет обязательным.

Следствие 1. Пусть произвольное твердое тело опирается одной своей точкой на шероховатую плоскость, коэффициент сухого трения которой равен f . Если система внешних сил, приложенных к этому твердому телу, удовлетворяет следующим условиям:

1. Система внешних сил приводится в точке опоры к равнодействующей G .

2. Вектор G образует с нормалью к опорной плоскости угол γ , для которого $|\operatorname{tg}\gamma| < f$, а проекция вектора G на эту нормаль является отрицательной.

3. Линия действия вектора G проходит через центр масс тела.

Тогда из утверждения 1 следует, что тело находится в состоянии статического равновесия (возможное равновесие), которое к тому же является и обязательным.

Нарушение одного из условий 1 или 2 приводит к нарушению статического равновесия, а нарушение условия 3 может привести к нарушению обязательного равновесия (даже при сохранении возможного равновесия).

Следствие 2. Из утверждения 1 следует также, что положение равновесия тяжелого твердого тела, опирающегося одной своей точкой на шероховатую наклонную плоскость, является всегда (т.е. при любых распределениях масс в теле) обязательным, если угол наклона плоскости не превосходит угла трения. В этом случае заведомо, при возможном равновесии, равнодействующая (сил тяжести) проходит через центр масс и точку опоры.

4. ПЛОСКИЙ СЛУЧАЙ РАСПОЛОЖЕНИЯ РАВНОДЕЙСТВУЮЩЕЙ G

В этом случае считаем, что нормаль к опорной плоскости (ось Oz), вектор OC и равнодействующая G лежат в одной плоскости (т.е. в плоскости $S\eta\zeta$ или Oyz). Тогда получим $\psi=0$ и $\varepsilon = \frac{\operatorname{tg}\Psi}{\cos\varphi} = 0$. Уравнения (16), с учетом обозначений (17), и неравенства (6), (12) приобретают вид

$$\begin{aligned} x[v(ab b_{12})-b_{12}] + y\left(\frac{v+b_{22}}{\cos\gamma}\right) &= b_{12}d, \\ x\{v[1-ab(1+b_{11})]+b_{11}\} + y\left(-\frac{b_{12}}{\cos\gamma}\right) &= -(1+b_{11})d, \end{aligned} \quad (30)$$

$$|\operatorname{tg}(\gamma+\varphi)| = \frac{|a+b|}{|1-ab|} < f, \quad g = \frac{\cos\gamma}{\cos\varphi}(1-vxf a) > 0. \quad (31)$$

В (30), (31), как и ранее, введены обозначения

$$\begin{aligned} x &= \sin \alpha, & y &= \cos \alpha, & v &= \frac{u}{f}, \\ a &= \operatorname{tg} \gamma, & b &= \operatorname{tg} \varphi, & d &= \frac{(a+b)}{f}. \end{aligned} \quad (32)$$

Решая линейную систему (30) относительно x, y , получим в данном случае из (18)–(20) следующие выражения:

$$\begin{aligned} x &= \frac{l_1 v + l_0}{k_2 v^2 + k_1 v + k_0}, & y &= \frac{m_1 v + m_0}{k_2 v^2 + k_1 v + k_0}, \\ k_2 &= (1 + b_{11})ab - 1, \\ k_1 &= (b_{22} + b_{11}b_{22} - b_{12}^2)ab - b_{11} - b_{22}, \\ k_0 &= b_{12}^2 - b_{11}b_{22}, \\ l_1 &= (1 + b_{11})d, & l_0 &= (b_{22} + b_{11}b_{22} - b_{12}^2)d, \\ m_1 &= -b_{12}d \cos \gamma, & m_0 &= b_{12}d \cos \gamma. \end{aligned} \quad (33)$$

Решение (33) является корректным для тех $v \in (1, +\infty)$, при которых выполнено тригонометрическое равенство $x^2 + y^2 = 1$ и соблюдаются неравенства (31). Из (33) получим

$$F(v) = x^2 + y^2 = \frac{(l_1 v + l_0)^2 + (m_1 v + m_0)^2}{(k_2 v^2 + k_1 v + k_0)^2}. \quad (34)$$

Таким образом, дело сводится к возможности решения уравнения

$$F(v) = 1, \quad v \in (1, +\infty), \quad (35)$$

где $F(v)$ определяется формулами (33), (34). При этом должны выполняться неравенства (31).

Утверждение 2. Уравнение (35) имеет решения только при соблюдении неравенств

$$1 < (1 + b_{11})ab < 1 + b_{11}. \quad (36)$$

Замечание 2. Условия обязательности равновесия (нарушения неравенств (36)) в рассматриваемом плоском случае эквивалентны неравенству

$$(1 + b_{11})ab < 1. \quad (37)$$

Кроме того, должно соблюдаться первое неравенство из (31) – условие возможного равновесия. Отметим, что для случая из пункта 4 (равнодействующая G проходит через центр масс тела) имеем $b = \operatorname{tg} \varphi = 0$, и неравенство (37) обязательного возможного равновесия выполнено заведомо. Таким образом, подтвержден результат из пункта 4.

Замечание 3. Отметим, что случай $ab = \operatorname{tg} \gamma \operatorname{tg} \varphi > 1$ для нарушения неравенств (36) не реализуется при наличии односторонней связи в точке опоры O , так как тогда равнодействующая G имеет положительную проекцию на нормаль Oz и не выполнены условия возможного равновесия.

Доказательство утверждения 2. Основная идея доказательства состоит в следующем. Уравнение (35), где функция $F(v)$ определяется соотношениями (34) и (33), имеет решения тогда и только тогда, когда квадратный трехчлен $Q(v) = k_2 v^2 + k_1 v + k_0$, стоящий в знаменателе выражения (34), имеет хотя бы один вещественный корень на интервале $1 < v < +\infty$. Действительно, пусть $v_1 > 1$ – вещественный корень функции $Q(v) = k_2 v^2 + k_1 v + k_0$. Несложная проверка позволяет установить следующие свойства функции $F(v)$:

$$\begin{aligned} F(1) &= \frac{(a+b)^2}{f^2(1-ab)^2} < 1, & F(v_1 - 0) &= +\infty, \\ F(v_1 + 0) &= +\infty, & F(+\infty) &= 0. \end{aligned} \quad (38)$$

Из (38) и свойств решений, даваемых формулами (33), следует, что уравнение (35) имеет как минимум два решения на интервалах $(1, v_1 - 0)$ и $(v_1 + 0, +\infty)$. Причем на этих решениях величина x из формул (33) принимает значения разных знаков. Таким образом, на одном из этих значений будет заведомо выполнено второе неравенство из (31). Отметим, что трехчлен $Q(v) = k_2 v^2 + k_1 v + k_0$ не может иметь два корня на указанном интервале изменения v (меньший корень всегда меньше единицы).

Далее, несложный анализ (который здесь, в силу громоздкости, опускается) корней квадратного уравнения $Q(v) = k_2 v^2 + k_1 v + k_0 = 0$, где коэффициенты задаются формулами из (33), приводит к неравенствам (36). Таким образом, если и только если выполнены условия (36), то рассматриваемое квадратное уравнение заведомо имеет в точности один корень на интервале $1 < v < +\infty$, и обязательное равновесие не реализуется.

Если неравенства (36) нарушены, то несложно показать, что корней квадратного уравнения $Q(v) = k_2 v^2 + k_1 v + k_0 = 0$ на рассматриваемом интервале $1 < v < +\infty$ нет. Нам осталось показать, что в этом случае уравнение (35) также не имеет решений. Неравенства (36) нарушаются в следующих двух случаях:

$$(1 + b_{11})ab < 1 \quad \text{или} \quad ab > 1.$$

Второе из этих неравенств не реализуется (см. Замечание 3). Пусть выполнено первое неравенство

$$(1 + b_{11})ab < 1.$$

Покажем, что в этом случае производная функции $F(v)$ в указанном интервале является строго отрицательной. Это будет означать монотонное убывание функции $F(v)$ от значения $F(1) < 1$ до значения $F(+\infty) = 0$. Таким образом, уравнение

(35) заведомо не будет иметь решений и реализуется обязательное равновесие. Вычисляем производную от функции $F(v)$ из (34).

$$\frac{1}{2} \frac{dF}{dv} = \frac{g_3 v^3 + g_2 v^2 + g_1 v + g_0}{(k_2 v^2 + k_1 v + k_0)^3},$$

$$g_3 = -k_2(l_1^2 + m_1^2), g_2 = -3k_2(l_1 l_0 + m_1 m_0), \quad (39)$$

$$g_1 = k_0(l_1^2 + m_1^2) - 2k_2(l_0^2 + m_0^2) - k_1(l_1 l_0 + m_1 m_0),$$

$$g_0 = k_0(l_1 l_0 + m_1 m_0) - k_1(l_0^2 + m_0^2).$$

Используя формулы (33) и неравенство (37), можно показать (подробности здесь опускаем, в силу громоздкости выкладок), что все коэффициенты g_k ($k = 0, 1, 2, 3$) кубического полинома из (39) являются строго положительными. Функция же $Q(v) = k_2 v^2 + k_1 v + k_0$, в силу отсутствия корней, является строго отрицательной на интервале $v \in (1, +\infty)$. Таким образом, производная из (39) является в итоге отрицательной, а функция $F(v)$ монотонно убывает от значения $F(1) < 1$ до значения $F(+\infty) = 0$. Следовательно, уравнение (35) решений не имеет и реализуется обязательное равновесие. Утверждение 2 доказано.

З а м е ч а н и е 4. Условия (37) обязательного равновесия формально эквивалентны аналогичным условиям, полученным в работе [6] для плоского случая твердого тела (расположенного вместе с внешними силами в плоскости Oyz), где проскальзывание точки опоры допускалось лишь вдоль оси Oy . В данной пространственной задаче это соответствует случаю возможных скольжений при условии $\alpha = \pm\pi/2$ (тогда $x = \pm 1, y = 0$). Несложно показать, используя уравнения (30), что при $b_{12} \neq 0$ и $v > 1$ таких решений быть не может. В рассматриваемой пространственной задаче (для такого специального “плоского” расположения равнодействующей G) при нарушении условий обязательности равновесия может возникнуть лишь такое проскальзывание точки опоры, которое не совпадает с осью Oy (т.е. вектор w_0 не принадлежит плоскости Oyz). Причина этого несоответствия такова. В работе [6], на самом деле, рассмотрена задача об обязательности возможного равновесия цилиндрического тела, которое опирается на шероховатую плоскость не одной точкой, а целой прямой (т.е. образующей цилиндра, которым на самом деле в данном случае является твердое тело). Однако при $b_{12} = 0$ и условиях (36) система (30) имеет лишь решение $x = -1, y = 0$ ($\alpha = -\pi/2$). Таким образом, только в этом специальном случае (когда $b_{12} = 0$) имеется согласованность и аналогия между пространственной задачей настоящей статьи и плоской задачей, рассмотренной в [6].

5. ПРОИЗВОЛЬНОЕ РАСПОЛОЖЕНИЕ РАВНОДЕЙСТВУЮЩЕЙ G

Пусть равнодействующая G проходит через точку опоры O , но, вообще говоря, не принадлежит плоскости Oyz . Тогда угол $\psi \neq 0$. В этом случае результат аналогичен утверждению 2 из пункта 5, но является более громоздким. Справедливо следующее утверждение.

У т в е р ж д е н и е 3. *Обязательное равновесие может быть нарушено в том и только в том случае, когда квадратный трехчлен $\Delta(v)$ из (19) имеет хотя бы один вещественный корень на интервале $v \in (1, +\infty)$. Это эквивалентно следующим двум вариантам неравенств:*

$$1. \quad 1 - b_{12}\varepsilon a < (1 + b_{11})ab < 1 + b_{11}, \quad (40)$$

$$2. \quad \frac{2 + b_{11} + b_{22} - b_{12}\varepsilon a}{s_2} < ab < \min \left\{ 1, \frac{1 - b_{12}\varepsilon a}{1 + b_{11}} \right\}, \quad (41)$$

$$(abs_2 - 2 - b_{11} - b_{22} + b_{12}\varepsilon a)^2 -$$

$$- 4[(1 + b_{11})ab + b_{12}\varepsilon a - 1]s_1(ab - 1) > 0, \quad (42)$$

$$s_1 = (1 + b_{11})(1 + b_{22}) - b_{12}^2,$$

$$s_2 = (1 + b_{11})(2 + b_{22}) - b_{12}^2.$$

Напомним, что в (40)–(42) приняты обозначения

$$a = \operatorname{tg}\gamma, \quad b = \operatorname{tg}\varphi, \quad \varepsilon = \frac{\operatorname{tg}\psi}{\cos\varphi}.$$

Таким образом, условия обязательного равновесия состоят в том, что нарушены, во-первых, неравенства (40) и, во-вторых, нарушается хотя бы одно из неравенств (41) или (42). Кроме того, должно быть выполнено неравенство (6) – условие возможного равновесия. Отметим, что области параметров, удовлетворяющих либо неравенствам (40), либо неравенствам (41) и (42), являются непустыми.

Д о к а з а т е л ь с т в о утверждения 3 аналогично доказательству утверждения 2. Как и выше, при доказательстве утверждения 2, покажем сначала, что при наличии вещественного корня квадратного уравнения $\Delta(v) = 0$ из (19) при $v > 1$, уравнение $x^2 + y^2 = 1$, где x, y определяются формулами (18)–(20), заведомо имеет решения при $v > 1$. Далее, определим условия, при которых уравнение $\Delta(v) = 0$ имеет решения при $v > 1$. Для этого введем переменную $z = v - 1$ и воспользуемся тождеством

$$\Delta(v) = \frac{(q_2 z^2 + q_1 z + q_0)}{\cos\gamma},$$

$$q_0 = s_1(ab - 1), \quad q_1 = s_2 ab - 2 - b_{11} - b_{22} + b_{12}\varepsilon a, \quad (43)$$

$$q_2 = (1 + b_{11})ab + b_{12}\varepsilon a - 1.$$

В (43) параметры s_1, s_2 введены в формулах (42).

Тогда несложно получаются условия (40)–(42), представляющие собой условия наличия при $z > 0$ вещественных корней квадратного уравнения $q_2 z^2 + q_1 z + q_0 = 0$ (при введенных в (43) обозначениях для q_0, q_1, q_2).

Если же условия (40)–(42) нарушаются, как это было указано в формулировке утверждения, то мы вычисляем производную по v от выражения $x^2 + y^2$, согласно формуле (39), где параметры k, l, m определяются формулами (19), (20). Затем показываем, что все коэффициенты полинома 3-го порядка $g_3 v^3 + g_2 v^2 + g_1 v + g_0$ являются строго положительными при нарушении неравенств (40)–(42). Подробности здесь опускаются ввиду громоздкости выкладок.

З а м е ч а н и е 5. Области параметров задачи, в которых нарушаются неравенства (40) или (41) (т.е. области обязательного равновесия) могут быть определены численно с использованием стандартных компьютерных приложений. В общем случае для любых конкретных значений параметров задачи с помощью формул (40) или (41) можно определить, является рассматриваемое положение возможного равновесия обязательным или нет.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Джеллетт Д.Х.* Трактат по теории трения. М.: Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, 2009. 264 с.
2. *Пенлеве П.* Лекции о трении. М.: Гос. изд-во технико-теоретической литературы. 1954. 316 с.
3. *Журавлёв В.Ф.* // Изв. РАН. МТТ. 2003. № 4. С. 81–88.
4. *Андронов В.В., Журавлёв В.Ф.* Сухое трение в задачах механики. М.-Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”. Институт компьютерных исследований. 2010. 184 с.
5. *Розенблат Г.М.* Сухое трение и односторонние связи в механике твердого тела. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”, 2011. 208 с.
6. *Иванов А.П.* Основы теории систем с трением. М.: Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”. Ижевский институт компьютерных исследований, 2011. 304 с.
7. *Mamaev I.S., Ivanova T.B.* The dynamics of a rigid body with a sharp edge in contact with an inclined surface in the presence of dry friction // Regul. Chaot. Dyn. 2014. V. 19. P. 116–139.
8. *Vaganian A.* On generalized Coulomb-Amontons’ law in the context of rigid body dynamics // Nonlinear Dyn. 2020. V. 101. P. 2145–2155.
9. *Журавлев В.Ф., Розенблат Г.М.* Парадоксы, контр-примеры и ошибки в механике. / Вступ. Слово Д.М. Климова. М.: ЛЕНАНД, 2017. 240 с.
10. *Иванов А.П.* О равновесии систем с сухим трением // Прикладная математика и механика. 2015. Вып. 3. С. 317–333.
11. *Розенблат Г.М.* О равновесии скамейки Жуковского // ДАН. 2017. Т. 472. № 6. С. 659–665.

ON EQUILIBRIUM OF A SOLID BODY SUPPORTED IN ONE POINT BY A ROUGH PLANE

G. M. Rozenblat^a

^a *Moscow Automobile and Road State Technical University (MADI), Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS V. Ph. Zhuravlev

We consider the problem of possible and necessary (in the sense of Jellett) equilibrium of a rigid body which is contacting by one point with a rough plane. An arbitrary system of external forces applies to this body. The distribution of masses in the body (central inertia tensor and position of center of masses) is supposed to be arbitrary one. There is a force of dry friction in the point of contact (the classic law of Coulomb–Euler). The conditions of such an equilibrium obtained in this article. These conditions presented by simple analytical expressions. The results compared with results received earlier.

Keywords: dry friction, static equilibrium, point contact, necessary equilibrium, unilateral constraint

Журнал “Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки” публикует краткие сообщения, содержащие результаты приоритетных, оригинальных, ранее неопубликованных исследований в области физики, механики и технических наук. Цель журнала – ознакомление широкого круга специалистов с последними достижениями в различных разделах этих наук. Высокое качество публикаций должно обеспечиваться соблюдением требований к рукописям и всесторонним экспертным рецензированием.

Журнал публикует сообщения, авторами которых являются действительные члены (академики) и члены-корреспонденты Российской академии наук. Журнал публикует также сообщения других авторов, представленные академиками РАН по соответствующей специальности. Представление должно быть получено автором до направления статьи в редакцию.

Журнал издается на русском языке один раз в 2 месяца (6 выпусков в год). Периодичность англоязычной версии “Doklady Physics” – 12 выпусков в год.

Подразделы журнала: Физика; Механика; Технические науки.

В журнале не публикуются работы полемические и узкоспециальные; содержащие решения стандартных задач; статьи обзорные и методические; статьи, излагающие обобщения и предположения; статьи серийные, разделенные на несколько последовательных публикаций; статьи о рядовых исследованиях, не представляющие общего интереса.

Решением редакционной коллегии работа может быть отклонена, если она не удовлетворяет перечисленным выше требованиям. Сообщения, отклоненные редколлегией, повторно не рассматриваются.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Редакция журнала “Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки” просит авторов руководствоваться приводимыми ниже правилами и надеется, что авторы ознакомятся с ними, прежде чем отошлют сообщение в редакцию.

Работы, оформленные без соблюдения этих правил, возвращаются без рассмотрения.

1. Публикуемые сообщения должны иметь представление действительного члена Российской Академии наук, если оно требуется (см. образец оформления Представления).

2. Авторы должны определить раздел, в который они рекомендуют поместить сообщение, и индекс по Универсальной десятичной классификации (УДК).

3. Рукописи статей и сопроводительные материалы загружаются в Редакционно-издательскую систему издательства Pleiades Publishing Ltd по ссылке <https://sciencejournals.ru/journal/danfiz/> или направляются в редакцию по электронной почте doklady_physics@mail.ru. Бумажный вариант представлять в редакцию не требуется.

4. На отдельной странице нужно указать полное название (на русском и английском языках) учреждения, в котором выполнено исследование; фамилии, имена и отчества всех авторов; почтовый индекс, адрес, номера телефонов и E-mail каждого соавтора. Необходимо также указать автора, с которым редакция будет вести переговоры и переписку.

5. Возвращение рукописи автору на доработку не означает, что она принята к печати. После получения доработанного текста рукопись вновь рассматривается редколлегией. Доработанный текст автор должен срочно вернуть вместе с исходным вариантом, а также с ответом на все замечания.

6. Журнал публикует сообщения, занимающие не более 1/2 авторского листа (20 000 знаков). В этот объем входят текст, таблицы, библиография (не более 25 источников). Рекомендуется включать в список литературы актуальные журнальные статьи, опубликованные за последние 2 года, в том числе в журнале “Доклады Академии наук”. Рисунки должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность передачи всех деталей.

7. Электронная версия должна включать:

– название статьи; ФИО каждого автора статьи; аффилиация; аннотация; ключевые слова; текст сообщения; список литературы; рисунки (отдельными файлами в формате jpeg или tif);

– на английском языке: название статьи; ФИО каждого автора статьи; аффилиация; аннотация; ключевые слова.

8. Текст сообщения должен быть тщательно отредактирован и подписан всеми авторами. При использовании сокращений необходимо дать их расшифровку; следует ограничиваться общепринятыми сокращениями и не вводить новых без достаточных на то оснований.

9. Благодарности должны быть перечислены отдельно от источников финансирования.

10. Финансирование работы. Укажите информацию о грантах и любой другой финансовой поддержке исследований.

11. Обязательное указание конфликта интересов – любых отношений или сферы интересов, которые могли бы прямо или косвенно повлиять на вашу работу или сделать ее предвзятой (например, член редколлегии обязан указывать, что он публикуется в журнале, где он член редколлегии).

12. Авторы могут приложить свою версию перевода статьи на английский язык или дать необходимые пояснения переводчику.

13. В формулах следует избегать громоздких обозначений. Занумерованные формулы обязательно выключаются в красную строку, номер формулы ставится у правого края.

14. Ссылки в тексте на цитированную литературу даются в квадратных скобках, например [1]. В списке все работы перечисляются в порядке цитирования. Самоцитирование допускается в объеме не более 30%.

Для книг: фамилия и инициалы автора, полное название книги, место издания, издательство, год издания, том или выпуск и общее количество страниц.

Ссылки на книги, переведенные на русский язык, должны сопровождаться ссылками на оригинальные издания с указанием выходных данных.

Для периодических изданий: фамилия и инициалы автора, название статьи, название журнала, год издания, том, номер, первая и последняя страницы статьи.

Желательно указывать индекс DOI цитируемой статьи.

Ссылки на неопубликованные работы не допускаются.

Рекомендуется приложить список литературы на английском языке, в котором будут правильно указаны название английской версии переводного журнала и выходные данные.

15. Редакция обращает внимание авторов на то, что журнал «Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки» является органом общей научной информации и в связи с этим просит авторов излагать материал в ясной и доступной форме. Если материал не может быть изложен в краткой форме или требует большого числа иллюстраций, редакция советует авторам направлять его в какой-либо специализированный журнал. Работы, нарушающие эти условия, редакция возвращает авторам для сокращения.

16. Появление краткого сообщения в «Докладах Академии наук» не препятствует впоследствии публикации расширенного варианта в другом периодическом издании, с соблюдением всех этических норм. Одновременная отсылка рукописи в «Доклады» и в другой журнал не допускается.

17. В соответствии с новыми международными правилами будет проводиться проверка на предмет соблюдения авторами прав на заимствованные материалы, отсутствие плагиата и повторного опубликования. Проверка с использованием компьютерных программ проводится и зарубежными партнерами Издательства в отношении переводной версии статьи. Если автором нарушены права третьих лиц: не получены разрешения на использование заимствованных материалов, установлены факты плагиата, повторного опубликования и т.п., произведение будет отозвано.

18. Рукописи проходят процедуру анонимного внешнего рецензирования ведущими отечественными и зарубежными экспертами и рекомендуются к печати Редколлегией журнала на конкурсной основе.

19. Важно соблюдать правила публикационной этики и избегать следующих нарушений: 1) фабрикации и фальсификации данных, т.е. их подделки или изменения; 2) плагиата и самоплагиата – копирования без надлежащего цитирования хотя бы одного предложения из чужой или даже собственной ранее опубликованной рукописи, а также рисунков и таблиц; 3) многократной подачи рукописи в несколько журналов одновременно; 4) избыточных публикаций, основанных на одном и том же эксперименте; 5) неподобающего указания авторства, когда в авторский коллектив включены люди, не внесшие вклада в работу, или, наоборот, не включены люди, внесшие значительный вклад.

20. На любой материал, который автор заимствует из других работ, необходимо получить разрешение от правообладателя и приложить к рукописи. Правообладателем статей в журналах, как правило, является не автор, а издатель журнала, в котором опубликован материал. Подробнее о получении разрешения см. по ссылке <https://www.pleiades.online/ru/authors/permission/>

21. Все используемые в статье цитаты обязательно приводятся на оригинальном языке и сопровождаются соответствующей ссылкой.

22. Для более полного описания исследования к статье могут прилагаться дополнительные материалы (аудио- и видеофайлы, презентации, дополнительные таблицы и рисунки и пр.). Они публикуются только в электронной версии на сайте <https://link.springer.com/> (для англоязычных журналов) и <https://elibrary.ru> (для русскоязычных журналов).

ОБРАЗЕЦ ОФОРМЛЕНИЯ СООБЩЕНИЯ

РАЗДЕЛ

УДК

НАЗВАНИЕ СТАТЬИ

© 2021 г. В. П. Иванов^{1,*}, Г. В. Сидоров^{2,**}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Долгопрудный, Московская обл., Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*E-mail: ivanov@niisi.ras.ru

**E-mail: sidorov@msu.su

Представлено академиком РАН Я.Я. Яковлевым ...

Поступило ...

После доработки ...

Принято к публикации ...

Аннотация (объем не должен превышать 1000 знаков с учетом пробелов) может быть размещена в свободном доступе в электронных базах поиска и индексирования. Она должна быть информативной, описывать методы и главные результаты исследования и не должна содержать ссылок на другие работы и аббревиатур. Из аннотации должно быть ясно, какие вопросы поставлены для исследования и какие ответы на них получены. Должен быть сформулирован приоритетный научный результат, требующий срочной публикации.

Ключевые слова: необходимо указать от 3 до 10 ключевых слов, способствующих индексированию статьи в поисковых системах. Рекомендуется использовать общепринятые термины

Текст статьи...

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарят...

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 19–11–10000).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Руденко О.В., Гурбатов С.Н., Хедберг К.М. Нелинейная акустика в задачах и примерах. М.: Физматлит, 2007. 176 с.
2. Антипов Е.А., Левашова Н.Т., Нефедов Н.Н. Асимптотика движения фронта в задаче реакция–диффузия–адвекция // ЖВМиМФ. 2014. Т. 54. № 10. С. 35–49. <https://doi.org/10.31857/S2686740020030098>

В таком же порядке метаданные должны быть представлены на английском языке:

THE TITLE OF ARTICLE

V. P. Ivanov^a and G. V. Sidorov^b

^aMoscow Institute of Physics and Technology (National Research University), Dolgoprudny, Moscow Region, Russian Federation

^bLomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

Presented by Academician of the RAS Ya.Ya. Yakovlev

Summary

Keywords:

REFERENCES

1. O. V. Rudenko, S. N. Gurbatov, and C. M. Hedberg, *Nonlinear Acoustics through Problems and Examples* (Fizmatlit, Moscow, 2007; Trafford, Victoria BC, Canada, 2011).
2. E. A. Antipov, N. T. Levashova, and N. N. Nefedov, *Comput. Math. Math. Phys.* **54** (10), 1536–1549 (2014).

ОБРАЗЕЦ ОФОРМЛЕНИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

В кратком сообщении И.И. Иванова и С.С. Сидорова “Название работы” описано новое явление (обнаружен эффект, впервые объяснены свойства, построена новая модель и т.п.). Этот результат является приоритетным.

Приоритетность научного результата, полученного в быстро развивающейся области (физические свойства метаматериалов, регистрация гравитационной волны и т.п.) требует срочной публикации этого сообщения.

Представляю сообщение И.И. Иванова и С.С. Сидорова “Название работы” к публикации в журнале “Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки”.

Академик РАН Я.Я. Яковлев

Подпись, Число

СОПРОВОДИТЕЛЬНЫЕ ДОКУМЕНТЫ

Вместе с рукописью в редакцию высылаются отсканированные копии следующих сопроводительных документов:

- Экспертное заключение о возможности опубликования
- Лицензионный договор для русской версии, подписанный всеми авторами (https://sciencejournals.ru/pub/license_agreement_ru.docx)
- Авторский договор для английской версии (<https://www.pleiades.online/ru/authors/agreement/>)