



Вестник

московского государственного
областного университета

Библиотека МГОУ
Читальный зал уч.к.2

Серия

«ФИЗИКА-
МАТЕМАТИКА»

1 / 2010

МАТЕМАТИКА

УДК 517.55

ОБОБЩЕНИЕ ИНТЕГРАЛА ТИПА КОШИ,
АССОЦИИРОВАННОГО С БИКРУГОМ

А.В. Нелаев

*Московский государственный областной университет (МГОУ)
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Рассматривается обобщение интеграла типа Коши, ассоциированного с бикругом. Основное внимание уделено вскрытию обобщенно-аналитических свойств рассматриваемого интеграла вне бикруга.

Ключевые слова: Интеграл Коши, бикруг.

1. Статья относится к разрабатываемой теории обобщений интеграла типа Коши. Будем придерживаться следующих обозначений областей пространства C^2 двух комплексных переменных $z = (z_1, z_2): U^2 \equiv U^{++} = \{(z_1, z_2): |z_1| < 1, |z_2| < 1\}$ (единичный бикруг), $U^{--} = \{(z_1, z_2): |z_1| > 1, |z_2| > 1\}$, $U^{+-} = \{(z_1, z_2): |z_1| < 1, |z_2| > 1\}$, $U^{-+} = \{(z_1, z_2): |z_1| > 1, |z_2| < 1\}$ (образы этих областей удобно иллюстрировать в «абсолютной четвертьплоскости», координатами которой являются $|z_1|$ и $|z_2|$). Через T^2 обозначим остов бикруга U^2 - единичный тор $T^2 = \{(\zeta_1, \zeta_2) \in C^2: |\zeta_1| = 1, |\zeta_2| = 1\}$.

Одно из установленных И.И.Бавриным (см., напр., [1]) интегральных представлений голоморфных функций состоит в следующем:

Пусть функция $f(z_1, z_2)$ голоморфна в бикруге U^2 и непрерывна вместе со своими частными производными $f'_{z_1}(z_1, z_2)$ и $f'_{z_2}(z_1, z_2)$ в замыкании $\overline{U^2}$, а

$$L_{\beta, z^0}[f(z_1, z_2)] \equiv \beta f(z_1, z_2) + \delta_1(z_1 - z_1^0)f'_{z_1}(z_1, z_2) + \delta_2(z_2 - z_2^0)f'_{z_2}(z_1, z_2),$$

где β - любое положительное число с условием $\beta \geq 1$, δ_1 и δ_2 - любые неотрицательные числа с условием $\delta_1 + \delta_2 > 0$, (z_1^0, z_2^0) - фиксированная по произволу точка из U^2 . Тогда для $(z_1, z_2) \in U^2$

$$f(z_1, z_2) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_0^1 \tau^{\beta-1} d\tau \int_{T^2} \frac{L_{\beta, z^0}[f(\zeta_1, \zeta_2)] d\zeta_1 d\zeta_2}{(\zeta_1 - u_1)(\zeta_2 - u_2)}, \quad (1)$$

где $u_1 = \tau^{\delta_1} z_1 + (1 - \tau^{\delta_1}) z_1^0$, $u_2 = \tau^{\delta_2} z_2 + (1 - \tau^{\delta_2}) z_2^0$.

Аналогично тому, как на базе интегральной формулы Коши для бикруга вводится в рассмотрение интеграла типа Коши:

$$\Psi(z_1, z_2) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{T^2} \frac{\phi(\zeta_1, \zeta_2) d\zeta_1 d\zeta_2}{(\zeta_1 - z_1)(\zeta_2 - z_2)}, \quad (2)$$

(подробно исследованный В.А. Какичевым – см., напр., в [2]. Отметим, что интеграл (2) определяет функции $\Psi^{++}(z_1, z_2)$, $\Psi^{-+}(z_1, z_2)$, $\Psi^{+-}(z_1, z_2)$, $\Psi^{--}(z_1, z_2)$ голоморфные соответственно в областях U^2 , U^{-+} , U^{+-} , U^{--} . При рассмотрении интеграла (2) на границе и вне бикруга U^2 в тех случаях, когда $|z_1| = 1$, или $|z_2| = 1$, или и $|z_1| = 1$ и $|z_2| = 1$, соответствующие особые интегралы по ζ_1, ζ_2 и двойной особый интеграл существуют в смысле главного значения по Коши – это гарантируется накладываемым на плотность $\phi(\zeta_1, \zeta_2)$ условием Гельдера), рассмотрим строящийся на основе интегрального представления (1) интеграл

$$\tilde{F}(z_1, z_2) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_0^1 d\tau \int_{T^2} \frac{\phi(\tau, \zeta_1, \zeta_2) d\zeta_1 d\zeta_2}{(\zeta_1 - u_1)(\zeta_2 - u_2)}, \quad (3)$$

где плотность $\phi(\tau, \zeta_1, \zeta_2)$ - непрерывная по совокупности переменных функция (уже не двух, а трех переменных!), удовлетворяющая условию Гельдера:

$$|\phi(\tau, \zeta_1, \zeta_2) - \phi(\tau, \zeta_1^0, \zeta_2^0)| < A_1 |\zeta_1 - \zeta_1^0|^{\alpha_1} + A_2 |\zeta_2 - \zeta_2^0|^{\alpha_2}, \quad (4)$$

причем константы $A_k > 0$ и показатели α_k ($0 < \alpha_k \leq 1$) не зависят от τ .

Поведение функций, определяемых интегралом (3), характеризуют, прежде всего, следующие две теоремы.

Теорема 1. Интеграл (3) голоморфен в бикруге U^2 и, кроме того, в области U^{+-} - если $\delta_2 = 0$, или в области U^{-+} - в случае $\delta_1 = 0$.

Теорема 2. В области U^{--} и в областях U^{-+} (при $\delta_1 > 0$) и U^{+-} (при $\delta_2 > 0$) интеграл (3) представляет собой непрерывные, не голоморфные, вообще говоря, но любое число раз дифференцируемые (в вещественном смысле) функции.

Доказательство теоремы 1 основывается на том факте, что всюду в U^2 тождественно по всем τ ($0 \leq \tau \leq 1$) выполняются неравенства $|u_1| < 1$ и $|u_2| < 1$; если $\delta_2 = 0$, то в области U^{+-} справедливы неравенства $|u_1| < 1$ и $|u_2| \equiv |z_2| > 1$; если же $\delta_1 = 0$, то в области U^{-+} выполняются неравенства $|u_1| \equiv |z_1| > 1$ и $|u_2| < 1$.

Справедливость теоремы 2 опирается, во-первых, на то, что непрерывность может нарушаться лишь в том случае, если (при фиксированном z_v) равенство $|u_v| = 1$ выполняется на множестве изменения параметра τ ненулевой меры. А этого нет. Далее, вид формул перехода в (3) от кратного интегрирования к повторному (которые мы опускаем) свидетельствует о не голоморфном, вообще говоря, характере поведения определя-

емых интегралом (3) функций – часть пределов интегрирования по τ в этих формулах содержит неголоморфные (но дифференцируемые) выражения: $|z_1|$, $|z_2|$, $\arg z_1$, $\arg z_2$.

Стремясь оттенить качественную сторону вопроса и избежать громоздких вычислительных выкладок, мы ограничимся здесь рассмотрением случая $\delta_2 = 0$ в бесконечной области U^{-+} .

Рассмотрим поведение образуемого в этом случае из интеграла (3) интеграла

$$\tilde{F}_1(z_1, z_2) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_0^1 d\tau \int_{\Gamma^2} \frac{\varphi(\tau, \zeta_1, \zeta_2) d\zeta_1 d\zeta_2}{(\zeta_1 - u_1)(\zeta_2 - z_2)}. \quad (5)$$

Начнем с вывода для интеграла (5) формулы перехода в области U^{-+} от кратного интегрирования к повторному.

Пусть (z_1, z_2) - произвольная точка области U^{-+} . Тогда, в зависимости от значений параметра τ , величина $|u_1|$ может быть как больше, так и меньше единицы, а также равна единице. Например, при $\tau=0$ имеем $|u_1| \equiv |z_1^0| < 1$, а при $\tau=1$ $|u_1| \equiv |z_1| > 1$. Понятно (теорема Больцано-Коши), что в интервале $(0;1)$ должно существовать хотя-бы одно такое значение τ , при котором $|u_1| = 1$. Рассматривая равенство $|u_1| = 1$ как уравнение относительно τ (временное считаем значение z_1 фиксированным) и учитывая, что

$$|u_1|^2 = u_1 \bar{u}_1 = (\tau^{\delta_1} z_1 + (1 - \tau^{\delta_1}) z_1^0) \left(\tau^{\delta_1} \bar{z}_1 + (1 - \tau^{\delta_1}) \bar{z}_1^0 \right),$$

будем иметь:

$$(\tau^{\delta_1} (z_1 - z_1^0) + z_1^0) \left(\tau^{\delta_1} (\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0) + \bar{z}_1^0 \right) = 1,$$

или, что то же,

$$(z_1 - z_1^0) \left(\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0 \right) (\tau^{\delta_1})^2 + \left((z_1 - z_1^0) \bar{z}_1^0 + (\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0) z_1^0 \right) \tau^{\delta_1} + z_1^0 \bar{z}_1^0 - 1 = 0,$$

откуда

$$(\tau^{\delta_1})^2 + \left(\frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} + \frac{\bar{z}_1^0}{\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0} \right) \tau^{\delta_1} + \frac{|z_1^0|^2 - 1}{|z_1 - z_1^0|^2} = 0,$$

или

$$(\tau^{\delta_1})^2 + 2 \left(\operatorname{Re} \frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} \right) \tau^{\delta_1} + \frac{|z_1^0|^2 - 1}{|z_1 - z_1^0|^2} = 0 .$$

Отсюда получаем, что в интервале $(0;1)$ существует **единственное** значение параметра τ :

$$\tau_0 = \left[-\operatorname{Re} \frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} + \sqrt{\left(\operatorname{Re} \frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} \right)^2 + \frac{1 - |z_1^0|^2}{|z_1 - z_1^0|^2}} \right]^{\frac{1}{\delta_1}} , \quad (6)$$

удовлетворяющее уравнению $|u_1| = 1$.

Пусть теперь z_1 имеет произвольное значение, удовлетворяющее условию $|z_1| > 1$. Формула (6) показывает, что в области U^{-+} функция $\tau_0 = \tau_0(z_1)$ является неголоморфной, непрерывной и любое число раз дифференцируемой (в вещественном смысле) функцией.

Введем обозначения:

$$\frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\tau^2} \frac{\varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) d\varsigma_1 d\varsigma_2}{(\varsigma_1 - u_1)(\varsigma_2 - z_2)} = \begin{cases} \tilde{\Psi}^{++}(\tau, u_1, z_2), & \text{при } |u_1| < 1, \\ \tilde{\Psi}^{-+}(\tau, u_1, z_2), & \text{при } |u_1| > 1, \end{cases}$$

а при $u_1 = u_1^0 \stackrel{\text{def}}{=} \tau_0^{\delta_1} z_1 + (1 - \tau_0^{\delta_1}) z_1^0$ будем понимать интеграл

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{|\varsigma_1|=1} \frac{\varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)}{\varsigma_1 - u_1^0} d\varsigma_1$$

как особый – в смысле главного значения по Коши (его существование гарантирует нам наложенное на плотность $\varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)$ условие Гельдера (4)).

Учитывая ограниченность особого интеграла и то обстоятельство, что (при фиксированном z_1 , $|z_1| > 1$) лебегова мера множества $E = \{\tau \in (0;1) : |u_1| = 1\}$ равна нулю, заключаем, что всюду в области U^{-+} интеграл (5) выражается формулой:

$$\tilde{F}_1(z_1, z_2) = \int_0^{\tau_0} \tilde{\Psi}^{++}(\tau, u_1, z_2) d\tau + \int_{\tau_0}^1 \tilde{\Psi}^{-+}(\tau, u_1, z_2) d\tau , \quad (7)$$

которая будет играть важную роль в исследовании свойств интеграла (5).

З а м е ч а н и е 1. Интеграл (5) можно определить по формуле (7) и в бикруге U^2 , если ввести для τ_0 доопределение (по непрерывности): считать в $\bar{U}^2$ $\tau_0 \equiv 1$.

З а м е ч а н и е 2. Дифференцируемость определяемых формулой (7) функций (это наглядно вытекает из конструкции (7), отмеченного выше характера гладкости функции $\tau_0(z_1)$ и того факта, что функции $\tilde{\Psi}^{++}(\tau, u_1, z_2)$ и $\tilde{\Psi}^{-+}(\tau, u_1, z_2)$ голоморфны по u_1 и z_2) обеспечивает нам правомерность применения к этим функциям метода линейных дифференциальных операторов с переменными коэффициентами (см. подробно об этом методе напр. в [3]), чем мы сейчас и займемся.

2. Обобщенные производные интеграла $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$

Вскрытие обобщенных аналитических свойств интеграла (5), которыми он обладает в области U^{-+} , начнем с установления его обобщенной производной по z_1 , т.е. с нахождения такого дифференциального оператора в формальных производных вида:

$$a \frac{\partial}{\partial z_1} + b \frac{\partial}{\partial \bar{z}_1} + c \frac{\partial}{\partial z_2} + d \frac{\partial}{\partial \bar{z}_2},$$

где «коэффициенты» a, b, c и d – не известные нам пока еще функции переменных $z_1, \bar{z}_1, z_2, \bar{z}_2$, действие которым на интеграл (5) равносильно дифференцированию по z_1 его ядра.

Учитывая конструкцию формулы (7), в особенности то обстоятельство, что пределы интегрирования в ней – константы 0, 1 и функция $\tau_0 = \tau_0\left(z_1, \bar{z}_1\right)$, заключаем, что два коэффициента в искомом операторе (обозначим его кратко D_{z_1}) следует положить равными нулю: $c \equiv 0, d \equiv 0$.

Далее, принимая во внимание, что в области голоморфности (или при действии на голоморфные выражения) D_{z_1} должен вырождаться в обычную производную, делаем вывод о том, что его следует искать в виде:

$$D_{z_1} = \frac{\partial}{\partial z_1} + b \frac{\partial}{\partial \bar{z}_1}, \quad (8)$$

т.е. поставленная задача сводится к нахождению единственного коэффициента $b = b\left(z_1, \bar{z}_1\right)$.

Для определения b будем руководствоваться следующими соображениями, вытекающими из конструкции правой части формулы (7).

Во-первых, внутренние интегралы в ней, после замены параметров ζ_1 и ζ_2 на вещественные параметры t_1 и t_2 по формулам $\zeta_1 = e^{it_1}$, $\zeta_2 = e^{it_2}$, превращаются в интегралы

с постоянными пределами интегрирования и, следовательно, при действии на них оператором D_{z_1} - согласно обобщению правила Лейбница

$$D_{z_1} \left\{ \int_p^q f(z_1, s) ds \right\} = \int_p^q D_{z_1} [f(z_1, s)] ds + D_{z_1}(q) f(z_1, q) - D_{z_1}(p) f(z_1, p)$$

и с учетом свойства $D_{z_1}(const) \equiv 0$ - оператор пройдет за знаки интегралов без образования дополнительных слагаемых. Более того, учитывая голоморфность по z_1 выражения $\frac{1}{\zeta_1 - u_1}$ заключаем, что действие оператором D_{z_1} на подынтегральную функцию равносильно дифференцированию ядра интеграла по z_1 .

Во-вторых, для нахождения b нам теперь достаточно лишь потребовать, чтобы и за знак внешнего интеграла (по τ) в правой части формулы (7) оператор D_{z_1} проходил без образования дополнительных слагаемых. Ясно, что для этого достаточно потребовать выполнимость всего лишь одного тождества:

$$D_{z_1}(\tau_0) \equiv 0. \quad (9)$$

Перейдем к соответствующим выкладкам. Согласно общим свойствам линейных однородных дифференциальных операторов первого порядка с переменными коэффициентами имеем:

$$\begin{aligned} D_{z_1}(\tau_0) &= D_{z_1} \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} + \frac{\overline{z_1^0}}{\overline{z_1} - \overline{z_1^0}} \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} + \frac{\overline{z_1^0}}{\overline{z_1} - \overline{z_1^0}} \right)^2 + \frac{1 - |z_1^0|^2}{|z_1 - z_1^0|^2}} \right\}^{\frac{1}{\delta_1}} = \\ &= \frac{1}{\delta_1} \{ \dots \}^{\frac{1}{\delta_1} - 1} \cdot \left[\frac{1}{2} \left(\frac{z_1^0}{(z_1 - z_1^0)^2} + \frac{\overline{z_1^0} \cdot b}{(\overline{z_1} - \overline{z_1^0})^2} \right) - \frac{1}{2A} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} + \frac{\overline{z_1^0}}{\overline{z_1} - \overline{z_1^0}} \right) \left(\frac{z_1^0}{(z_1 - z_1^0)^2} + \frac{\overline{z_1^0} \cdot b}{(\overline{z_1} - \overline{z_1^0})^2} \right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(1 - |z_1^0|^2) \left(\overline{z_1} - \overline{z_1^0} + (z_1 - z_1^0)b \right)}{(z_1 - z_1^0)^2 \cdot (\overline{z_1} - \overline{z_1^0})^2} \right] \right], \end{aligned}$$

где, для сокращения письма, обозначено

$$A = \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} + \frac{\bar{z}_1^0}{\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0} \right)^2 + \frac{1 - |z_1^0|^2}{|z_1 - z_1^0|^2}} .$$

Приравнявая полученное выражение нулю и рассматривая образуемое равенство как уравнение относительно b , получаем:

$$A \cdot \left[z_1^0 \cdot \left(\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0 \right)^2 + \bar{z}_1^0 (z_1 - z_1^0)^2 \cdot b \right] - \left(\operatorname{Re} \frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} \right) \left[z_1^0 \cdot \left(\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0 \right)^2 + \bar{z}_1^0 \cdot (z_1 - z_1^0)^2 \cdot b \right] - \\ - \left(1 - |z_1^0|^2 \right) \cdot \left[\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0 + (z_1 - z_1^0) \cdot b \right] = 0 ,$$

откуда

$$b = - \frac{\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0}{z_1 - z_1^0} \cdot \frac{\left[A - \operatorname{Re} \frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} \right] \cdot z_1^0 \left(\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0 \right) + |z_1^0|^2 - 1}{\left[A - \operatorname{Re} \frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} \right] \cdot \bar{z}_1^0 (z_1 - z_1^0) + |z_1^0|^2 - 1} ,$$

или, учитывая, что

$$A - \operatorname{Re} \frac{z_1^0}{z_1 - z_1^0} = \tau_0 ,$$

$$b = - \frac{\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0}{z_1 - z_1^0} \cdot \frac{\tau_0 \cdot z_1^0 \left(\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0 \right) + |z_1^0|^2 - 1}{\tau_0 \cdot \bar{z}_1^0 (z_1 - z_1^0) + |z_1^0|^2 - 1} ,$$

Подставляя найденное для b выражение в (8), получаем явный вид обобщенной производной D_{z_1} интеграла (5):

$$D_{z_1} = \frac{\partial}{\partial z_1} - \frac{\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0}{z_1 - z_1^0} \cdot \frac{\tau_0 \cdot z_1^0 \left(\bar{z}_1 - \bar{z}_1^0 \right) + |z_1^0|^2 - 1}{\tau_0 \cdot \bar{z}_1^0 (z_1 - z_1^0) + |z_1^0|^2 - 1} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{z}_1} . \quad (10)$$

Таким образом, в области U^{-+} имеем

$$D_{z_1} \left[P_1^{\partial}(z_1, z_2) \right] = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_0^{\tau_0} d\tau \int_{\tau^2} \frac{\tau^{\delta_1} \cdot \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) d\varsigma_1 d\varsigma_2}{(\varsigma_1 - u_1)^2 (\varsigma_2 - z_2)} + \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\tau_0}^1 d\tau \int_{\tau^2} \frac{\tau^{\delta_1} \cdot \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) d\varsigma_1 d\varsigma_2}{(\varsigma_1 - u_1)^2 (\varsigma_2 - z_2)} \quad (11)$$

Учитывая, что в правой части формулы (11) пределы интегрирования остались те же самые, что и в формуле (7), заключаем, что оператор D_{z_1} можно аналогичным образом применить к формуле (11) повторно и, вообще, любое число раз. При этом индукцией по n устанавливается следующая общая формула:

$$D_{z_1}^{(n)}[\tilde{F}_1(z_1, z_2)] = \frac{n!}{(2\pi i)^2} \int_0^{\tau_0} d\tau \int_{T^2} \frac{\tau^{n\delta_1} \cdot \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) d\varsigma_1 d\varsigma_2}{(\varsigma_1 - u_1)^{n+1} (\varsigma_2 - z_2)} + \\ + \frac{n!}{(2\pi i)^2} \int_{\tau_0}^1 d\tau \int_{T^2} \frac{\tau^{n\delta_1} \cdot \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) d\varsigma_1 d\varsigma_2}{(\varsigma_1 - u_1)^{n+1} (\varsigma_2 - z_2)}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (12)$$

(подчеркнем, что в первом слагаемом из правой части формулы (12) $|u_1| < 1$, а во втором $|u_1| > 1$).

Таким образом, оказывается справедливой следующая теорема.

Теорема 3. В области U^{-+} интеграл (5) можно любое число раз «дифференцировать» обобщенной производной D_{z_1} ; эта операция равносильна дифференцированию по z_1 соответствующее число раз ядра интеграла.

В областях голоморфности U^2 , U^{+-} обобщенная производная D_{z_1} вырождается в обычную производную по z_1 и формула (12) принимает вид:

$$(\tilde{F}_1(z_1, z_2))_{z_1}^{(n)} = \frac{n!}{(2\pi i)^2} \int_0^1 d\tau \int_{T^2} \frac{\tau^{n\delta_1} \cdot \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) d\varsigma_1 d\varsigma_2}{(\varsigma_1 - u_1)^{n+1} (\varsigma_2 - z_2)}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (13)$$

З а м е ч а н и е 3. В силу тождества (9) для любых дифференцируемых функций вида $f = f(\tau_0)$ выполняется условие $D_{z_1}(f) \equiv 0$. Такие функции будем называть обобщенными константами оператора D_{z_1} . Отметим, что если f - обобщенная константа, то аналогичным свойством будут обладать $\bar{f}$, $\operatorname{Re} f$, $\operatorname{Im} f$ и, вообще, произвольная дифференцируемая функция вида $h = h\left(f, \bar{f}\right)$.

Вопрос о дифференцировании в области U^{-+} интеграла (5) по z_2 решается значительно проще: конструкция правой части формулы (7) показывает, что в области U^{-+} интеграл (5) является голоморфным по переменному z_2 , т.е. операция обычного дифференцирования $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$ по z_2 равносильна дифференцированию по z_2 ядра интеграла. Этот факт можно также сформулировать и следующим образом: в области U^{-+} обобщенная производная D_{z_2} интеграла $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$ совпадает с формальной производной $\frac{\partial}{\partial z_2}$:

$$D_{z_2} = \frac{\partial}{\partial z_2}. \quad (14)$$

С учетом этого, для области U^{-+} получаем общую формулу:

$$D_{z_1}^{(n)} D_{z_2}^{(m)} [\tilde{F}_1(z_1, z_2)] = \frac{n!m!}{(2\pi i)^2} \int_0^{\tau_0} d\tau \int_{T^2} \frac{\tau^{n\delta_1} \cdot \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) d\varsigma_1 d\varsigma_2}{(\varsigma_1 - u_1)^{n+1} (\varsigma_2 - z_2)^{m+1}} +$$

$$+ \frac{n!m!}{(2\pi i)^2} \int_{\tau_0}^1 d\tau \int_{T^2} \frac{\tau^{n\delta_1} \cdot \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) d\varsigma_1 d\varsigma_2}{(\varsigma_1 - u_1)^{n+1} (\varsigma_2 - z_2)^{m+1}}, \quad m, n = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$

3. Разложение интеграла $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$ в обобщенный степенной ряд

Рассмотрим этот вопрос с помощью метода мажорирующей плотности, разработанного ранее автором для случая одного комплексного переменного.

3.1. Пусть плотность $\varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)$ удовлетворяет дополнительному условию: при всех $0 \leq \tau \leq 1$ она, как функция переменных ς_1, ς_2 , определена и голоморфна в бикруге

$$U_{1+\varepsilon}^2 = \{(\varsigma_1, \varsigma_2) : |\varsigma_1| < 1 + \varepsilon, |\varsigma_2| < 1 + \varepsilon\},$$

где ε - произвольное, сколь угодно малое положительное число.

Выбрав ε_1 так, чтобы $0 < \varepsilon_1 < \varepsilon$, разложим плотность в ряд Тейлора в бикруге $U_{1+\varepsilon_1}^2$:

$$\varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2) = \sum_{k,l=0}^{\infty} a_{kl}(\tau) \varsigma_1^k \varsigma_2^l, \quad (16)$$

где

$$a_{kl}(\tau) = \frac{1}{k!l!} \left[\frac{\partial^{k+l} \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)}{\partial \varsigma_1^k \partial \varsigma_2^l} \right]_{\substack{\varsigma_1=0 \\ \varsigma_2=0}}.$$

Обозначим:

$$M = \max_{\substack{|\varsigma_1| \leq 1+\varepsilon_1 \\ |\varsigma_2| \leq 1+\varepsilon_1 \\ 0 \leq \tau \leq 1}} |\varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)|.$$

В силу неравенств Коши для коэффициентов степенного ряда имеем:

$$|a_{kl}(\tau)| \leq A_{kl} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{M}{(1+\varepsilon_1)^{k+l}}, \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (17)$$

Отсюда вытекает, что в бикруге $\overline{U^2} = \{(\varsigma_1, \varsigma_2) : |\varsigma_1| \leq 1, |\varsigma_2| \leq 1\}$ ряд (16) мажорируется сходящимся числовым рядом

$$\sum_{k,l=0}^{\infty} A_{kl}, \quad (18)$$

и, следовательно, сходится равномерно и абсолютно. Отметим также, что при этом оказывается сходящимся и ряд

$$\sum_{\substack{k=1 \\ l=0}}^{\infty} k A_{kl} . \quad (19)$$

Обратимся к формуле (7). Учитывая, что внутренний интеграл является в рассматриваемом случае интегралом Коши, и, следовательно, $\Psi^{++}(\tau, u_1, z_2) = \varphi(\tau, u_1, z_2)$, $\Psi^{-+}(\tau, u_1, z_2) \equiv 0$, формула (7) может быть переписана в виде

$$\tilde{F}_1(z_1, z_2) = \int_0^{\tau_0} \varphi(\tau, u_1, z_2) d\tau ,$$

или, с учетом (16),

$$\tilde{F}_1(z_1, z_2) = \int_0^{\tau_0} \left(\sum_{k,l=0}^{\infty} a_{kl}(\tau) u_1^k z_2^l \right) d\tau . \quad (20)$$

Отметим, что в правой части формулы (20) можно перейти к почленному интегрированию. Действительно, во-первых, из сходимости ряда (16) в бикруге $\overline{U}^2$ следует равномерная сходимость ряда

$$\sum_{k,l=0}^{\infty} a_{kl}(\tau) u_1^k z_2^l \quad (21)$$

(напомним, что в (20) $|u_1| < 1$, $|z_2| < 1$). Во-вторых, интегрирование по τ в пределах от 0 до τ_0 не ухудшает сходимости ряда – это вытекает из оценки произвольного слагаемого

$$P_{kl}^{++} = \int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) u_1^k z_2^l d\tau :$$

$$|P_{kl}^{++}| \leq \int_0^{\tau_0} |a_{kl}(\tau)| \cdot |u_1|^k \cdot |z_2|^l d\tau < \int_0^{\tau_0} A_{kl} d\tau = A_{kl} \cdot \tau_0 < A_{kl} ,$$

(это означает, что ряд $\sum_{k,l=0}^{\infty} P_{kl}^{++}$ мажорируется тем же числовым рядом (18), что и ряд (16)).

Таким образом, всюду в области U^{-+} интеграл $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$ разлагается в равномерно и абсолютно сходящийся функциональный ряд

$$\tilde{F}_1(z_1, z_2) = \sum_{k,l=0}^{\infty} P_{kl}^{++} = \sum_{k,l=0}^{\infty} \int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) u_1^k z_2^l d\tau ,$$

или, что то же,

$$\tilde{F}_1(z_1, z_2) = \sum_{k,l=0}^{\infty} \int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) \cdot [z_1^0 + \tau^{\delta_1}(z_1 - z_1^0)]^k \cdot z_2^l d\tau . \quad (22)$$

Слагаемые P_{kl}^{++} будем называть положительными составляющими интеграла $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$. В бикруге U^2 положительные составляющие обращаются в полиномы, а составленный из них ряд (ряд (22) при значении $\tau_0 \equiv 1$) – в обычный равномерно и абсолютно сходящийся степенной ряд.

3.2. Рассмотрим теперь вопрос о представлении ряда (22) по типу степенного ряда. Заметим, что вид подынтегрального выражения в (22) указывает на то, что удобнее всего этот ряд из интегралов представить в виду разложения $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$ в «степенной» ряд по степеням разности $z_1 - z_1^0$ и z_2 . Преобразуем общий член ряда (22):

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) [z_1^0 + \tau^{\delta_1}(z_1 - z_1^0)]^k \cdot z_2^l d\tau &= \int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) \left[\sum_{\nu=1}^k C_k^{\nu} \cdot (z_1^0)^{k-\nu} \cdot \tau^{\nu\delta_1} \cdot (z_1 - z_1^0)^{\nu} \right] \cdot z_2^l d\tau = \\ &= \sum_{\nu=0}^k \frac{k!}{\nu!(k-\nu)!} (z_1^0)^{k-\nu} \cdot \left(\int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) \tau^{\nu\delta_1} d\tau \right) \cdot (z_1 - z_1^0)^{\nu} \cdot z_2^l = \\ &= \sum_{\nu=0}^k \frac{k! (z_1^0)^{k-\nu} \cdot (z_1 - z_1^0)^{\nu} \cdot z_2^l}{\nu!(k-\nu)!} \int_0^{\tau_0} \frac{1}{k!l!} \left[\frac{\partial^{k+l} \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)}{\partial \varsigma_1^k \partial \varsigma_2^l} \right]_{\substack{\varsigma_1=0 \\ \varsigma_2=0}} \cdot \tau^{\nu\delta_1} d\tau . \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\tilde{F}_1(z_1, z_2) = \sum_{k,l=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^k \frac{(z_1^0)^{k-\nu} \cdot (z_1 - z_1^0)^{\nu} \cdot z_2^l}{\nu!(k-\nu)!l!} \int_0^{\tau_0} \left[\frac{\partial^{k+l} \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)}{\partial \varsigma_1^k \partial \varsigma_2^l} \right]_{\substack{\varsigma_1=0 \\ \varsigma_2=0}} \cdot \tau^{\nu\delta_1} d\tau ,$$

или, обозначая

$$\tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0) = \frac{(z_1^0)^{k-\nu}}{\nu!(k-\nu)!l!} \int_0^{\tau_0} \left[\frac{\partial^{k+l} \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)}{\partial \varsigma_1^k \partial \varsigma_2^l} \right]_{\substack{\varsigma_1=0 \\ \varsigma_2=0}} \cdot \tau^{\nu\delta_1} d\tau ,$$

$$\tilde{F}_1(z_1, z_2) = \sum_{k,l=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^k \tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0) (z_1 - z_1^0)^{\nu} \cdot z_2^l . \quad (23)$$

Таким образом, в области U^{++} интеграл $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$ разлагается в равномерно и абсолютно сходящийся о б о б щ е н н ы й с т е п е н н о й р я д (23), который мы будем

называть также обобщенным рядом Тейлора. Отметим, что его «коэффициенты» - функции $\tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0)$ - являются обобщенными константами оператора D_{z_1} : $D_{z_1}[\tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0)] \equiv 0$. В бикруге U^2 они обращаются в обычные контакты:

$$\tilde{b}_{\nu kl}(1) = \frac{(z_1^0)^{k-\nu}}{\nu!(k-\nu)!l!} \int_0^1 \left[\frac{\partial^{k+l} \varphi(\tau, \varsigma_1, \varsigma_2)}{\partial \varsigma_1^k \partial \varsigma_2^l} \right]_{\substack{\varsigma_1=0 \\ \varsigma_2=0}} \cdot \tau^{\nu \delta_1} d\tau.$$

3.3. Обсудим теперь вопрос о «дифференцировании» ряда (23) обобщенной производной D_{z_1} . Применяя оператор D_{z_1} к обеим частям (23) и внося в правой части оператор за знак суммирования (разумеется, до тех пор, пока не будет установлена равномерная сходимость образуемого в итоге ряда, эта операция носит формальный характер), получим:

$$D_{z_1}[\tilde{F}_1(z_1, z_2)] = \sum_{k,l=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^k D_{z_1}[\tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0) \cdot (z_1 - z_1^0)^{\nu} \cdot z_2^l].$$

Далее, с учетом правила действия линейными дифференциальными операторами на произведение:

$$D_{z_1}[f_1 \cdot f_2] = D_{z_1}(f_1) \cdot f_2 + f_1 \cdot D_{z_1}(f_2),$$

имеем

$$\begin{aligned} D_{z_1}[\tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0) \cdot (z_1 - z_1^0)^{\nu} \cdot z_2^l] &= \tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0) \cdot D_{z_1}[(z_1 - z_1^0)^{\nu}] \cdot z_2^l = \tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0) \cdot \frac{\partial (z_1 - z_1^0)^{\nu}}{\partial z_1} z_2^l = \\ &= \nu \cdot \tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0) \cdot (z_1 - z_1^0)^{\nu-1} \cdot z_2^l, \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$D_{z_1}[\tilde{F}_1(z_1, z_2)] = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\nu=1}^k \sum_{l=0}^{\infty} \nu \cdot \tilde{b}_{\nu kl}(\tau_0) \cdot (z_1 - z_1^0)^{\nu-1} \cdot z_2^l. \quad (24)$$

Покажем равномерную сходимость ряда (24). Обратимся с этой целью к исходному виду ряда (23) – ряду (20). Применяя оператор D_{z_1} к обеим частям (20), получаем:

$$D_{z_1}[\tilde{F}_1(z_1, z_2)] = \int_0^{\tau_0} D_{z_1} \left(\sum_{k,l=0}^{\infty} a_{kl}(\tau) u_1^k z_2^l \right) d\tau. \quad (25)$$

Вычисляя произвольное слагаемое из первой части (25), будем иметь:

$$\int_0^{\tau_0} D_{z_1} [a_{kl}(\tau) u_1^k z_2^l] d\tau = \int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) \frac{\partial u_1^k}{\partial z_1} z_2^l d\tau = k \int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) \cdot \tau^{\delta_1} \cdot u_1^{k-1} \cdot z_2^l d\tau.$$

Произведем оценку полученного выражения:

$$\begin{aligned} \left| k \int_0^{\tau_0} a_{kl}(\tau) \cdot \tau^{\delta_1} \cdot u_1^{k-1} \cdot z_2^l d\tau \right| &\leq k \cdot \int_0^{\tau_0} |a_{kl}(\tau)| \cdot \tau^{\delta_1} \cdot |u_1|^{k-1} \cdot |z_2|^l d\tau < k \cdot A_{kl} \cdot \int_0^{\tau_0} \tau^{\delta_1} d\tau = \\ &= \frac{k}{\delta_1 + 1} A_{kl} \tau_0^{\delta_1 + 1} < k \cdot A_{kl}. \end{aligned} \quad (26)$$

Отсюда, в силу сходимости числового ряда (19), ряд (25) и, следовательно, ряд (24) сходятся равномерно и абсолютно.

Итак, установлено, что обобщенный ряд Тейлора (23) можно почленно «дифференцировать» обобщенной производной D_{z_1} , причем, как показывает формула (24), эта операция аналогична правилу дифференцирования по z_1 обычных степенных рядов.

Продолжая применять алгоритм метода мажорирующей плотности, можно показать, что ряд (23) можно аналогичным образом «дифференцировать» обобщенной производной D_{z_1} любое число раз. На этом пути устанавливается справедливость следующей теоремы.

Теорема 4. Пусть плотность интеграла $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$ голоморфна в бикруге $U_{1+\varepsilon}^2$. Тогда в области U^{++} интеграл $\tilde{F}_1(z_1, z_2)$ разлагается в равномерно и абсолютно сходящийся обобщенный ряд Тейлора (23), который можно любое число раз почленно «дифференцировать» обобщенной производной D_{z_1} аналогично правилу дифференцирования по z_1 обычных степенных рядов:

$$D_{z_1}^{(n)} [\tilde{F}_1(z_1, z_2)] = \sum_{k=n}^{\infty} \sum_{v=n}^k v \cdot (v-1) \dots (v-n+1) \cdot \tilde{b}_{vkl}(\tau_0) (z_1 - z_1^0)^{v-n} \cdot z_2^l, \quad n=1, 2, \dots \quad (27)$$

Учитывая, что «коэффициенты» $\tilde{b}_{vkl}(\tau_0)$ от z_2 вообще не зависят, заключаем, что ряды (23) и (27) можно любое число раз дифференцировать по z_2 . В итоге получаем общую формулу:

$$\begin{aligned} D_{z_1}^{(n)} D_{z_2}^{(m)} [\tilde{F}_1(z_1, z_2)] &= \\ &= \sum_{k=n}^{\infty} \sum_{v=n}^k v \cdot (v-1) \dots (v-n+1) \cdot l(l-1) \dots (l-m+1) \tilde{b}_{vkl}(\tau_0) (z_1 - z_1^0)^{v-n} \cdot z_2^{l-m}, \quad n, m = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (28)$$

В бикруге U^2 (в котором, напомним, $\tau_0 \equiv 1$) ряд (23) обращается в обыкновенный двойной степенной ряд, а формула (28) принимает вид обычного правила дифференцирования по z_1 и z_2 .

ЛИТЕРАТУРА

1. Баврин И.И. Операторы и обобщенные интегральные формулы Коши, Шварца и Пуассона в случае поликруга // Межвуз. сб. научн. трудов «Математический анализ и теория функций». – М.: Изд. МОПИ. – 1981. – С.3-21.
2. Гахов Ф.Д. Краевые задачи. – М.: «Наука», 1977. – 640 с.
3. Нелаев А.В. Метод линейных дифференциальных операторов с переменными коэффициентами в исследовании комплексных интегралов в C^n // Математика. Компьютер. Образование: Сб. научн. трудов / под ред. Г.Ю.Ризниченко. – М.: Прогресс-Традиция. – 2000. – вып.7. – Часть 2. – С. 444-451.

GENERALIZATION KOSHI'S INTEGRAL TYPE CONNECTED WITH TWICE-CIRCLE

A. Nelayev

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. Generalization Koshi's integral type is considered as connected with twice-circle. Basic attention is given to generalized-analytical properties of such tupe of integrals outside twice-circle.

Keywords: Koshi's integral, twice-circle.

ФИЗИКА

УДК.533.72

ЭВОЛЮЦИЯ ГАЗОДИСПЕРСНОГО ОБЛАКА С ВЯЗКОЙ ГАЗОВОЙ ФАЗОЙ В ПОЛЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ СИЛ

А.Н. Голов

Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а

Аннотация. Найдена нестационарная статистическая функция распределения для микроскопической модели системы дисперсных частиц в квазинепрерывной вязкой среде и в поле потенциальных сил. Получено выражение плотности облака дисперсных частиц, эффективно представляемого квазинепрерывной средой в смысле кинетической теории. Выявлены основные закономерности эволюции широкого плоского облака.

Ключевые слова: нестационарная статистическая функция распределения, микроскопическая модель, дисперсные частицы, вязкая среда, поле потенциальных сил.

В данной статье рассмотрим случай, объединяющий ранее рассмотренные по отдельности случаи эволюции облака дисперсных частиц в вакууме под действием внешнего потенциального поля и эволюции газодисперсного облака с вязкой газовой фазой в отсутствии внешних полей [1, 2]. Мы используем статистико-механический подход, основанный на решении удлинённого уравнения Лиувилля – Гиббса (УЛГ) для данной системы многих частиц [3]. Примем микроскопическую модель системы однородных дисперсных частиц, невзаимодействующих между собой, которые движутся в газовой среде с вязким трением, во внешнем потенциальном поле («запылённый газ»). Здесь мы рассматриваем, как интересующую нас систему, именно множество дисперсных частиц. Эффективно квазинепрерывную среду, в которой они находятся, рассматриваем, как распределённый в пространстве термостат. Для этого случая положим, что общая масса всех дисперсных частиц $M = Nm \ll M_T$ (M_T – масса термостата, N – число частиц, $m_i = m$ – масса частицы), так что движение частиц не изменяет существенно термодинамического состояния и свойств среды. Мы также примем, что объём термостата V весьма велик, и геометрические ограничения на движение частиц несущественны. Практически это приемлемо, когда концентрация частиц достаточно быстро убывает к границе системы. Тогда можно пренебречь собственным объёмом частиц $NV_0 \ll V$ (V_0 – объём одной частицы). Но при рассмотрении движения частиц считаем их размеры конечными, так что на них действуют конечные силы вязкого трения. Далее считаем $N = \text{const}$, и $m = \text{const}$. Частицы примем нелетучими, бесструктурными, полагая, что их внутренние степени свободы не возбуждаются, а их столкновения друг с другом – упругие. Пусть на все однородные частицы действуют потенциальные силы $\mathbf{f}_i$. В простейшем случае примем поле однородным и постоянным, т. е. рассматриваем такие пространственные и временные масштабы, в которых неоднородностью поля и его изменением со временем можно пренебречь. Далее, распространяя интегралы на неограниченное пространство, предполагаем, что численная ошибка будет мала, когда подинтегральные функции достаточно быстро убывают к границам области интегрирования.

Пусть $\mathbf{f}_i = \mathbf{f}$ не зависит от номера частицы i . Система в целом не вращается. Задача заключается в выяснении влияния внешнего поля и свойств среды на статистическое описание системы частиц, а через него – на её макроскопическое описание. При наличии поля задача существенно нестационарная. Выберем лабораторную систему отсчёта с началом в центре масс при $t = 0$. Систему координат выберем, направив OZ вдоль действующей силы $\mathbf{f}$, пользуясь либо декартовой, либо цилиндрической СК. Силы, действующие на частицы со стороны среды, зададим в приближении Стокса:

$$\mathbf{Q}_i = -\kappa \mathbf{v}_i \equiv -\nu \mathbf{p}_i, \quad (1)$$

где стоксов коэффициент κ зависит от вязкости среды, размеров и формы частицы ($\nu = \kappa/m$), так что рассматривается случай малых чисел Рейнольдса. Для однородных частиц коэффициенты в (1) одни и те же при любом i .

Силы вида (1) — неконсервативные, вследствие чего обычное УЛГ, исходящее из уравнений динамики консервативных систем, не включающих диссипативные силы, не может быть применено в данном случае. Для адекватного описания исследуемых явлений, необходимо использовать удлинённое УЛГ. Из последнего для модели системы, состоящей из 2-х подсистем, следуют многочастичные кинетические уравнения для этих подсистем [3, 4]. Когда подсистемы могут рассматриваться, как статистически независимые, то и уравнения для них независимы. Уравнение, описывающее термостат, в данном случае несущественно, т. к. предполагается, что частицы слабо возмущают состояние среды, которое считаем заданным. Уравнение для N -частичной плотности вероятности подсистемы дисперсных частиц в этом приближении имеет вид:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \hat{L}F + \frac{\partial F}{\partial a_\mu} \mathcal{A}_\mu = -(\lambda D + g)F, \quad (2)$$

где стационарный лиувиллиан ($i = 1 \dots 3N$):

$$\hat{L} = \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial q_i} + \left(f_i - \frac{\kappa p_i}{m} \right) \frac{\partial}{\partial p_i}, \quad (3)$$

причём потенциальные силы f_i имеют только z -составляющие; диссипанта (мощность диссипативных сил) $D = -\kappa p_i p_i / m^2$; a_μ – макропараметры состояния; $\lambda = 1/\Theta$ (Θ – модуль распределения) и g не зависят от фазовых переменных. Здесь и далее в формулах принято правило тензорной алгебры, согласно которому подразумевается сумма по всем значениям повторяющихся индексов. Решение уравнения (2) в классе квазигиббсовых распределений ищем в виде:

$$F = \prod_{i=1}^N F_{1i}(\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i, a_\mu, t). \quad (4)$$

Тогда из уравнения (2) получим уравнения для 1-частичных функций F_{1i} , решения которых находим методом интегралов однородного лиувиллиана [1 – 3 и др.]. Представив

$$F_1 = F_{12}(q_\alpha, p_\alpha, t) \cdot F_3(q_3, p_3, t) \quad (5)$$

(индекс i опущен, $\alpha=1, 2$), можем разделить переменные. По осям X и Y поле не действует, и функция F_{12} соответствует 2-мерному случаю решения, полученного в [1], которое можем использовать и здесь. Новые закономерности получим для зависимости $F_3(q_3, p_3, t)$ ($q_3 \equiv z$). Эта функция может быть записана в казигиббсовом виде:

$$F_3 = \frac{1}{Z_3} \cdot \exp(-\eta_\lambda) , \quad (6)$$

где статистический интеграл $Z = Z(t)$ не зависит от фазовых переменных, но в общем случае может зависеть от макропараметров и времени. Из условия нормировки, имеем:

$$Z_3 = \int_{\Omega} \exp(-\eta_\lambda) dp_3 dq_3 , \quad (7)$$

где интеграл берётся по заданной области Ω на фазовой плоскости p_3, q_3 . Показатель вероятности в (6):

$$\eta_\lambda = k_6 p_3^2 + k_2 p_3 + k_3 p_3 q_3 + k_7 q_3 + b q_3^2 + k_5 , \quad (8)$$

где (и далее):

$$k_1 = (a + b/\kappa^2 + c/\kappa) \cdot \text{et}^2 - (2b/\kappa^2 + c/\kappa) \cdot \text{et} + b/\kappa^2 ; \quad (9)$$

$$k_2 = -2 \cdot (af\tau + cf\tau/\kappa + bf\tau/\kappa^2) \cdot \text{et}^2 + (2af\tau + 3cf\tau/\kappa + 4bf\tau/\kappa^2 + cft/\kappa + 2bft/\kappa^2) \cdot \text{et} - \\ - cf\tau/\kappa - 2bf\tau/\kappa^2 - 2bft/\kappa^2$$

$$k_3 = 2b/\kappa - (c + 2b/\kappa) \cdot \text{et}$$

$$k_4 = (cf\tau + 2bf\tau/\kappa) \cdot (\text{et} - 1) - 2bf\tau/\kappa$$

$$k_5 = (af^2\tau^2 + cf^2\tau^2/\kappa + bf^2\tau^2/\kappa^2) \cdot (\text{et} - 1)^2 - (cf^2t\tau/\kappa + 2bf^2t\tau/\kappa^2) \cdot (\text{et} - 1) + bf^2t^2/\kappa^2$$

$$k_6 = k_1 + h; \quad k_7 = k_4 - 2mhf; \quad (h = \lambda/2m); \quad k_8 = k_6 - k_3^2/4b = (a - c^2/4b) \cdot \text{et}^2 + h;$$

суть функции времени, $\tau = t/\kappa$ и обозначено $\exp(t/\tau) \equiv \text{et}$. Выше и далее a, b, c – константы задачи, подлежащие определению из дополнительных условий. Решение (6) при действительных параметрах и константах задачи удовлетворяет требованиям, предъявляемым к плотности вероятности, и асимптотическим граничным условиям обращения решения в нуль. Член k_5 в (8) не зависит от фазовых переменных, так что множитель

$\exp(-k_5)$ в подинтегральном выражении (7) можно вынести за интеграл и сократить с таким же множителем в числителе. Поэтому удобно пользоваться укороченным выражением (8), где слагаемое k_5 опущено, и соответственно вычислять интеграл (7). Такой сокращённый интеграл имеет вид:

$$Z_3 = \frac{\pi}{\sqrt{bk_8}} \cdot \exp\left(\frac{4bk_7^2k_8 + 4b^2k_2^2 - 4bk_2k_3k_7 + k_3^2k_7^2}{16b^2k_8}\right), \quad (10)$$

Учитывая обозначения выше, видим, что (10) является весьма сложной функцией времени. В случае $f = 0$ выражение (10) приводится к статистическому интегралу по одной из фазовых плоскостей, найденному в [1]. При $\kappa \rightarrow 0$, $h \rightarrow 0$ приходим к выражению, найденному в [2]. Аналогичные предельные переходы к указанным частным случаям имеем для η_λ и F_3 , так что выполняется принцип соответствия.

Из найденной плотности вероятности получим частные распределения по импульсам и координатам. Для распределения в плоскости XY (и по соответствующим проекциям импульса), получим 2-мерные распределения, аналогичные найденным в [1]:

$$F_{12}(p_\alpha, t) = \frac{A_t \pi}{b} \cdot \exp\left[-\frac{(4abU - K^2) \cdot p^2}{4b}\right] + \frac{A_0 \pi}{a_0 \kappa^2} \cdot \exp(-hp^2), \quad (11)$$

$$F_{12}(q_\alpha, t) = \frac{A_t \pi}{aU} \cdot \exp\left[-\frac{(4abU - K^2) \cdot q^2}{4aU}\right] + \frac{A_0 \pi}{a_0 + h} \cdot \exp\left(-\frac{a_0 h \kappa^2 q^2}{a_0 + h}\right). \quad (12)$$

Здесь: $p^2 = p_1^2 + p_2^2$; $q^2 = q_1^2 + q_2^2$; A_0, A_t – нормировочные множители для 2-мерного случая.

$$U = (1 + c / a\kappa + b / a\kappa^2) \cdot et^2 - (c / a\kappa + 2b / a\kappa^2) \cdot et + b / a\kappa^2 + h / a ;$$

$$K = [(c + 2b / \kappa) \cdot et - 2b / \kappa] .$$

Новые закономерности получим в зависимости от p_3, q_3 (ниже – без индексов для сокращения записи). Находим 1-частичное распределение по импульсам:

$$F(\mathbf{p}_i, t) = F_{12}(p_\alpha, t) \cdot \sqrt{\frac{k_8}{\pi}} \cdot \exp\left[-k_8 \cdot (p - \bar{p})^2\right]. \quad (13)$$

Формула (13), приведённая к простому виду, содержит сложную зависимость от времени, входящую через выражения k_8 и

$$\bar{p} = \frac{k_3 k_7 - 2b k_2}{4b \cdot [(a - c^2 / 4b) \cdot et^2 + h]}. \quad (14)$$

Т. о., имеем распределение по p_3 с зависящим от времени модулем $1/k_8$ и центром, смещающимся со временем по закону (14). В соответствующих частных случаях имеем

переходы к результатам [1] и [2]. Т. к. k_8 неограниченно растёт со временем, то модуль распределения $\rightarrow 0$. При $t = 0$ по аналогии с распределением Максвелла можем связать модуль распределения с начальной эффективной «температурой» облака Θ_0 :

$$\Theta_0 = [2am \cdot (w + \xi)]^{-1}, \quad (15)$$

где $\xi = h/a$; $w = 1 - c^2/4ab$. Когда Θ_0 задано и константы задачи определены, (15) можно использовать для определения ξ или параметра h . Θ_0 надо понимать в смысле «продольной» температуры [5]. Известное в газодинамике «вымораживание» продольной температуры трактуется здесь, как уменьшение дисперсии импульсного распределения вследствие подавления хаотического движения частиц по OZ. При этом

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{p}(t) = f\tau.$$

Этот асимптотический результат известен в теории седиментации, где он следует для более простой зависимости от времени без учёта статистических закономерностей и пространственной неоднородности. Средний импульс частицы (z-проекция):

$$\langle p_3 \rangle = \bar{p}.$$

Распределение по координатам приводится к виду:

$$F(\mathbf{q}, t) = F_{12}(q_\alpha, t) \cdot \sqrt{\frac{bk_8}{\pi k_6}} \cdot \exp \left[-\frac{bk_8 \cdot (q - \bar{q})^2}{k_6} \right].$$

Соотношение (16) есть распределение с переменным модулем k_6 / bk_8 , центр которого:

$$\bar{q} = \frac{2k_6 k_7 - k_2 k_3}{4bk_8}. \quad (17)$$

В отсутствие поля имеем $\bar{q} = 0$. В случае невязкой среды, как и в [2], имеем:

$$\bar{q} = ft^2 / 2m.$$

Величина (17) неограниченно растёт со временем, в асимптотике – линейно. Средние по распределению (16) значения:

$$\langle q_3 \rangle = \bar{q};$$

$$\langle q_3^2 \rangle = \bar{q}^2 + k_6 / 2bk_8;$$

Так что общее выражение дисперсии:

$$\langle q_3^2 \rangle - \langle q_3 \rangle^2 = k_6 / 2bk_8 . \quad (18)$$

Соотношение (18) в соответствующих частных случаях переходит в выражения, найденные в [1] и [2]. Со временем дисперсия изменяется от значения $4 \cdot (a+h) / (4ab - c^2 + 4bh)$ до конечного асимптотического значения $4 \cdot (ak^2 + ck + b) / [k^2 \cdot (4ab - c^2)]$.

Зная выражение F_{12} и функцию (6), тем самым определим 1-частичную функцию (5) и N -частичную функцию (4). Перейдём, согласно кинетической теории [6 и др.], к описанию облака дисперсных частиц в представлении квазинепрерывной среды. Находим эффективную плотность дисперсной фазы:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = Nm\rho_{xy}(x, y, t) \cdot \sqrt{\frac{bk_8}{\pi k_6}} \cdot \exp\left[-\frac{bk_8 \cdot (z - \bar{z})^2}{k_6}\right], \quad (19)$$

где

$$\rho_{xy}(x, y, t) = \frac{A_t \pi}{aU} \cdot \exp\left[-\frac{(4abU - K^2) \cdot r_{xy}^2}{4aU}\right] + \frac{A_0 \pi}{a_0 + h} \cdot \exp\left(-\frac{a_0 h k^2 r_{xy}^2}{a_0 + h}\right), \quad (20)$$

причём: $r_{xy}^2 = x^2 + y^2$ и $\bar{z} = \bar{q}$ (см. (17)). Для выяснения начального и текущего распределения плотности рассматриваем (19) в смысле совместного распределения [7 и др.]. Следуя [8], аналогично [1. 2], введём начальные и текущие координаты частицы:

$$x = x_0 + x_t; \quad y = y_0 + y_t; \quad z = z_0 + z_t .$$

Для последующих выкладок нужно определить начальные условия, задав область начальных значений x_0, y_0, z_0 для рассматриваемой конкретной задачи. Для определённости, примем модель широкого плоского облака, однородно заполняющего в начальный момент весьма широкий слой толщиной $2L$, так что $z_0 \in [-L, L]$. Такая модель (без учёта вязкой среды) была рассмотрена в [9 – 11]. Примем исходное облако настолько широким, что интегралы по x_0 и y_0 , вычисленные в конечных пределах, численно весьма близки к таковым, вычисленным в бесконечных пределах. Это обеспечивается весьма быстрым убыванием функции (20) с ростом x_0 и y_0 . Тогда краевые эффекты в плоскости ХОУ можно не рассматривать. В этом случае начальная плотность:

$$\langle \rho \rangle = Nm / V_0 \cdot \check{A}(x_0, y_0 \in S) \cdot \check{A}(z_0, (-L, L)) , \quad (21)$$

где $\check{A}(x_0, y_0 \in S)$ – 2-мерная функция, равная 1 в области S и нулю – вне неё [12].

$$\check{A}(z_0, (-L, L)) = \begin{cases} 1 & \text{и } z_0 \in [-L, L] \\ 0 & \text{и } z_0 \notin [-L, L] \end{cases} .$$

Распределение плотности дисперсной фазы в текущем состоянии:

$$|\rho\rangle = \frac{\rho_0}{2} \cdot \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{(\bar{z} - z_t + L)}{\lambda} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{(\bar{z} - z_t - L)}{\lambda} \right] \right\}, \quad (22)$$

где $\rho_0 = Nm / V_0$, $\lambda = (b \cdot k_8 / k_6)^{-1/2}$. Концентрация дисперсных частиц:

$$|n\rangle = \frac{n_0}{2} \cdot \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{(\bar{z} - z_t + L)}{\lambda} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{(\bar{z} - z_t - L)}{\lambda} \right] \right\}, \quad (23)$$

где $n_0 = N / V_0$ должно быть достаточно мало, чтобы можно было пренебречь собственным объёмом и взаимодействием частиц. Для любого t выполняется условие:

$$\iiint_{V_t} |n\rangle \cdot dV_t = N.$$

В отсутствие поля формулы (22) и (23) приводятся к виду, найденному в [1]. Для невязкой среды получим те же результаты, что в [2]. Сложная зависимость полученных выше формул от времени выявляется подстановкой обозначений (9) (выражение не приводится ввиду его громоздкости). Среднее по распределению массы облака в текущем состоянии значение координаты $\langle z_t \rangle = \bar{z}$. При этом:

$$\langle z_t \rangle(t=0) = \frac{afm\xi \cdot (1+\xi)}{b \cdot (w+\xi)}, \quad \langle z_t \rangle(t \rightarrow \infty) \rightarrow ft / \kappa, \quad (24)$$

где $f/\kappa = v_\infty$ – известное выражение скорости седиментации. Дисперсия (22):

$$D_{zt} = \frac{L^2}{3} + \frac{(a+b/\kappa^2+c/\kappa) \cdot et^2 - (2b/\kappa^2+c/\kappa) \cdot et + b/\kappa^2 + h}{2b \cdot [(a-c^2/4b) \cdot et^2 + h]}. \quad (25)$$

Отсюда видно, что дисперсия не зависит от поля, а создаётся только хаотическим движением и определяется начальным состоянием облака, свойствами частиц и среды. По ходу эволюции облака дисперсия ограниченно изменяется от начального значения

$$D_{z0} = \frac{L^2}{3} + \frac{1+\xi}{2b \cdot (w+\xi)}, \quad (26)$$

(не зависящего от вязкости среды), до асимптотического значения:

$$D_{z\infty} = \frac{L^2}{3} + \frac{a\kappa^2 + b + c\kappa}{2abw\kappa^2}, \quad (27)$$

(не зависящего от параметра h). При неотрицательных значениях констант задачи и параметров величина (25) возрастает со временем.

Итак, решение данной задач, включая переход к макроскопическому описанию, может быть доведено до конца в аналитическом виде без каких-либо вычислительных приближений. Последние, однако, появятся при нахождении констант задачи из начальных условий, т. к. эти константы определяются из трансцендентных уравнений, как показано в [11] (где даны профили и графики плотности, плотности потока вещества и плотности энергии для квазинепрерывного облака дисперсных частиц). Найденные решения уравнения (2) описывают эволюцию облака, как результат суперпозиции направленного и хаотического движения частиц. Полученные формулы показывают, что эволюция многочастичной системы определяется тремя основными факторами: 1) хаотическим движением частиц; 2) действием внешнего поля; 3) действием термостатирующей вязкой среды. Переход к случаю [2] производится пределом $\kappa \rightarrow 0$ и $h \rightarrow 0$. Переход к случаю [1] имеем при $f \rightarrow 0$. В принятой выше модели движение дисперсных частиц разделяется на «продольное» и «поперечное» движения. Второе из них – хаотическое, в первом присутствует направленная составляющая. Все найденные статистические распределения — нестационарные. Выражения плотности (22) и концентрации (23) для модели плоского широкого облака также описывают нестационарные состояния с переменной дисперсией и максимумом, движущимся с переменной скоростью вдоль направления поля. Найденные выражения могут быть использованы в различных практически интересных приложениях, например, для описания переноса массы при осаждении облака. Известные формулы теории седиментации естественно следуют из полученных выше в асимптотическом пределе, причём не для скоростей или координат отдельных частиц, а для средних статистических значений. Т. о., изложенный подход позволяет обобщить теорию седиментации, включая в рассмотрение статистический разброс, случайные факторы, пространственную неоднородность системы и отклонение распределения скоростей дисперсных частиц от максвелловского. Изложенная теория позволяет включать в рассмотрение различные потенциальные поля, а также центробежные силы, силы Архимеда и другие. Для пространственно-однородных сил обобщение теории получается наиболее просто, добавлением их в формально введённую силу $\mathbf{f}$. В этом случае сохраняется структура всех проделанных выкладок, так что достаточно подставить суперпозицию всех учитываемых сил в окончательные выражения. Например, для учёта силы Архимеда следует подставить

$$\mathbf{f} = m\mathbf{g} - \rho_c V_{\text{ч}} \mathbf{g} ,$$

где ρ_c – плотность среды, $V_{\text{ч}}$ – объём частицы.

Ввиду наличия сил двух типов (потенциальных и диссипативных) обнаруживаются два характерных масштаба времени. Один из них $\tau_f = am/c$ – тот же, что в [2, 10] и характерен для свободного расширения газоподобных систем. Другой масштаб $\tau = m/\kappa$ естественно возникает вследствие наличия вязкой среды. Зависимости полученных выше формул от времени весьма сложные, и, в общем случае, явное отделение членов, содержащих разные масштабы времени, не всегда возможно. Оценка τ_f (см. [11]) показывает, что для модели широкого плоского облака этот масштаб на несколько порядков больше τ и зависит от начальной толщины облака. Масштаб τ обычно входит в экспоненты $e t$. При $t \ll \tau$ экспоненты аппроксимируются первыми членами разложения в ряд, и поведение функционалов приближённо описывается степенными функциями. На следующем этапе включаются сильные экспоненциальные зависимости, описывающие

процессы релаксационного типа. Далее изменение исследуемых величин замедляется и они при $t \gg \tau$, либо стремятся к постоянным значениям, либо обнаруживают асимптотическое стремление к степенным функциям времени. Характерный пространственный масштаб связан с константой b . Для обезразмеривания пространственных зависимостей можно использовать постоянный масштаб $\lambda_0 = b^{-1/2}$. Однако, в полученные выше нестационарные выражения входит переменный масштаб λ , определённый выше, который в ходе процесса изменяется в ограниченных пределах. Для широкого плоского облака конечной толщины в формулах появляется второй пространственный масштаб – начальная полутолщина облака L . От соотношения λ и L зависит соотношение различных членов формул и ход кривых в конкретных случаях при общей аналитической закономерности. Пространственные зависимости (22) и (23), в сущности, уже выражены через безразмерные аргументы. Например, концентрация записывается в виде:

$$|n\rangle = \frac{N_0}{4L} \cdot \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{L}{\lambda} \cdot (\langle z \rangle - z_0 + 1) \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{L}{\lambda} \cdot (\langle z \rangle - z_0 - 1) \right] \right\}, \quad (28)$$

где $N_0 = N/S$ и безразмерные величины: $z_0 = z_t/L$; $\langle z \rangle = \langle z_t \rangle/L \equiv \bar{z}/L$. Отсюда очевидна инвариантность фигурной скобки в (28) относительно выбора единиц длины. Когда для графического представления желательно иметь безразмерными сами представляемые функции, удобно использовать приведённые функции, получаемые делением представляемой функции на её масштабное значение. Таковым можно выбрать значение функции в т. 0 при $t = 0$, которое для всех используемых функций конечно и положительно. Для широкого плоского облака приведённая безразмерная концентрация:

$$|n\rangle = \frac{1}{2} \cdot \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{L}{\lambda} \cdot (\langle z \rangle - z_0 + 1) \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{L}{\lambda} \cdot (\langle z \rangle - z_0 - 1) \right] \right\}. \quad (29)$$

Для графического анализа результатов удобно ввести новую безразмерную константу s так, что $a = bs^2/\kappa^2$, $c = bs/\kappa$ и выбрать специальную систему единиц, в которой $a = 1$, $b = 1$, $c = 1$, $w = 3/4$. Тогда поведение функций зависит от значений двух параметров — s и ξ , которые должны определяться из дополнительных условий. В частности, имеем:

$$\langle z \rangle = \frac{fm \cdot \left[(s^2\xi + \xi + s\xi + 3t/4 - 3/4) \cdot \operatorname{erf}^2 - (3\xi + 3s\xi/2 - 3/4) \cdot \operatorname{erf} + \xi \cdot (s^2\xi + 2 + s/2 + t/4) \right]}{\kappa^2 \cdot (3 \cdot \operatorname{erf}^2/4 + \xi)}, \quad (30)$$

где параметры f , m , κ , ξ заданы условием, и произвольно только s ($t = t/\tau$, $\operatorname{erf} = \exp(t/4)$). Графическое исследование (30) на ЭВМ показывает, что для достаточно крупных частиц в газе, в силовом поле порядка земного поля тяжести, после короткого времени порядка нескольких τ устанавливается практически линейный закон изменения $\langle z \rangle$. Для $s > 1$ асимптотическая скорость изменения $\langle z \rangle$ весьма мала. Большие её значения имеем для $s < 1$. Существенна зависимость асимптотической скорости от силы. Эволюцию эффективной толщины облака описывает изменение среднего квадратичного отклонения координаты z от среднего значения (далее – СКО). Относительное СКО (в долях L) при введённых выше обозначениях приводится к виду:

$$\delta = \left\{ \frac{1}{3} + \frac{(w + \xi) \cdot \left[(s^2 + s + 1) \cdot et^2 - (s + 2) \cdot et + s^2 \xi + 1 \right]}{3s^2 \cdot (1 + \xi) \cdot (w \cdot et^2 + \xi)} \right\}^{1/2}, \quad (31)$$

и вполне определяется параметрами s и ξ . Общей закономерностью является ограниченное возрастание СКО со временем, причём короткий релаксационный этап сменяется медленным приближением к асимптотическому значению. При $s = 10$ возрастание СКО незначительно и может составлять 0,1 – 0,01 начального значения, т. е., седиментация облака происходит относительно компактным слоем. При $s = 0,1$ СКО возрастает на порядок, так что облако значительно «размазывается» по z . Зависимость от ξ существенно влияет на поведение функции при $t \sim \tau$, далее же проявляется лишь в различии асимптотических значений. Зависимость приведённой концентрации (29) от времени определяется подстановкой в это выражение функций $\langle \varphi \rangle(t)$ и $\lambda(t)$. Поскольку общий вид их известен, концентрация $|n\rangle(z, t)$ вполне определена данными условия и значениями параметров и констант задачи. При $t \rightarrow 0$ получим начальные профили концентрации, заметно отличающиеся для тонкого и толстого слоёв ($L = 1$ и $L = 10$ соответственно, в условных единицах $b^{-1/2}$). Для толстого слоя имеем характерные платообразные кривые, форма которых слабо зависит от значений параметров. В обоих случаях обнаруживаем начальный сдвиг центра распределения, возрастающий с увеличением значений f и ξ . Модели с малым начальным сдвигом центра распределения соответствуют значениям $\xi \sim 1$ и менее. Графическое исследование эволюции профилей со временем на ЭВМ показывает, что для тонкого слоя на коротком начальном этапе (при $\xi = 1$) происходит быстрое релаксационное изменение профиля, после чего его долговременная эволюция, главным образом, выражается в движении максимума при слабом изменении дисперсии распределения. Толстый слой мало изменяется на релаксационном этапе, слабо деформируется и размывается со временем, и движется компактной массой с резко очерченными границами. Характерной закономерностью зависимости концентрации от времени (при заданных $\varphi > 0$) является прохождение максимумов концентрации, приблизительно соответствующее движению средней плоскости облака. Обнаруживается значительная разница графиков для тонкого и толстого слоёв.

ЛИТЕРАТУРА

1. Голов А. Н., Яламов Ю. И. Нестационарные статистические распределения дисперсных частиц в вязкой среде. //Вестник МГОУ. Серия «Физика-математика», №3–4, с. 22 – 30, 2008.
2. Голов А. Н., Харитонов А. П. Эволюция газоподобной системы многих дисперсных частиц в потенциальном поле. //Вестник МГОУ. Серия «Физика-математика», №3–4, с. 12 – 21, 2008.
3. Яламов Ю. И., Голов А. Н. «Статистикомеханические методы в теории неравновесных молекулярных и дисперсных систем», деп. рукопись, ВИНТИ, №2423-В92, М., МПУ, 280 с. 1992.

4. Яламов Ю. И., Голов А. Н. – Многочастичное кинетическое уравнение для двух взаимодействующих подсистем. // «Механика и физическая кинетика дисперсных систем», с. 2 – 12, ВИНТИ, № 8113-B88, М., МПУ, 1988.
5. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: «Мир», 1981, 320 с.
6. Гуров К. П. Основания кинетической теории. М.: «Наука», 1966. 351 с.
7. Прохоров Ю. В., Розанов Ю. А. // Теория вероятностей. М.: «Наука», 1973. 494 с.
8. Голов А. Н. Учёт начального состояния в нестационарном решении уравнения Лиувилля для свободно расширяющегося газа. ВИНТИ № 3303-B95, М., МПУ, 8 с., 1995.
9. Голов А. Н. Нахождение полей плотности, образуемых диспергированием протяжённых тел в вакууме. – 7 с., - Деп. рукопись, ВИНТИ № 121 - В2002, М., МПУ, 2002.
10. Яламов Ю. И., Голов Ю. И. Эволюция облака, созданного быстрым распылением широкой пластины в вакууме.// Труды Центра фундаментальных научных исследований МГОУ, № 1, с. 15 – 26, М., Издательство МГОУ, 2005.
11. Голов А.Н., Харитонов А.П. Эволюция плоского газоподобного облака в потенциальном поле. ВИНТИ. № 621 – В2008, 21 с., М., МГОУ, 2008.
12. Терлецкий Я. П. Статистическая физика. «Высшая школа», М. 1973.

EVOLUTION GAS-DISPERSED CLOUDS WITH A VISCOUS GAS PHASE IN THE FIELD OF POTENTIAL FORCES.

A. Golov

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. For microscopic model of system of disperse particles non-stationary statistical function of distribution is found in the quasicontinuous viscous environment and in the field of potential forces. Expression of density of a cloud of the disperse particles effectively represented by the quasicontinuous environment in sense of the kinetic theory is received. The basic laws of evolution of a wide flat cloud are revealed.

Keywords: non-stationary statistical function of distribution, microscopic model, disperse particles, viscous environment, field of potential forces.

К ВОПРОСУ О ПОГЛОЩЕНИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

С.О. Гладков

*Московский государственный областной университет,
105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а.
Email: sglad@newmail.ru*

Аннотация. Показано, что для размеров наночастицы $R \ll \lambda, l_{ee}$ сечение поглощения следует вычислять с помощью квантово – механических принципов и считать температуру электронов равной нулю. В подобных условиях функцию распределения электронов вводить не правомерно, а сечение поглощения, как показывает чисто квантовый расчет, оказывается довольно сложной функцией от частоты внешнего поля.

Ключевые слова: наночастица, сечение поглощения.

В последнее время направление исследования, связанное с изучением физических свойств нанобъектов, получает все более и более широкое приложение в разнообразных технических целях. Это и понятно, поскольку теоретически предсказанные особенности свойств подобных мелкодисперсных структур оказываются порой чрезвычайно интересными и уникальными. Последнее, в частности, касается металлических частиц, об одном из свойств которых мы сейчас и поговорим.

Задача, которой посвящена настоящая статья, напрямую связана с изучением поглощения энергии внешнего электромагнитного (сокращенно ЭМ) поля металлической наночастицей с диаметром $D = 2R$ (где R – радиус) при произвольном соотношении между ним и главной характеристикой поглощательной способности металла – глубиной скин – слоя ξ , который, как известно [1 – 3], есть $\xi = \frac{c}{\sqrt{2\pi\sigma\omega}}$, где c – скорость

света в вакууме, σ – проводимость металла, ω – частота внешнего переменного ЭМ поля.

Мы будем подразумевать, что речь идет об ансамбле частиц, но среднее расстояние между ними L удовлетворяет неравенству $D \ll \lambda \ll L$, а потому рассеяние и поглощение электромагнитного излучения каждой из них можно рассматривать по отдельности.

Важно также подчеркнуть, что очень существенное влияние на поглощение оказывает геометрия частицы. Именно учет формы частицы позволяет вычислить зависимость сечения поглощения от соотношения между ξ и R в общем случае.

Кроме того, характер поглощения сильно зависит и от соотношения между длиной свободного пробега электрона l_{ee} и линейным размером частицы D .

В настоящей работе мы проанализируем только случай, когда длина свободного пробега электрона велика, то есть $l_{ee} \gg D$.

В отсутствии внешних переменных полей мелкодисперсная металлическая частица находится в состоянии термодинамического равновесия с окружающей средой, то, несмотря на то, что время баллистического движения электрона $\tau_b = \frac{2R}{u_F}$ значительно

меньше времени электрон – электронных столкновений τ_{ee} , они по прошествии некоторого промежутка времени τ (причем $\tau \gg \tau_{ee} \gg \tau_b$) все равно термализуются и приобретают равновесную температуру окружающей среды T , которая всегда может считаться термостатом. Однако, для этого электронам необходимо большое количество раз N^* столкнуться с внутренней поверхностью частицы, которая находится в состоянии термодинамического равновесия с окружающей средой.

Поэтому по физическому смыслу время $\tau = N^* \tau_n$, где τ_n – время контакта с поверхностью, в течение которого энергия электрона ε чуть – чуть изменяется на величину $\delta\varepsilon \ll \varepsilon$, а необходимое число столкновений N^* можно найти из условия $\varepsilon \pm N^* \delta\varepsilon \sim k_B T$ (знак + берется, если $\varepsilon < k_B T$, знак –, если $\varepsilon > k_B T$).

Совершенно иная ситуация будет наблюдаться во внешних переменных полях.

Итак, пусть все находится в состоянии термодинамического равновесия, и в какой – то момент времени на систему начинает действовать внешнее переменное электромагнитное поле, которое мгновенно выводит электроны из состояния равновесия. Благодаря своему постоянному периодическому воздействию внешнее ЭМ поле не позволяет (в случае малых частиц) электронам вернуться в состояние равновесия.

Это означает только одно, что при условии $l_{ee} \gg R$ мы никогда не сможем ввести в рассмотрение фермиевскую функцию распределения электронов несмотря на то, что сама наночастица под воздействием ЭМ поля нагревается, а электроны, ударяясь о ее поверхность, не успевают термостатироваться (см. [4, 5]).

Последнее позволяет подойти к решению проблемы вычисления сечения поглощения на языке квантовой механики, считая электроны квантовым газом, заключенным в некоторый объем $V = \frac{4\pi}{3} R^3$ и находящимся под внешним воздействием.

Для решения задачи введем в рассмотрение нерелятивистский квантовый оператор взаимодействия электронов с классическим ЭМ полем в виде

$$H_{\text{int}} = -i \frac{e\eta}{2mc} \int [(\nabla \psi^*)\psi - \psi^* \nabla \psi] d^3x, \quad (1)$$

где операторы $\psi(\psi^*)$ можно представить в виде разложения по плоским волнам, игнорируя амплитуду Блоха $u_p(\vec{k})$, обязанную проявлению действия периодического кристаллического поля $V(\vec{k})$.

Это пренебрежение обязано малости наночастицы и «спасает» нас от чрезмерной громоздкости вычислений.

Благодаря слабости взаимодействия электронов друг с другом их движение является свободным, а потому для нормированных на объем частицы операторов волновых функций имеем:

$$\psi(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p c_p e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}}, \quad (2)$$

$$\psi^*(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p c_p^+ e^{-i \frac{\vec{p} \vec{p}}{\eta}},$$

где $c_p, (c_p^+)$ – операторы уничтожения (рождения) электрона в состоянии p , где под p подразумевается весь набор квантовых чисел электрона.

Поскольку спиновое взаимодействие электрона с переменным магнитным полем для нашей задачи мало, то под p мы будем подразумевать только импульсы свободного электрона $\vec{p}$.

Далее. Разложим векторный потенциал $\vec{A}(\vec{r})$ в ряд Фурье

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} (\vec{A}_{\vec{q}} e^{i \vec{q} \vec{r}} + \vec{A}_{\vec{q}}^* e^{-i \vec{q} \vec{r}}), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \vec{A}_{\vec{q}} &= \int \vec{A}(\vec{r}) e^{-i \vec{q} \vec{r}} d^3 x, \\ \vec{A}_{\vec{q}}^* &= \int \vec{A}(\vec{r}) e^{i \vec{q} \vec{r}} d^3 x. \end{aligned}$$

Подставив разложения (2) и (3) в гамильтониан взаимодействия (1), найдем

$$H_{\text{int}} = -\frac{e}{2mcV} \sum_{\vec{p}, \vec{p}', \vec{q}} (\vec{p} + \vec{p}') [c_p^+ c_{p'} A_q^* \Delta(\vec{p} - \vec{p}' + \vec{q}) + c_p^+ c_{p'} A_q \Delta(\vec{p} - \vec{p}' - \vec{q})], \quad (4)$$

где $\Delta(x)$ – ступенчатая функция со свойствами $\Delta(x) = 1$, если $x \geq 0$ и $\Delta(x) = 0$, если $x < 0$. Она получилась в результате интегрирования по объему частицы:

$$\int_V e^{i \left(\vec{q} + \frac{\vec{p}' - \vec{p}}{\eta} \right) \vec{r}} d^3 x = V \Delta(\vec{p}' - \vec{p} + \vec{q}).$$

С помощью известного определения [6] сечение можно ввести как

$$\sigma_{\bar{\nu}\bar{\nu}e} = \frac{W_{pp'}}{c} V. \quad (5)$$

В результате довольно длинных выкладок, находим:

$$\bar{\sigma}_{\bar{\nu}\bar{\nu}e}(\omega, R) = \frac{e^2 Z(\omega, R) \sqrt{m}}{2^5 \pi c^3 \eta^4 \varepsilon_F \sqrt{\varepsilon_F}} (\eta \omega)^3 g(x), \quad (6)$$

где $x = \frac{\varepsilon_F}{\eta \omega}$, а функция

$$g(x) = \left[(2x+1)^2 - 1 \right]^{\frac{3}{2}} - \left[(2x-1)^2 - 1 \right]^{\frac{3}{2}} - (2x+1)\sqrt{(2x+1)^2 - 1} - (2x-1)\sqrt{(2x-1)^2 - 1} + \operatorname{arch}(2x+1) - \operatorname{arch}(2x-1) \quad (7)$$

Вводя далее энергию фотона по формуле $\frac{E_0^2 V}{4\pi} = \frac{E_0^2 R^3}{3} = \eta\omega$, получаем окончательно:

$$\bar{\sigma}_{\tilde{n}\tilde{a}\tilde{e}}(\omega, R) = \frac{2^7 \pi^2 e^2 S(\omega, R) \omega}{3c\sigma\alpha\eta} R^3, \quad (8)$$

где функция $S(\omega, R) = g(x)Z(\omega, R)$.

Оценим величину $\bar{\sigma}_{\tilde{n}\tilde{a}\tilde{e}}$. Положим, например, что радиус частицы $R = 10^{-5} \tilde{n}\tilde{l}$, частота $\omega = 10^{12} \tilde{n}^{-1}$, межатомное расстояние $a = 10^{-8} \tilde{n}\tilde{l}$, скорость Ферми $u_F = 3 \cdot 10^7 \frac{\tilde{n}\tilde{l}}{\tilde{n}}$, заряд электрона $e = 4.48 \cdot 10^{-10} SGS$, масса электрона $m = 10^{-27} \tilde{a}$ и скорость света $\tilde{n} = 3 \cdot 10^{10} \frac{\tilde{n}\tilde{l}}{\tilde{n}}$.

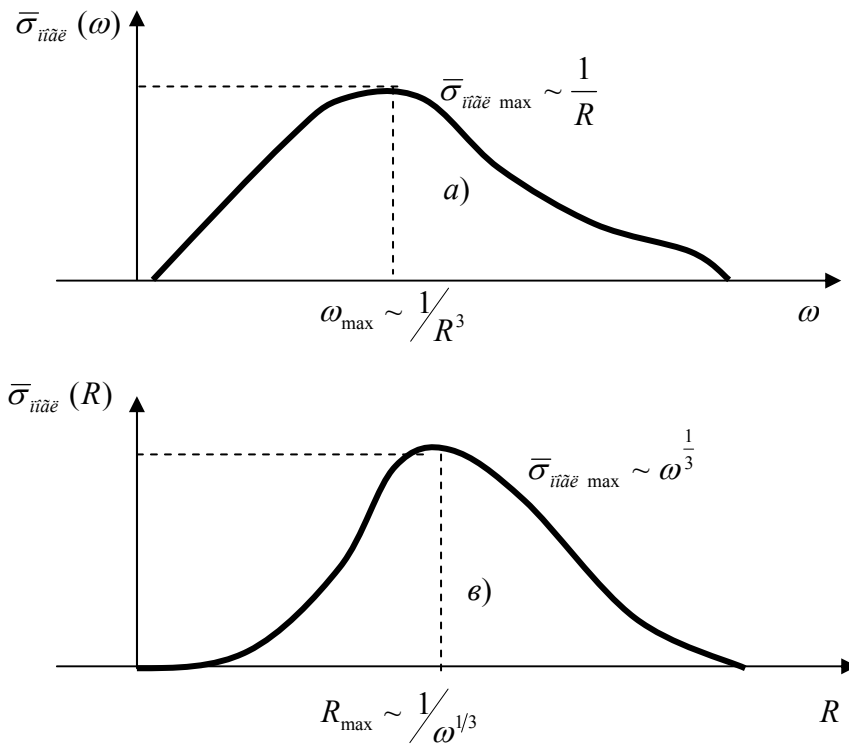


Рис. 1. Сечение поглощения наночастицей электромагнитного излучения в случае, если ее размер мал по сравнению с длиной свободного пробега ($R \ll l_{ee}$) в виде функции частоты (а) и размера частицы (б).

В результате оказывается, что $\zeta = 8.64$, показатель экспоненты мал и в итоге

сечение будет примерно равно $\bar{\sigma}_{\tilde{\nu}\tilde{\nu}\tilde{e}} = 3.5 \cdot 10^{-11} \tilde{n} \tilde{l}^2$. Приведенная оценка прекрасно согласуется с результатами экспериментов.

Качественные зависимости сечения поглощения от частоты и от радиуса иллюстрируются в этом случае рис. 1а, б.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Абрикосов А.А.* Введение в теорию нормальных металлов. М.: Наука, 1969. 240 с.
2. *Лифшиц И.М., Азбель М.Я., Каганов М.И.* Электронная теория металлов. М.: Наука, 1971. 415 с.
3. *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974. 472 с.
4. *Gladkov S.O.* The kinetics of nuclear magnetically ordered systems. Physics Reports, 1989. V. 182. N4, 5. P. 211 – 364.
5. *Gladkov S.O.* Dielectric properties of porous media. Springer. 2003. 261 p.
6. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Т. 3. М.: Наука, 1974. 750 с.

ON QUESTION OF ELECTROMAGNETIC RADIATION'S ABSORPTION BY METALLIC NANOPARTICLES

S. GLADKOV

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. It's shown at size of nanoparticles $R \ll \lambda, l_{ee}$, where λ – a wave length of radiation and l_{ee} – electron's free length, the section of absorption due to principles of quantum mechanics one should calculate. In this case the temperature of electrons is equal to zero and the function of distribution are keep out. A section of absorption (as quantum calculations are showed) is very complex function of external field's frequency.

Keywords: nanoparticles, section of absorption.

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ВРАЩАТЕЛЬНУЮ ВЯЗКОСТЬ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Д.Л. Богданов, Э.В. Геворкян, Е.М. Банникова,
Ю.Н. Обыденков, Н.Н. Барабанова, А.Н. Ларионов

*Московский государственный областной университет (МГОУ)
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Экспериментально исследовано воздействие вращающегося магнитного поля на анизотропию коэффициента поглощения ультразвука в нематических жидких кристаллах. Предложен возможный механизм зависимости коэффициента вращательной вязкости от давления и температуры.

Ключевые слова: магнитное поле, анизотропия, коэффициент поглощения ультразвука, нематические жидкие кристаллы.

Жидкие кристаллы находят широкое применение в качестве рабочего тела электрооптических матриц устройств отображения информации, гидроакустических приборов навигации, различного рода датчиков. Быстродействие таких устройств определяется временем τ_0 ориентационной релаксации нематических жидких кристаллов (НЖК). Эта величина прямо пропорциональна коэффициенту вращательной вязкости γ_1 НЖК, которая зависит от строения молекул нематика, характера межмолекулярных взаимодействий и определяет особенности динамических процессов, связанных с вращением молекул НЖК вокруг их короткой оси. Движение жесткой анизометрической молекулы описывается тремя координатами центра масс и тремя углами Эйлера. Уравнения гидродинамики НЖК (нематодинамики), характеризующие медленное по сравнению с молекулярными процессами, пространственное изменение параметров, могут быть получены из законов сохранения. Основным отличием гидродинамики НЖК от гидродинамики изотропных жидкостей является наличие дополнительной переменной - директора, единичного вектора, направление которого совпадает с направлением преимущественной ориентации длинных осей молекул.

Существует целый ряд практически эквивалентных подходов к описанию динамических свойств жидких кристаллов. Основанное на классической механике микроскопическое приближение, предложенное Лесли и Эриксоном [1,4], наиболее удобно для анализа ориентационных процессов в НЖК в меняющихся внешних электрических и магнитных полях. В теории Лесли - Эриксона предполагается, что динамические свойства НЖК могут быть описаны полем скоростей $\vec{u}(\vec{r}, t)$, характеризующим движение молекул, и единичным вектором $\vec{n}(\vec{r}, t)$ (директором).

В магнитном поле, вращающемся в плоскости x - y вокруг оси z (то есть $H_x = H \cos \omega_H t$, $H_y = H \sin \omega_H t$, $H_z = 0$, где ω_H - угловая скорость вращения магнитного поля напряженностью H , рис. 1), уравнение движения директора [5] имеет вид:

$$\gamma_1 \frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta \chi (H_x^2 - H_y^2) \sin \psi \cos \psi - \left(\alpha_2 \frac{\partial u}{\partial y} - \Delta \chi H_x H_y \right) \sin^2 \psi = 0 ,$$

где $\Delta\chi$ - анизотропия магнитной восприимчивости, α_i - диссипативные коэффициенты, если $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$. Если линейные размеры образца значительно превышают магнитную длину когерентности $\xi = \sqrt{K/\Delta\chi H^2}$, то влиянием стенок на ориентацию директора в объеме можно пренебречь. В этом случае форма измерительной камеры не существенна и поле директора $\vec{n}$ практически однородно. В камере отсутствуют гидродинамические потоки, а уравнение движения директора преобразуется к виду:

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \omega_H h^2 = q, \quad (1)$$

где $h = \text{tg}(\omega_H t - \psi)$, $q = \omega_H \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta\chi H^2}{\gamma_1 \omega_H^2} \right) \right]$.

В этом плане перспективным представляется применение акустического метода исследования НЖК, поскольку наряду с возможностью изучения ориентационной структуры в больших объемах образца (то есть в условиях, когда зондируемое расстояние на несколько порядков превышает магнитную длину когерентности ξ) этот метод дает полезную информацию для установления связей между акустическими и молекулярно-кинетическими параметрами, характеризующими ориентационную релаксацию, являющимися функциями температуры и давления. Настоящая работа посвящена акустическим исследованиям влияния P , T — термодинамических параметров состояния на кинетику молекулярных процессов, связанных с ориентационной релаксацией в НЖК во вращающихся магнитных полях.

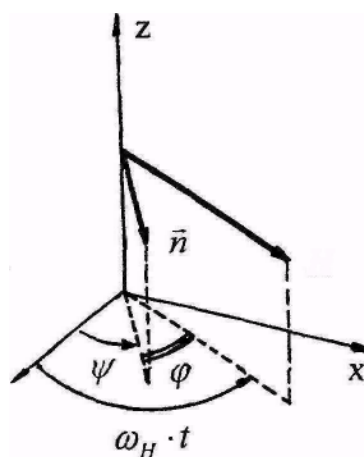


Рис. 1. Диаграмма, характеризующая фазовый сдвиг директора и вектора напряженности магнитного поля

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследование акустических свойств НЖК в меняющихся магнитных полях выполнены импульсным методом фиксированного расстояния [6], позволяющим надежно определять угловые зависимости коэффициента поглощения ультразвука α и угол между вектором индукции магнитного поля и директором. Фазовая характеристика коэффициента поглощения ультразвука $\alpha(\omega_H t)$ обрабатывалась на персональном компьютере на вход которого одновременно поступали сигналы датчика угла между волновым вектором и вектором индукции магнитного поля. Частота вращения магнитного поля изменялась в диапазоне от нуля до 1,9 рад/с. Корпус измерительного автоклава (рис. 2), выполненный из диамагнитной нержавеющей стали марки ЮХ17Н13М2Т, содержит полость для исследуемого вещества объемом $6,6 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3$. Давление, создаваемое гидравлическим прессом МП-2500, передается в измерительную камеру сильфоном и измеряется с абсолютной погрешностью $5 \cdot 10^4$ Па. Конструкция узлов измерительной камеры и уплотнений позволяет достигать в рабочей полости давления $2 \cdot 10^8$ Па. Выбранное соотношение значений зондируемого расстояния (10^{-2} м), частоты ультразвука (2,9 МГц), длительности импульсов (7,5 мкс) и радиуса излучателей (6,5 мм) позволяет исключить ошибки, вызванные интерференцией прямого и отраженного сигналов, протяженностью спектра импульсов, а также расширением пучка ультразвука [7].

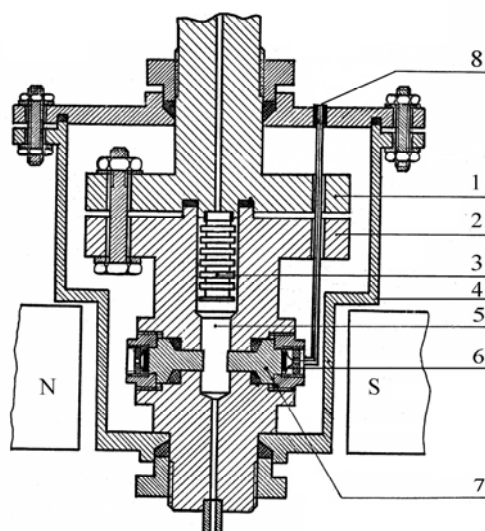


Рис. 2. Эскиз измерительной камеры: 1, 2 - корпус измерительной камеры, 3 - сильфон, 4 - оболочка термостата, 5 - полость с НЖК, 6 - пьезоэлемент, 7 - линии задержки, 8 - высокочастотный ввод

Через линии задержки, выполненные из стали ЮХ17Н13М2Т, ультразвуковой сигнал поступает в измерительную камеру. Влиянием линий задержки на ориентацию исследуемого образца можно пренебречь, поскольку выбранная длина акустического пути на несколько порядков превышает магнитную длину когерентности. Однородная ориентация НЖК в статическом режиме обеспечивалась магнитным полем индукцией 0,15 - 0,3 Тл, превышающей значение индукции насыщения (0,07 - 0,1 Тл). Термостатирование измерительной камеры осуществлялось по двухконтурной схеме, что позволи-

ло уменьшить временную нестабильность температуры исследуемого вещества, сведя ее к величине, не превышающей 0,05 К.

В целом относительная погрешность определения параметра $\Delta\alpha(\theta)$ (где θ - угол между волновым вектором и вектором магнитной индукции, $\Delta\alpha(\theta) = \alpha'' - \alpha(\theta)$, α'' и $\alpha(\theta)$ - коэффициенты поглощения ультразвука при $\theta=0$ и $\theta \neq 0$ соответственно) во вращающемся магнитном поле не превышает 3 %. Абсолютная погрешность измерения фазового сдвига между директором и вектором индукции магнитного поля составляет 0,5°. Погрешность определения отношения $\gamma_1/\Delta\chi$ составляет 3 %.

В качестве объектов исследования выбраны н-(п-метоксибензилиден)-п-бутиланилин (МББА) и смесь жидких кристаллов Н-96 (смесь п-н-бутил-н-гексилоксиазоксибензола, п-н-бутил-н-метоксиазоксибензола, н-бутил-п-(п-гексилоксифенилокси-карбонил)-фенилкарбоната и н-бутил-п-(п-этоксифенилоксикарбонил)-фенилкарбоната). Данная смесь характеризуется широким температурным диапазоном существования нематической фазы, что позволяет проводить исследования в условиях отсутствия влияния предпереходных эффектов на результаты измерений. В исследованных соединениях зависимость температуры фазового перехода НЖК-изотропная жидкость (ИЖ) от давления носит линейный характер: $T_c(P) = T_{0c} + kP$, где T_{0c} — температура фазового перехода НЖК-ИЖ при атмосферном давлении, равная 315,4 К для МББА и 348,0 К для Н-96, k — коэффициент, равный $2,9 \cdot 10^{-7}$ К·Па⁻¹ для МББА и $2,7 \cdot 10^{-7}$ К·Па⁻¹ для Н-96. Таким образом, диапазон температур нематической фазы исследованных веществ включает комнатную температуру, что обуславливает перспективность их практического использования.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Решение уравнения движения директора (1) определяет поведение директора в трех режимах: синхронном ($\omega_H < \omega_0$, где $\omega_0 = \Delta\chi/2\gamma_1$ - критическая частота), промежуточном ($\omega_H = \omega_0$) и асинхронном ($\omega_H > \omega_0$).

При $\omega_H < \omega_0$, решение уравнения (1) описывает движение директора в синхронном режиме. В этом случае директор НЖК вращается вокруг короткой оси с той же угловой скоростью, что и магнитное поле (ω_H), но с фазовым запаздыванием φ . Значение угла φ возрастает при повышении давления или угловой скорости вращения магнитного поля, а также при понижении температуры или уменьшении индукции магнитного поля.

Второе решение уравнения (1) определяет поведение директора в магнитном поле, вращающемся с угловой скоростью $\omega_H = \omega_0$. При этом движение директора описывается уравнением:

$$\operatorname{tg}(\omega_H t - \psi) = \varepsilon^2 \omega_H t (\varepsilon \omega_H t + 1)^{-1}, \quad (2)$$

где

$$\varepsilon = \Delta\chi H^2 / 2\gamma_1 \omega_H. \quad (3)$$

Поскольку при $\omega_H = \omega_0$ величина ε равна единице, то согласно уравнению (2), фазовый сдвиг асимптотически приближается к значению $\pi/4$ (пунктирные линии на рис. 3).

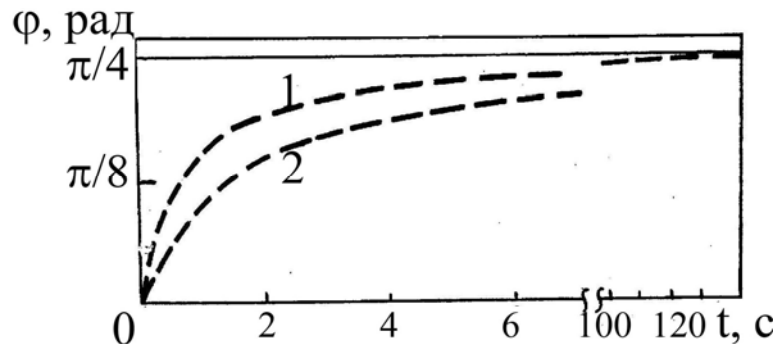


Рис. 3. Зависимость фазового сдвига от времени в МБА:
1 - при $T=296,7$ К, $P=2 \cdot 10^7$ Па, $\omega_H=\omega_K=0,38$ рад/с;
2 - при $T=310,2$ К, $P=5 \cdot 10^7$ Па, $\omega_H=\omega_K=0,45$ рад/с

В асинхронном режиме временная зависимость фазового сдвига описывается уравнением:

$$\operatorname{tg}(\omega_H t - \psi) = \frac{\operatorname{tg}(\omega_H t \sqrt{1 - \varepsilon^2})}{\sqrt{1 - \varepsilon^2} + \varepsilon / \operatorname{tg}(\omega_H t \sqrt{1 - \varepsilon^2})}. \quad (4)$$

Подстановка уравнения (4) в выражение зависимости коэффициента поглощения ультразвука от угла θ между директором и волновым вектором

$$\Delta\alpha(\theta) = a \cos^2 \theta + b \cos^4 \theta \quad (5)$$

позволяет получить фазовую характеристику коэффициента поглощения ультразвука:

$$\Delta\alpha(\omega_H t) = a \sin^2 \left[\omega_H t - \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{tg}(\omega_H t X)}{X + \varepsilon \operatorname{tg}(\omega_H t X)} \right] + b \sin^4 \left[\omega_H t - \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{tg}(\omega_H t X)}{X + \varepsilon \operatorname{tg}(\omega_H t X)} \right] \quad (6)$$

где $X = \sqrt{1 - \varepsilon^2}$.

Частотный спектр временной зависимости (6) содержит частоту $\omega_0 = 2\pi / \tau_0$ (где τ_0 - время ориентационной релаксации) и низкочастотную составляющую частотой ω_- (рис.4). В асинхронном режиме средняя угловая скорость вращения директора определяется уравнением:

$$\frac{d\bar{\varphi}}{dt} = \omega_H - \sqrt{\omega_H^2 - \omega_0^2} = \omega_- \quad (7)$$

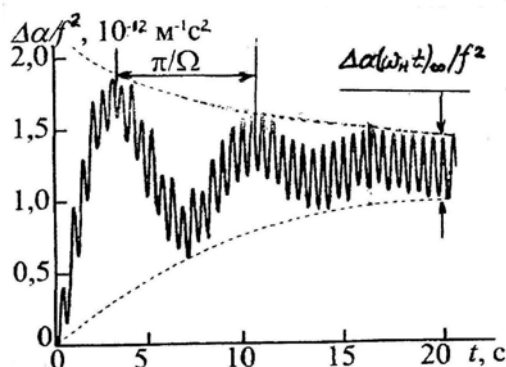


Рис. 4. Фазовая характеристика коэффициента поглощения ультразвука в Н-96 в асинхронном режиме при нормальном давлении, температуре 290,8 К в магнитном поле индукцией 0,29 Тл, вращающемся с частотой 0,23 рад/с.

Сравнение значений ω_- , рассчитанных согласно соотношению (7), и полученных экспериментально частот Ω низкочастотной составляющей фазовой характеристики $\Delta\alpha(\omega_H t)$ (рис. 4) показывает их совпадение по порядку величины (табл. 1). Это позволяет применить выражение (7) для определения параметра ω_0 . Вводя обозначение $n\omega_- = \omega_H$, выражение (7) можно представить в виде:

$$\omega_0 = \frac{\omega_H \sqrt{2n-1}}{n}. \quad (8)$$

Из уравнения (8), в котором значения ω_H и $n = \omega_H / \Omega$ определяются экспериментально, может быть рассчитана частота ω_0 . Значения ω_0 , рассчитанные с помощью соотношения (8), в пределах погрешности эксперимента совпадают с частотами смены режимов, определенными экспериментально (табл. 2). Величина Ω является функцией температуры, давления, частоты вращения и индукции магнитного поля.

Таблица 1

Экспериментальные значения ω_k при $P = 10^5$ Па

$\omega_H, \text{рад/с}$	$T, \text{К}$	297,4	302,2	305,2	308,2	312,2
1,14	$\Omega, \text{рад/с}$	0,14	0,23	0,30	-	-
1,14	$\omega_-, \text{рад/с}$	0,09	0,17	0,26	-	-
1,53	$\Omega, \text{рад/с}$	0,10	0,16	0,22	0,27	0,44
1,53	$\omega_-, \text{рад/с}$	0,07	0,13	0,18	0,26	0,41
1,85	$\Omega, \text{рад/с}$	0,08	0,12	0,17	0,23	0,38
1,85	$\omega_-, \text{рад/с}$	0,05	0,11	0,16	0,21	0,36

Таблица 2

Экспериментальные значения ω_k (в скобках приведены теоретические значения ω_0)

ω_H , rad/c	$T = 305,2 \text{ K}$		$T = 310,2 \text{ K}$		$T = 315,4 \text{ K}$	
	$P = 2 \cdot 10^7 \text{ Па}$	$P = 4 \cdot 10^7 \text{ Па}$	$P = 0,01 \cdot 10^7 \text{ Па}$	$P = 2 \cdot 10^7 \text{ Па}$	$P = 2 \cdot 10^7 \text{ Па}$	$P = 4 \cdot 10^7 \text{ Па}$
0,92	0,54 (0,53)	- -	- -	0,58 (0,57)	- -	0,76 (0,73)
1,14	0,58 (0,55)	0,41 (0,39)	0,80 (0,84)	0,62 (0,59)	0,98 (0,98)	0,83 (0,80)
1,53	- -	- -	0,90 (0,87)	- -	1,07 (1,07)	0,78 (0,72)

Одной из особенностей асинхронного режима является затухающий характер низкочастотной составляющей временной зависимости коэффициента поглощения ультразвука (рис. 4). Затухание низкочастотной составляющей фазовой характеристики анизотропии коэффициента поглощения ультразвука обусловлено переходными процессами, связанными с уменьшением ориентированности большого объема НЖК при $\omega_H > \omega_K$. В образце первоначально однородно ориентированном, помещенном затем в магнитное поле, вращающееся с частотой $\omega_H > \omega_K$, амплитуда низкочастотной составляющей убывает по экспоненциальному закону: $A = A_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_\Omega}\right)$. После завершения переходного процесса длительностью

$$\tau_\Omega = c\omega_H(\omega_0\Omega)^{-1} \quad (9)$$

устанавливается неоднородное распределение директора. Параметр $c\omega_H$ в исследованных веществах не зависит от частоты вращения и индукции магнитного поля. Сравнение экспериментальных значений τ_Ω с результатами, полученными согласно (9), указывает на согласие выводов гидродинамики с экспериментальными результатами (что отражается в табл. 3).

Таблица 3

Экспериментальные значения ω_H при $T=297,4 \text{ K}$

P , МПа	ω_H , rad/c				
	0,68	0,77	0,91	1,14	1,53
0,1	- (-)	11 (11)	12 (14)	28 (24)	43 (44)
10	15 (12)	20 (15)	24 (23)	43 (44)	52 (59)
20	22 (18)	26 (24)	29 (33)	47 (52)	79 (87)
30	28 (28)	39 (37)	45 (49)	61 (64)	- (-)
40	42 (42)	56 (59)	78 (77)	122 (132)	- (-)

Поскольку продолжительность переходного процесса $\tau_\Omega \gg \omega_-^{-1}$ достаточно велика, в начальной фазе асинхронного режима возможно более точное, чем в синхронном режиме экспериментальное определение значения ω_0 , а следовательно и коэффициента

вращательной вязкости. Это особенно важно для НЖК и их смесей с большой вращательной вязкостью, а также в низкотемпературной области нематической фазы, где синхронный режим не удастся реализовать.

Повышение давления или понижение температуры приводит к уменьшению частоты ω_0 (рис. 5), причем повышение давления сопровождается уменьшением расхождения значений ω_K , определенных экспериментально, и значений ω_0 , рассчитанных согласно уравнению (8), что, возможно, связано с формированием более однородной ориентационной структуры при повышении давления. Увеличение индукции магнитного поля приводит к возрастанию величины ω_0 .

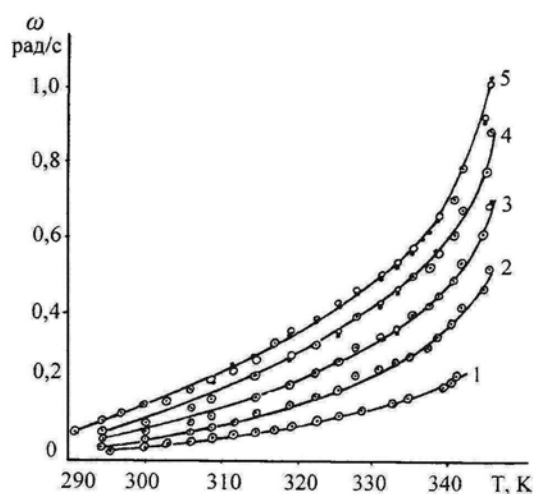


Рис. 5. Зависимость частоты ω_0 (•) и ω_0 (°) от температуры в магнитном поле индукцией: 1 - 0,15 Тл, 2 - 5...0,29 Тл, при давлении: ($P \cdot 10^{-7}$ Па): графики 1 и 5 (0,01); график 2 (6); график 3 (3); график 4 (1)

Значения ω_0 могут быть использованы для определения отношения коэффициента вращательной вязкости к анизотропии магнитной восприимчивости:

$$\frac{\gamma_1}{\Delta\chi} = \frac{H^2}{2\omega_0} \quad (10)$$

Для расчета коэффициента вращательной вязкости использованы значения $\Delta\chi$, представленные в работах [8,9] при атмосферном давлении. Значения $\Delta\chi$ при высоких давлениях рассчитывались исходя из предположения о том, что зависимость $\Delta\chi(P)$ обусловлена зависимостью температуры просветления (T_C) от давления. Правильность данного предположения подтверждается тем, что рассчитанные таким образом значения коэффициента вращательной вязкости в МБА при высоких давлениях совпадают с аналогичными значениями γ_1 , полученными непосредственно методом крутильных колебаний при различных давлениях [10].

Уменьшение температуры или повышение давления сопровождается увеличением коэффициента вращательной вязкости (рис. 6).

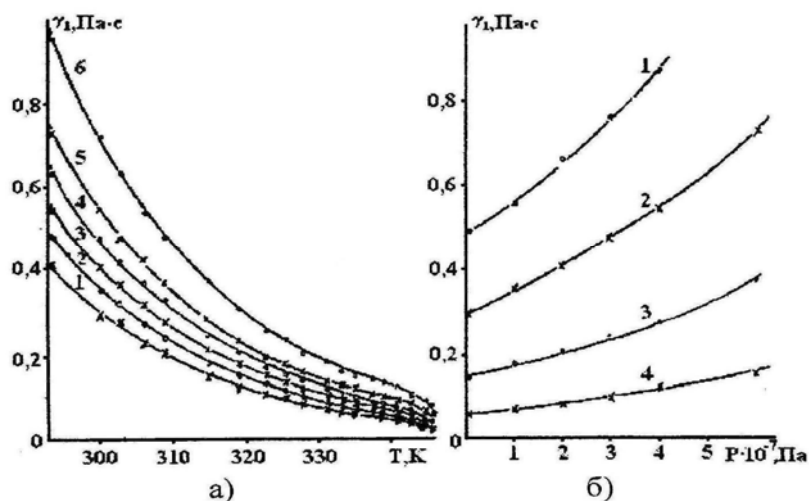


Рис. 6. Зависимость коэффициента вращательной вязкости:
 а) от температуры при давлении: 1 - 0,1 МПа; 2 - 1 МПа; 3 - 2 МПа;
 4 - 3 МПа; 5 - 4 МПа; 6 - 5 МПа;
 б) от давления при температуре: 1 - 290,8 К; 2 - 299,9 К;
 3 - 314,4 К; 4 - 335,1 К.

Анализ зависимости коэффициента вращательной вязкости от температуры и давления выполнен в рамках молекулярной модели Диого - Мартинша [11]. Она основана на предположении о том, что вращательная вязкость связана с ориентационным движением молекул, которое возможно при наличии «свободного» объема и энергии, достаточной для преодоления потенциального барьера

$$E = D(\theta)_{\max} - D(\theta)_{\min} = 3A/(2mv^2) = \varepsilon S, \quad (11)$$

где $D(\theta)$ - потенциал Майера - Заупе [12], ε - параметр вещества, S - параметр ориентационного порядка, A - подгоночный параметр, m - координационное число, v - молярный объем. Таким образом, выражение, отражающее зависимость коэффициента вращательной вязкости от P , T - термодинамических параметров состояния, должно содержать сомножитель, учитывающий вероятность наличия свободного пространства, достаточного для вращения молекулы, а также сомножитель, учитывающий вероятность наличия у молекулы энергии, необходимой для преодоления потенциального барьера:

$$\gamma_1(P, T) = A_1 \left(1 - \frac{T'}{T_1^*} \right)^{2\beta} \exp \left(\frac{B}{T' - T_0} \right). \quad (12)$$

Здесь T_0 - температура, при которой коэффициент γ_1 , расходится и которая не зависит от давления, T_1^* - характеристическая температура при атмосферном давлении, значения T' и T^* определяются формулами:

$$\frac{1}{T'} = \frac{1}{T} - \frac{1}{T^*} + \frac{1}{T_1^*}, \quad (13)$$

$$T^* = T_0^* \left(\frac{P}{a} + 1 \right)^C. \quad (14)$$

Коэффициенты уравнений (12) - (14), рассчитанные методом наименьших квадратов для Н-96, равны: $A_I=1,52$ Па·с, $a=270$ Па, $C=0,6$, $T_0^*=345,3$ К, $B=66,5$ К, $T_0=281,9$ К, $\beta=5,48$. Зависимости коэффициента вращательной вязкости от температуры и давления, полученные согласно (12), и изображенные сплошными линиями на рис. 6, согласуются с экспериментальными значениями, представленными точками. Увеличение коэффициента вращательной вязкости при повышении давления или понижении температуры связано с уменьшением свободного объема, значение которого изменяется для Н-96 от $3,8 \cdot 10^{-5}$ м³/моль при $\Delta T_c=3$ К до $3,2 \cdot 10^{-5}$ м³/моль при $\Delta T_c=57$ К.

Таким образом, исследования фазовой характеристики коэффициента поглощения ультразвука во вращающемся магнитном поле могут быть использованы для определения коэффициента вращательной вязкости. Полуфеноменологическая теория Диого - Мартинша удовлетворительно описывает зависимость коэффициента вращательной вязкости от температуры и давления. Результаты изучения динамики ориентационных процессов в НЖК и их смесях в асинхронном режиме согласуются с выводами нематодинамики.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Leslie P.M.* Some constitutive equations for anisotropic fluids //Quart. Journ. Mech. and Appl. Math. 1966. V. 19. № 3. 3. 357-370.
2. *Forster D.* Microscopic theory of flow alignment in nematic liquid crystals //Phys. Rew. Lett. 1974. V. 32. № 21. P. 1161-1164.
3. *Martin P.C., Parodi O., Pershan P.S.* Unified hydrodynamic theory for crystals, liquid crystals, and normal fluids // Phys. Rew. 1972. V. 6. № 6. P. 2401-2420.
4. *Ericksen J'L.* Continuum theory of liquid crystals of nematic type //Mol. Cryst. And Liq. Cryst. 1969. V. 7. № 1-4. P. 153-164.
5. *Stephen M.J., Straley J.P.* Physics of liquid crystals //Rev. Mod. Phys. 1974. V. 46. № 4. P. 617-704.
6. *Богданов В.Л., Геворкян Э. В., Лагунов А. С.* Акустические свойства жидких кристаллов в вращающемся магнитном поле.// Акустический журнал. Т. 26 № 1. 1980. С. 28
7. *Богданов Д.Л., Буланак В.И., Геворкян Э.В.* Способ определения физико-химических характеристик жидких кристаллов.//А.С. № 1626145. 1990.
8. *Poggi Y., Aleonard R.* Mesure de l'anisotropie diamagnetique d'une configuration orientee par un champ magnetique.//C.R. Ac-ad. Sci. Serie B. V. 276. P. 643-645.
9. *Каролик В.А., Жук И.П.* Экспериментальное исследование температурной зависимости восприимчивости нематических жидких кристаллов и их смесей // Инженерно-физический журнал. Т. XXXVII. № 2.1979. С. 341-344.

10. *Dorrer H., Knepe H., Kuss E., Schneider F.* Measurement of rotational viscosity, 7,, of nematic liquid crustals under high pressure// Liquid crystals. V. 1. № 6. P. 573-582.
11. *Diogo A.C., Martins A.F.* Thermal behavior of the twist viscosity in a series of homologous nematic liquid crystals.// Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1981. V. 66, P.133-146.
12. *Maier W., Saupe A.* Eine einfache molecular- statistische theorie der nematischen kristallinflüssigen phase // Z. Naturforschg. Teil 1. V. 14-a. JVs 10.1959. P. 882-889.

EFFECT OF PRESSURE ON THE ROTATIONAL VISCOSITY OF NEMATIC LIQUID CRYSTALS

**D. Bogdanov, E. Gevorkyan, E. Bannikova,
J. Obidenkov N. Barabanova, A. Larionov**

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. Experimentally investigated the impact of the rotating magnetic field on the anisotropy of the absorption coefficient of ultrasound in nematic liquid crystals. A possible mechanism of the coefficient of rotational viscosity on the pressure and temperature.

Keywords: magnetic field, anisotropy, absorption coefficient of ultrasound, nematic liquid crystals.

УДК 532.783

ИССЛЕДОВАНИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ СВОЙСТВ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА ЖК–1282 В ОКРЕСТНОСТИ ТЕМПЕРАТУРЫ ПРОСВЕТЛЕНИЯ АКУСТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

В.В. Сурнычев, В.В. Беляев, Е.М. Банникова

*Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а*

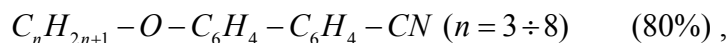
Аннотация. Представлены результаты экспериментальных исследований вязкоупругих свойств нематического жидкого кристалла (НЖК) ЖК-1282 методами акустической спектроскопии в диапазоне частот от 3 до 63 МГц и интервале температур от 290 до 360 К, температурные зависимости плотности и коэффициента сдвиговой вязкости. Рассчитаны значения термодинамических констант, времени релаксации и его критический показатель.

Ключевые слова: нематические жидкие кристаллы, коэффициент сдвиговой вязкости, время релаксации.

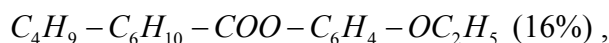
Результаты исследований температурно-частотных зависимостей акустических параметров в совокупности с данными по плотности, теплоемкости и вязкости, позволяют получить сведения о термодинамических и релаксационных свойствах исследуемого вещества. В свою очередь, результаты таких расчётов предоставляют информацию о структу-

ре, процессах теплового движения, характере и интенсивности молекулярного взаимодействия исследуемого объекта [1–4].

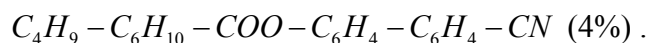
В качестве объекта исследования использован жидкий кристалл ЖК-1282 (НИО-ПИК, Россия) в состав которого входят: алкоксицианбифенилы:



эфир Демуса:



и эфир Грея:



Особенность ЖК-1282 состоит в том, то в его состав включены как сильно, так и слабополярные компоненты с различным типом межмолекулярного взаимодействия. Температурный интервал существования нематической мезофазы данного вещества очень широкий: от 253,1 К до 335,1 К (температура просветления T_C) при атмосферном давлении. Результаты измерения приведены на рис. 1

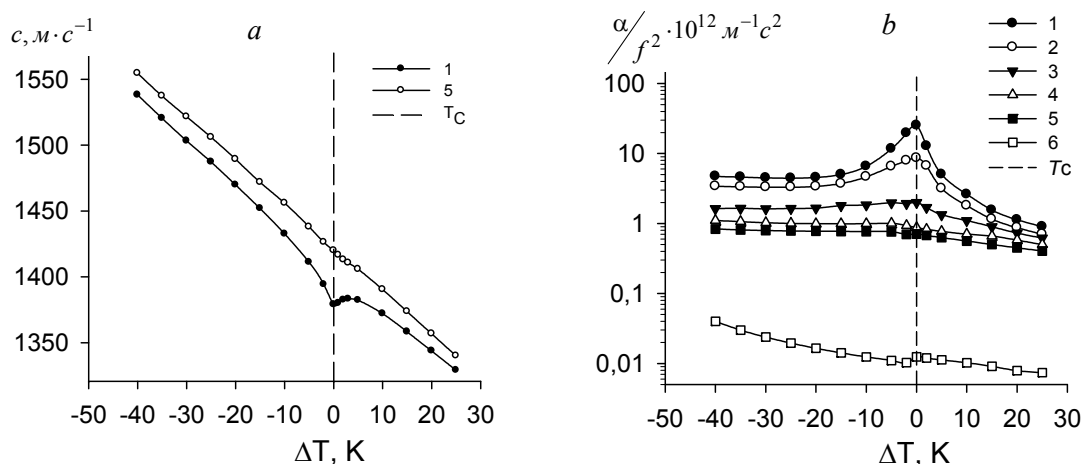


Рис. 1. Температурные зависимости скорости (а) и коэффициента поглощения (б) ультразвука для частот: 1 – 3 МГц, 2 – 9 МГц, 3 – 27 МГц, 4 – 45 МГц, 5 – 63 МГц; $6 - (\alpha/f^2)_S$, T_C – температура просветления.

Экспериментальные результаты температурной (290...360 К) и частотной зависимости (3...63 МГц) скорости и коэффициента поглощения ультразвука, полученные импульсно-фазовым методом переменного расстояния

Проведённые исследования свидетельствуют о том, что для всего интервала существования нематической фазы имеет место зависимость акустических параметров от частоты, что свидетельствует о влиянии релаксационных процессов.

Частотные зависимости скорости и коэффициента поглощения ультразвука могут быть представлены выражениями вида [5]:

$$c^2 = c_0^2 + (c_\infty^2 - c_0^2) \frac{(f/f_C)^2}{1 + (f/f_C)^2}, \quad (1)$$

$$\frac{\alpha}{f^2} = \frac{A}{1 + f^2/f_\alpha^2} + B, \quad (2)$$

где c_∞ и c_0 – высокочастотный и низкочастотный пределы скорости, f_C и f_α – частоты релаксации процессов, вносящие вклад в дисперсию скорости и коэффициента поглощения ультразвука. При этом:

$$A = \frac{2\pi^2}{\rho c_0^3} \eta_V^{(0)},$$

$$\eta_V^{(0)} = (c_\infty^2 - c_0^2) \rho \tau_\alpha, \quad (3)$$

где ρ – плотность, $\eta_V^{(0)}$ – низкочастотный предел объемной вязкости, $\tau_\alpha = 1/(2\pi f_\alpha)$.

Анализ частотных зависимостей скорости и коэффициента поглощения ультразвука позволяет рассчитать параметры, характеризующие релаксационный процесс в окрестности температуры просветления. Данные представленные в табл.1 показывают, что значения частот релаксации f_C и f_α , определенные согласно выражениям (1) и (2), достаточно близки. Это свидетельствует о том, что дисперсии скорости и поглощение ультразвука обусловлены одним молекулярным механизмом.

Таблица 1

Релаксационные параметры ЖК–1282

$\Delta T, K$	$c_0, \text{м/с}$	$c_\infty, \text{м/с}$	$f_C, \text{МГц}$	$A \times 10^{12}, \text{м}^{-1}\text{с}^2$	$B \times 10^{12}, \text{м}^{-1}\text{с}^2$	$f_\alpha, \text{МГц}$
-40	1537	1555	17	4,0	0,58	17
-10	1432	1457	14	6,1	0,47	14
-5	1408	1438	10	11,8	0,46	10
-2	1383	1426	5,9	24,5	0,46	6,4
2	1376	1413	7,5	15,5	0,44	7,5
5	1381	1406	13	4,4	0,44	13
10	1371	1392	21	2,1	0,35	21
20	1344	1364	42	0,82	0,19	42

Значения коэффициента сдвиговой вязкости η_s , плотности ρ , коэффициента объемной вязкости $\eta_V^{(0)}$ рассчитанного по (3), и отношения $\eta_V^{(0)}/\eta_s$ представлены в табл.2.

Из частотной зависимости скорости ультразвука можно рассчитать такие параметры как высокочастотный и низкочастотный пределы скорости c_∞ и c_0 , величину абсолютной дисперсии скорости $(c_\infty^2 - c_0^2)_C$, так и дисперсии модуля упругости $\Delta K_S^{(C)}$ и адиа-

батической сжимаемости $\Delta \beta_S^{(C)}$:

$$\Delta\beta_S^{(c)} = \frac{1}{\rho(c_\infty^2 - c_0^2)}$$

Анализ частотных зависимостей акустических свойств от параметров состояния показал, что релаксационные процессы в данном объекте обусловлены двумя механизмами. Первый, “критический”, связан с релаксацией и флуктуациями ориентационного параметра порядка. Второй, “нормальный”, связан со структурной релаксацией. Вдали от перехода из нематической фазы в изотропную основным является “нормальный” релаксационный механизм.

Таблица 2

Значения коэффициента сдвиговой вязкости η_s , плотности ρ , коэффициента объемной вязкости $\eta_v^{(0)}$ рассчитанного по (3), и отношения $\eta_v^{(0)}/\eta_s$

$\Delta T, K$	$\rho, \text{кг/м}^3$	$\eta_s, \text{Па}\cdot\text{с}$	$\eta_v^{(0)} \cdot 10^3, \text{Па}\cdot\text{с}$	$\eta_v^{(0)}/\eta_s$
-40	1035	5,60	761	136
-15	1014	1,64	694	422
-10	1010	1,37	920	672
-5	1006	1,15	1693	1471
-2	1003	1,04	3396	3269
2	998	1,20	2082	1734
5	996	1,12	587	525
10	992	0,98	272	278
25	983	0,65	74	113

Вблизи температуры просветления T_c “критический” механизм релаксации становится основным и проявляется в обеих фазах в небольшом интервале температур. Температурная зависимость эффективного времени низкочастотной релаксации вязкоупругих свойств определяется выражением:

$$\tau_K = \tau_K^0 \left(\frac{\Delta T}{T} \right)^{-\beta}, \quad (4)$$

где β – критический показатель степени, τ_K^0 – коэффициент, имеющий размерность времени.

Анализ температурной зависимости τ_K и показал, что в окрестности температуры просветления этот параметр удовлетворительно описывается выражением (4). Значение β составляет: для нематической фазы 0,45; для изотропной 0,76.

Температурная зависимость дисперсии скорости ультразвука и плотности позволяют вычислить значения модуля упругости K_S , адиабатическая сжимаемость β_S и их дисперсию. Значения этих параметров приведены в табл. 3.

Таблица 3

Значения модулей упругости $K_S \times 10^{-9}, \text{Н/м}^2$; адиабатической сжимаемости $\beta_S \times 10^{-10}, \text{м}^2/\text{Н}$; дисперсии модуля упругости $\Delta K_S \times 10^{-7}, \text{Н/м}^2$;

и адиабатической сжимаемости $\Delta \beta_s \times 10^{10}$, м²/Н.

ΔT , К	$K_s^{(3)}$	$K_s^{(63)}$	$\beta_s^{(3)}$	$\beta_s^{(63)}$	ΔK_s	$\Delta \beta_s$
-40	2,45	2,49	4,08	4,01	7,02	1,46
-15	2,14	2,19	4,68	4,56	7,04	1,43
-10	2,07	2,14	4,82	4,68	7,62	1,32
-5	2,00	2,08	4,99	4,81	9,67	1,05
-2	1,95	2,04	5,13	4,90	12,90	0,78
2	1,91	1,99	5,24	5,03	10,06	1,00
5	1,90	1,96	5,25	5,09	5,94	1,75
10	1,87	1,92	5,35	5,22	4,68	2,27
25	1,74	1,76	5,76	5,67	3,63	3,21

Все вышеизложенное позволяет сделать вывод, что в окрестности температуры просветления процессы связанные с релаксацией как коэффициента вязкости, так и модулей упругости обусловлены одним и тем же механизмом – релаксацией гетерофазных флуктуаций.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Вервейко М. В., Вервейко В. Н.* Объемная вязкость и акустическая релаксация нематических жидких кристаллов. // Ультразвук и термодинамические свойства вещества. Курск: 2002. С. 41–54.
2. *Михайлов М. В., Соловьев В. А., Сырников Ю. С.* Основы молекулярной акустики. – М.: Наука, 1964. 516 с.
3. *Хабибулаев П. К., Геворкян Э. В., Лагунов А. С.* Реология жидких кристаллов. – Ташкент: Изд-во ФАН АН Узбекистана, 1992. 295 с.
4. *Капустин А. П., Капустина О. А.* Акустика жидких кристаллов. – М.: Наука, 1986.
5. Физическая акустика / Под ред. Мэзона У. – т. 2А. – М.: Мир, 1968. 464 с.

**ACOUSTIC STUDY OF RELAXATION PROPERTIES OF ZHK-1282
NEMATIC LIQUID CRYSTAL IN VICINITY OF NEMATIC-ISOTROPIC
PHASE TRANSITION**

V. Surnichov, V. Belyaev, E. Bannikova

*Moscow State Regional University
Radio st., 10a, 105005*

Abstract. The viscous and elastic properties of a ZhK-1282 nematic liquid crystal (NLC) were studied in a temperature interval from 290 to 360 K by method of ultrasonic spectroscopy in the 3–63 MHz frequency range. The temperature dependences of the NLC density and shear viscosity are presented. The results of measurements of the velocity and ultrasound absorption and the shear viscosity were used to calculate the volume viscosity coefficient, the moduli of elasticity and isothermal compressibility, the relaxation times of both elastic and viscous properties, and the corresponding critical characteristics of the given NLC.

Keywords: nematic liquid crystal, shear viscosity coefficient, relaxation times.

УДК 533 6.011

**ОБ УЧЕТЕ ПОСТУПАТЕЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОСТИ ПРИ ПИРОЛИЗЕ
УГЛЕРОДОСОДЕРЖАЩИХ ВЕЩЕСТВ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ****М.М. Кузнецов, Ю.Д. Кулешова***Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а*

Аннотация. Исследована химическая релаксация релеевского газа в ударной волне. Аналитически вычислены функция распределения пар молекул и константа поступательно неравновесной скорости пиролиза типичных углеродосодержащих летучих веществ.

Ключевые слова: химическая релаксация, ударная волна, пиролиз, гиперзвук, неравновесность, течение.

В последние годы в связи с развитием нанотехнологий наблюдается повышенный интерес к возможности получения углеродо- и металосодержащих наночастиц с заданными свойствами (фуллерены, нанотрубки, карбины, ультрадисперсные алмазы и т.д.) в высокотемпературных газовых реакциях за ударными волнами. Ударные волны являются также надежным средством экспериментального исследования кинетических механизмов формирования углеродных частиц вследствие пиролиза углеводородов в ударных трубах. В настоящее время в результате таких исследований разработано несколько кинетических моделей, которые с различной степенью детализации позволяют осмысливать экспериментальные данные о кинетике сажеобразования. В частности, в одной из таких моделей [1] предлагается в качестве сажеобразующей системы использовать смеси, содержащие бикарбонил углерода (C_3O_2). Как показано авторами [1], преимущества подобной системы по сравнению с традиционными заключаются в том, что при пиролизе исходных молекул в ударных волнах сразу образуется углеродный пар, а не промежуточные молекулярные соединения, длительно распадающиеся до атомов углерода через сложную систему цепных реакций. В конечном счете именно это обуславливает более эффективное образование конденсированных частиц углерода при пиролизе в ударных волнах. Качественная картина подобного кластерообразования сводится к тому, что его скорость лимитируется темпом распада исходного материала. В связи с этим определенный интерес представляет неисследованный до сих пор вопрос о влиянии поступательной неравновесности на скорость распада исходного материала не за фронтом ударной волны, как это имеет место во всех известных работах, а непосредственно в ее фронте.

Исследование поступательной неравновесности в ударных волнах, проведенное к настоящему времени показало, что для однокомпонентного газа она должна быть незначительной. Так, в работе [2] было проведено сравнение результатов вычисления функции распределения пар молекул по относительным скоростям, полученных с использованием методов Монте-Карло и Мотт-Смита. Результаты вычислений практически совпали в широком диапазоне чисел Маха набегающего потока вплоть до $M_0 = 0$. Однако существенного влияния поступательной неравновесности не было обнаружено.

Анализируя величину относительного превышения концентрации пар энергетически активных молекул над соответствующей концентрацией в поступательно равновесной зоне за ударной волной, полученную в работе [2], можно показать, что она имеет максимум при величине относительной скорости молекул, равной удвоенной разности среднемассовых скоростей газа перед фронтом ударной волны и за ним. Этот максимум асимптотически при числе Маха набегающего потока стремящегося к бесконечности ($M_\infty \rightarrow \infty$) и отношении плотностей в ударной волне стремящемся к нулю, $\varepsilon = \rho_\infty / \rho_s \rightarrow 0$ приближенно равен:

$$F(\varepsilon, x) = (1 - v_\alpha)^2 + \frac{\varepsilon v_\alpha}{\sqrt{2}} (1 - v_\alpha) \exp\left(\frac{1}{2\varepsilon}\right). \quad (1)$$

Здесь $v_\alpha = [1 + \exp(x/\Delta)]^{-1}$ – решение Мотт-Смита для концентрации молекул n в ударной волне ($n = n_0[v_\alpha + (1 - v_\alpha)\varepsilon^{-1}]$, n_0 – концентрация частиц в набегающем потоке), x , Δ – соответственно координата и толщина ударной волны [3].

Из соотношения (1) следует, что максимум отношения функции распределения пар молекул в ударной волне к аналогичной равновесной функции за ее фронтом определяется только двумя параметрами: степенью сжатия в волне ε^{-1} и значением переменной координаты x .

Численные значения функции $F(\varepsilon, x)$ сильно, нелинейным образом зависят от параметра ε . Так при $\varepsilon = \frac{1}{16}$ они сравнимы с единицей, а при $\varepsilon = \frac{1}{25}$ величина F равна 150.

Аналогичное рассмотрение, проведенное нами для смеси газов с сильно различающимися по массе компонентами, что и соответствует типичному составу сажеобразующей смеси в ударных волнах ($\frac{m_\beta}{m_\alpha} = 10 - 100$, $\frac{n_\beta}{n_\alpha} = 1 - 0,1$ %) показало, что функция F

зависит уже от трех параметров: ε , x , $\varepsilon_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_\beta}$. С учетом малости параметров M_∞^{-1} , ε , ε_α эта функция может быть представлена аналитически в следующем виде:

$$F(\varepsilon, \varepsilon_\alpha, x) \cong \varepsilon \varepsilon_\alpha \exp\left(\frac{1}{2\varepsilon \varepsilon_\alpha}\right). \quad (2)$$

Численные значения величины (2) при $\varepsilon = 1/4$ (одноатомный газ), $\varepsilon_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_\beta} = 0,2$ и $0,1$ соответственно равны:

$$F(1/4; 0,2; \frac{x}{\Delta} \rightarrow \infty) = 5,5 \cdot 10^3,$$

$$F(1/4; 0,2; \frac{x}{\Delta} \rightarrow \infty) = 1,2 \cdot 10^8.$$

Из формулы (2) видно, что величины $F(\varepsilon; \varepsilon_\alpha; x)$ являются сильной нелинейной функцией двух параметров ε и ε_α .

Можно показать, что скорость поступательно-неравновесного пиролиза R_u , вычисляемая статистически на основе Мотт-Смитовской функции распределения пар имеет следующий вид:

$$R_u(\varepsilon, \varepsilon_\alpha, \theta_d, x) = R_A \exp[(2\sqrt{2\varepsilon\theta_d} - \bar{u})\bar{u}(2\varepsilon)^{-1}] . \quad (3)$$

Здесь R_A – равновесная, аррениусовская скорость пиролиза за ударной волной, $\theta_d = E_d / kT_s$, k – константа Больцмана, T_s – температура за ударной волной, $\bar{u} = u / u_\infty$, u – относительная скорость легкой (α) и тяжелой (β) компонент смеси в ударной волне, u_∞ – скорость смеси в набегающем потоке, перед ударной волной ($x \rightarrow -\infty$), u – является функцией двух параметров x и ε_α , $u = u(x, \varepsilon_\alpha)$.

Численная величина отношения $\bar{R}$ скорости неравновесного пиролиза R_u к равновесному R_A определялись для типичных значений параметра θ_d в сажеобразующих реакциях $\theta_d = 10 - 30$. При этом было получено:

$$\begin{aligned} \bar{R} (1/4; 0,1; 10; \frac{x}{\Delta} \rightarrow \infty) &= 5,5 \cdot 10^3 , \\ \bar{R} (1/4; 0,1; 20; \frac{x}{\Delta} \rightarrow \infty) &= 5,5 \cdot 10^3 , \\ \bar{R} (1/4; 0,1; 30; \frac{x}{\Delta} \rightarrow \infty) &= 1,2 \cdot 10^8 . \end{aligned} \quad (4)$$

Как следует из оценок (4) величина $\bar{R}$ сильно нелинейным образом зависит от значений энергетического параметра θ_d .

Концентрация кластеров углерода, образующихся при распаде углеродосодержащих летучих соединений в ударной волне, очень «чувствительна» к величине температуры за ударной волной T_s [1]. Большие значения T_s ($T_s > 2500$ К) могут приводить к диссоциации кластеров и, в конечном итоге, к уменьшению объемного выхода наноматериала [1]. В связи с этим целесообразно определить значения эффективной температуры за ударной волной T_s , при которой поступательно-неравновесная скорость распада летучих соединений в ударной волне сравнивается с аррениусовской скоростью пиролиза. Формула для соответствующего пересчета имеет простой вид:

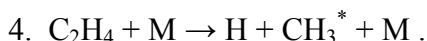
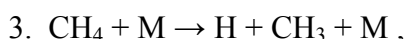
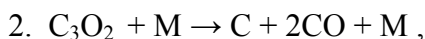
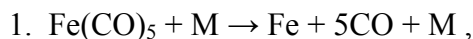
$$\frac{T_s}{T_s} = [1 - (2\varepsilon\theta_d)^{-1/2}]^2 (1 - \varepsilon_\alpha)^{-1} . \quad (5)$$

Численные значения относительной эффективной температуры (5) для характерных значений параметров ε , ε_α , θ_d оказались равными:

$$\begin{aligned} \frac{T_s}{T_s} (\varepsilon = 0,25; \varepsilon_\alpha = 0,1; \theta_d = 10) &= 0,305 , \\ \frac{T_s}{T_s} (\varepsilon = 0,25; \varepsilon_\alpha = 0,1; \theta_d = 20) &= 0,468 . \end{aligned} \quad (6)$$

Оценки (6) свидетельствуют о значительном снижении нагрева за ударной волной, необходимого для протеканий реакций пиролиза, которое может достигать 50% – 70%.

В заключение были проведены оценки длин релаксации за ударной волной в калибрах длины пробега l_S , для аррениусовского пиролиза – l_A / l_S , и поступательно-неравновесного – l_u / l_S , для четырех типичных реакций пиролиза:



В реакциях распада углеродосодержащих веществ: пентокарбонила ($\text{Fe}(\text{CO})_5$), недоокиси углерода (C_3O_2), метана (CH_4) и этилена (C_2H_4) в качестве относительно легкого газа разбавителя М были соответственно выбраны: гелий He (в случаях 1,3,4) и аргон (в случае 2). Типичное процентное соотношение «тяжелого» углеродосодержащего компонента и «легкого» компонента разбавителя составляло 1% к 99%. Значения искомых параметров l_A/l_S и l_u/l_S представлены в таблице, где величина A , $(\frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}})$ – так называемый частотный множитель химической реакции.

Давление за скачком P_S и концентрация углеродосодержащих молекул соответственно равнялись $P_S = 10^5$ Па, $n_\beta = 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

	M	$\varepsilon_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_\beta}$	T_S, K	A	$\frac{E_d}{RT_\beta}$	l_A / l_S	l_u / l_S
1	He	17	1200	$2 \cdot 10^{15}$	16,7	10^3	0,1
2	Ar	5	1500	$1,5 \cdot 10^{15}$	20,4	10^5	2
3	He	4	1600	$3,3 \cdot 10^6$	27,5	10^4	20
4	He	7	2000	$10^{17,6}$	25,7	10^4	0,1

Данные, представленные в таблице, свидетельствуют о том, что поступательно-неравновесный пиролиз эффективно происходит уже на длинах, сравнимых с толщиной ударной волны в релеевском газе $\Delta \approx \frac{m_\beta}{m_\alpha} l_S$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вагнер Х.Г., Власов П.А., Дерге К.Ю., Еремин А.В., Заслонко И.С., Танке Д. Кинетика образования кластеров углерода в процессе пиролиза C_3O_2 // Кинетика и катализ. – 2001. – Т.42, №5. – с. 645-656.

2. *Mott-Smith H.M.* The solution of the Boltzmann equation for a shock wave. // *Phys. Rev. A*, 1951, v.82, p.885-892.
3. *Куликов С.В., Терновая О.Н., Черешнев С.Л.* Специфика поступательной неравновесности во фронте ударной волны в однокомпонентном газе // *Химическая физика*. – 1993. – Т.12, №3. – С. 340-342.

ON THE TRANSLATIONAL NONEQUILIBRIUM PIROLYS OF CARBONE MATERIALS

M. Kuznetsov, Ju. Kuleshova

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005 Russia*

Abstract: The chemical relaxation of Relay gas in shock wave is investigated. Analytically two-particle molecular distribution function and the coefficient of translational non-equilibrium pyrolyses rate of typical carbon materials have been obtained.

Keywords: chemical relaxation, shock wave, pyrolyses, hypersound, non-equilibrium, flow.

УДК 532.783

КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИЕ ПЛЕНКИ С МОЛЕКУЛЯРНЫМ МИКРОРЕЛЬЕФОМ ДЛЯ ОРИЕНТАЦИИ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

В.В. Беляев*, В.Г. Мазаева, А.А. Минько***, С.Н. Тимофеев*****

**Московский государственный областной университет,
Учебно-научная лаборатория теоретических и практических нанотехнологий
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а*

***ГНЦ Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии
элементоорганических соединений
11123, Москва, шоссе Энтузиастов, 38*

****НИИ прикладных физических проблем
220064, Минск, ул. Курчатова, 7*

Аннотация. Созданы новые кремнийорганические соединения (КОС) на основе циклических и линейных силоксанов с различной структурой заместителей, обеспечивающей микрорельеф с размером в диапазоне размеров молекулярных фрагментов. Измерены характеристики ориентации жидких кристаллов (ЖК) на пленках исследованных КОС. Получена однородная планарная ориентация ЖК с углом наклона от 0,7° до 1,9°. Увеличение глубины микрорельефа приводит к небольшому увеличению угла наклона. Азимутальное сцепление лучше для пленок КОС без молекулярного микрорельефа или для пленок КОС, молекулы которых содержат полярную группу.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, кремнийорганические соединения, ориентация, полярная энергия сцепления, азимутальная энергия сцепления, молекулярный микрорельеф.

1. Введение

Кремнийорганические соединения (КОС) являются одним из перспективных типов веществ для ориентации жидких кристаллов (ЖК) благодаря стойкости к механическим, термическим воздействиям, влажности, сравнительной простоте нанесения пленки как на стеклянные, так и пластиковые покрытия [1]. Качественные и количественные характеристики ориентации ЖК (тип ориентации, однородность, угол наклона, значения полярной и азимутальной составляющей энергии сцепления с подложкой) на пленках КОС различного молекулярного строения (алкилтриэтоксисиланы, гексаалкилциклотрисилоксаны, олигоалкилгидридсилоксаны $[\text{RHSiO}]_m$) исследованы в [2-5]. Для различных триметокси- и этоксисиланов, исследованных в [5], типичное значение полярной составляющей энергии сцепления $W_{\text{и}} \sim 6 \cdot 10^{-5}$ Дж/м², относительное значение азимутальной составляющей энергии сцепления $A_{\phi}/A_{\text{Nylon6}}$ изменяется от 0,4 до 2,1, значения угла наклона ЖК на подложках изменяется от 0,1° до 0,6° для планарной ориентации и от 88° до 89,6° для гомеотропной ориентации.

Поэтому актуальной задачей остается повышение энергии сцепления пленок КОС с подложкой и варьирование угла наклона в большем диапазоне. Для этого авторами предложен поход формирования пленок КОС с молекулярным микрорельефом с использованием фрагментов, имеющих размер или форму, сравнимую с соответствующими параметрами молекул мезогенов.

Изготовление пленок КОС для ориентации ЖК является более экологичным и менее энергоемким процессом, чем аналогичная процедура изготовления пленок полиимидов благодаря использованию менее вредных реактивов и меньшей температуре полимеризации производных силоксанов. Создание ориентирующих пленок с молекулярным микрорельефом позволит избавиться от операции натирания покрытий, что также приведет к уменьшению энергопотребления при производстве ЖК дисплеев и уменьшению стоимости производства. Эти признаки соответствуют концепции “зеленых” плоскопанельных дисплеев, активно внедряемой ведущими компаниями [6].

Целью работы является создание новых КОС на основе циклических и линейных силоксанов с заместителями различного строения и измерение характеристик сцепления с поверхностью.

2. Исследованные вещества

Синтезированы метилэтилциклосилоксаны $[(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{SiO}]_n$, $n=4, 5$, $[(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{SiO}]_n-[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_3$, омега, омега'-дигидрокси-олигометилэтилсилоксаны $\text{HO}-[\text{Si}(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)]_n-\text{OH}$, представляющие собой полидисперсную смесь олигомеров, имеющих различные значения степени полимеризации n (длины силоксановой цепи), диметилметилгидридсилоксаны $(\text{CH}_3)_3\text{SiO}[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_n[(\text{CH}_3)\text{HSiO}]_m\text{SiO}(\text{CH}_3)_3$. Эти соединения являются исходными веществами для синтеза полиимидсилоксанов с заданной длиной силоксановой цепи, определяющей характеристики молекулярного рельефа полимерной пленки и технологические параметры ее образования. Формирование молекулярного рельефа за счет разницы размеров C-H и C-CH₃ групп в КОС $(\text{CH}_3)_3\text{SiO}[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_n[(\text{CH}_3)\text{HSiO}]_m\text{SiO}(\text{CH}_3)_3$ иллюстрируется рис.1.

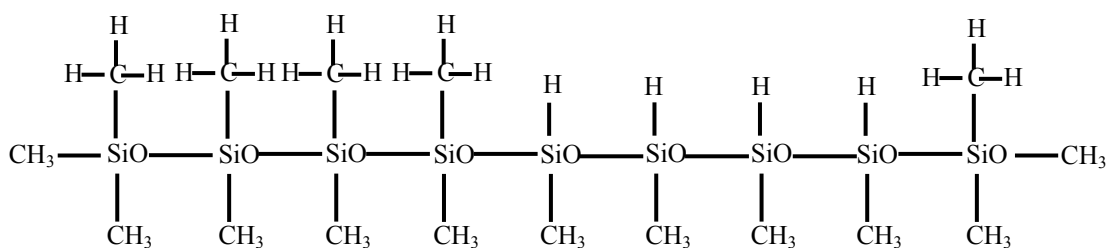


Рис.1. Развернутая структурная формула КОС
 $(\text{CH}_3)_3\text{SiO}[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_n[(\text{CH}_3)\text{HSiO}]_m\text{SiO}(\text{CH}_3)_3$,
 иллюстрирующая молекулярный микрорельеф.

Найдены оптимальные параметры процесса получения таких олигомеров.

В качестве примера приведем данные по синтезу омега, омега'-дигидроксиолигометилэтилсилоксанов общей формулы $\text{HO}-[\text{Si}(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)]_n-\text{OH}$. Указанные соединения получены гидролитической конденсацией метилэтилдихлорсилана в водно-солевой среде (водном растворе хлористого кальция) с последующей двухступенчатой отгонкой низкомолекулярных фракций при остаточном давлении 1-2 мм рт. ст. до достижения температуры 200°C в массе жидкости и дальнейшем обезлетучиванием при остаточном давлении 10⁻² мм рт. ст. (до 200°C в массе жидкости). В результате гидролиза образуется смесь олигомеров линейного строения и циклосилоксаны, причем условия подбирались таким образом, чтобы уменьшить циклообразование. После отгонки остаточное содержание метилэтилциклосилоксанов по данным газожидкостной хроматографии составляет 0,55% масс.

В результате проведенных исследований был выделен линейный омега, омега'-дигидроксиолигометилэтилсилоксан с средней степенью полимеризации $n=21$ (определена по содержанию ОН-групп), % ОН - 1,8, $T_{\text{всп}}=280^\circ\text{C}$, вязкость при 20°C равна 285,5 сСт, показатель преломления при 23,5°C=1,4926.

Метилэтилциклосилоксаны получены гидролизом метилэтилдихлорсилана в водно-спиртовой среде с последующим фракционированием с выделением целевых продуктов. Диметилметилгидридсилоксаны получены путем каталитической перегруппировки метилгидридсилоксана с деполимеризатом (октаметилциклотетрасилоксан) с последующей отгонкой низкокипящих соединений.

3. Результаты измерений

Метод измерения угла наклона ЖК директора по отношению к подложке основан на изменении угла наклона ячейки с планарной ориентацией ЖК по отношению к падающему пучку света с заданной поляризацией. Он описан в [5].

В [7] описан также спектроскопический метод определения угла закрутки жидкого кристалла в твист-ячейке, благодаря чему можно вычислить азимутальную составляющую энергии взаимодействия ЖК с поверхностью полимерной подложки. В результате были получены значения $D\phi$ - отклонение угла закрутки от заданного граничными условиями значения 90° в идеальной твист-ячейке, а также значения A_w/A_{Nylon6} - энергии азимутального сцепления, нормированные на значения азимутального сцепления пленки нейлона со стеклянной подложкой.

Для некоторых веществ удалось получить данные только по одному из упомянутых выше параметров из-за несовершенства образцов.

Структурные формулы исследованных веществ и данные по углам ориентации и азимутальному сцеплению приведены в табл.1 и 2.

Таблица 1

Углы наклона ЖК в ячейках с исследованными КОС

№	Кремнийорганическое соединение	Угол подвеса
1	$[(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{SiO}]_4$	$0,7^\circ$
2	$(\text{CH}_3)_3\text{SiO}[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_n[(\text{CH}_3)\text{HSiO}]_m\text{SiO}(\text{CH}_3)_3$	$1,3^\circ$
3	$\text{CH}_2=\text{CHSi}(\text{OCH}_3)_3$	$1,5^\circ$
4	$[(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{SiO}]-[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_3$	$1,9^\circ$

Таблица 2

Измеренные значения параметров азимутального сцепления

№	Кремнийорганическое соединение	$D\phi$	A_ϕ/A_{Nylon6}
	Nylon-6	2,2ε	1
1	$\text{CH}_2=\text{CHSi}(\text{OCH}_3)_3$	4,2ε	0,52
2	$[(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{SiO}]_4$	10,9ε	0,19
3	$[(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{SiO}]_5$	14,7ε	0,14
4	$(\text{CH}_3)_3\text{SiO}[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_n[(\text{CH}_3)\text{HSiO}]_m\text{SiO}(\text{CH}_3)_3$	28,6ε	0,06

Для всех них наблюдается однородная планарная ориентация с наклоном ЖК директора от $0,7^\circ$ до $1,9^\circ$. Наименьшее значение угла наклона получилось для циклического соединения $[(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{SiO}]_4$. Влияние молекулярного микрорельефа можно проследить на примере КОС 2 и 4 из табл.1. Увеличение глубины микрорельефа на одну CH_2 группу приводит к небольшому увеличению угла наклона.

На пленках КОС без молекулярного микрорельефа, а также содержащих полярные группы (CN , NH_2 , C_6H_2), значения угла наклона получаются существенно меньше (от $0,1^\circ$ до $0,6^\circ$) [5].

В твист-ячейках со всеми исследованными КОС угол закрутки директора отличается от заданного граничными условиями (90°). Наименьшее значение получается для КОС с двойной $\text{C}=\text{C}$ связью в заместителе. У циклических КОС (2 и 3 в табл.2) азимутальное сцепление уменьшается при переходе к пентациклу - веществу $[(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{SiO}]_5$, которое по соображениям симметрии должно образовывать менее упорядоченную пленку КОС на стеклянной подложке.

Наименьшее азимутальное сцепление получается у линейного КОС 4 из табл.2, которое имеет слабо выраженный молекулярный микрорельеф. У КОС без молекулярного микрорельефа, а также содержащих полярные группы, азимутальное сцепление лучше, оно сравнимо с соответствующим параметром полимеров, использующихся в производстве ЖК дисплеев [5].

4. Выводы

Разработаны условия формирования силоксановых соединений с молекулярным микрорельефом.

Для пленок исследованных кремнийорганических соединений с молекулярным рельефом, имеющих характерный размер этиленовой группы, наблюдается увеличение угла наклона ЖК директора на стеклянной подложке и уменьшение азимутального сцепления по сравнению с КОС без молекулярного микрорельефа, а также содержащих полярные группы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 06-03-81035-Бел_а).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Cognard J.* Alignment of Nematic Liquid Crystals and Their Mixtures // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, Suppl. 1 (Gordon and Breach, London, 1982).
2. *Mazaeva V.G., Belyaev V.V., Sobolevskii M.V.* Properties of thin films of organosilicone compounds for LC alignment // *J. Soc. Inf. Display*, V.13, p.373 (2005).
3. *Mazaeva V.G., Belyaev V.V., Sobolevskii M.V.* LC Alignment by Strengthened Cyclosiloxanes, *Digest of Technical Papers of 35th SID Symposiums*, Seattle, USA, May 2004, 566-569 (2004).
4. *Mazaeva V.G., Belyaev V.V., Nazarova D.V., Sobolevsky M.V.* Alignment of Liquid Crystals by Strengthened Cyclosiloxanes, *Proc. 3rd Asian Symp. for Information Displays*, Nanjing, China, 13-17 February 2004, 130-133 (2004).
5. *Muravsky A.I., Murauski A., Mazaeva V., Belyaev V.* Parameters on the LC alignment of organosilicon compound films // *J. Soc. Inf. Display*, V.13, p.349 (2005).
6. Green is the Next Wave in Flat Panel Displays; DisplaySearch Reports Half of Mainstream Panels Will Be Green by 2011, DisplaySearch report, January 19, 2009.
7. *Konovalov V.A., Muravski A.A., Yakovenko S.Ye.* The accurate spectral method for measuring twist angle of twisted cells with rubbed and grooved surfaces // *SID'00 Digest*, P.25 (2000).

ORGANOSILICON FILMS WITH MOLECULAR MICRORELIEF TO ALIGN LIQUID CRYSTALS

V. Belyaev*, V. Mazaeva, A. Min'ko***, S. Timofeev*****

**Moscow Region State University
Education & Science Lab for Theoretical and Applied Nanotechnology
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

***State Scientific Centre GNIKhTEOS (State R&D Institute of Chemistry
and Technology of Organoelement Compounds)
38, Enthusiasts av., Moscow, 111123, Russia*

****R&D institute of Applied Physical Problems
7, Kurchatov str., Minsk, 220064, Byelorussia*

Abstract. New organosilicon compounds on the base of both cyclic and linear siloxanes with different structure of the substituents have been created and performances of the LC anchoring on OC films have been measured. The OC studied provide the homogeneous planar alignment with LC tilt angle in the range from 0.7° to 1.9° . An increase of the microrelief depth results in a small increase of the tilt angle. The azimuthal anchoring is better for the films of the OC without molecular microrelief or the OC comprising polar groups.

Keywords: liquid crystal, organosilicon compounds, alignment, polar anchoring energy, azimuthal anchoring energy, molecular microrelief.

УДК 532.783

ОСОБЕННОСТИ ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ ЭКОЛОГИЧНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ ОТХОДОВ ПРОИЗВОДСТВА ЭЛЕКТРОННОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

А.В. Наумов*, Е.Е. Гринберг*, И.С. Быков*, В.В.Беляев**

**ФГУП «ИРЕА»*

103076, Москва, Богородский вал, 3

***Московский Государственный областной университет*

105005, Москва, ул. Радио, 10а

Аннотация. Рассмотрен ряд вопросов, связанных с регенерацией отходов производства кремниевых и интерметаллидных $A^{III}B^V$ компонентов электронной и промышленной промышленности. Показано, что ряд экологических проблем этих производств может быть решен при использовании регенерации с применением различных физических и химических методов.

Ключевые слова: регенерация отходов производства, полупроводниковые материалы, физические методы, химические методы, промышленная экология

Современная электронная и электротехническая промышленность является крупнотоннажным потребителем широкого ряда химических материалов, металлов и сплавов. Начиная от традиционного элементарного кремния, они используют в производстве алюминий, галлий, индий, интерметаллиды, цветные металлы, растворители и кислоты, травильные смеси и многие другие сырьевые компоненты. Объемы потребления их постоянно растут, что показано на рис.1, несмотря на увеличение выхода годных изделий, снижение расходных норм, освоение методов регенерации отходов [1-7].



Рис.1а. Динамика потребления некоторых элементов, используемых в электронной и электротехнической промышленности (индий, галлий, германий)

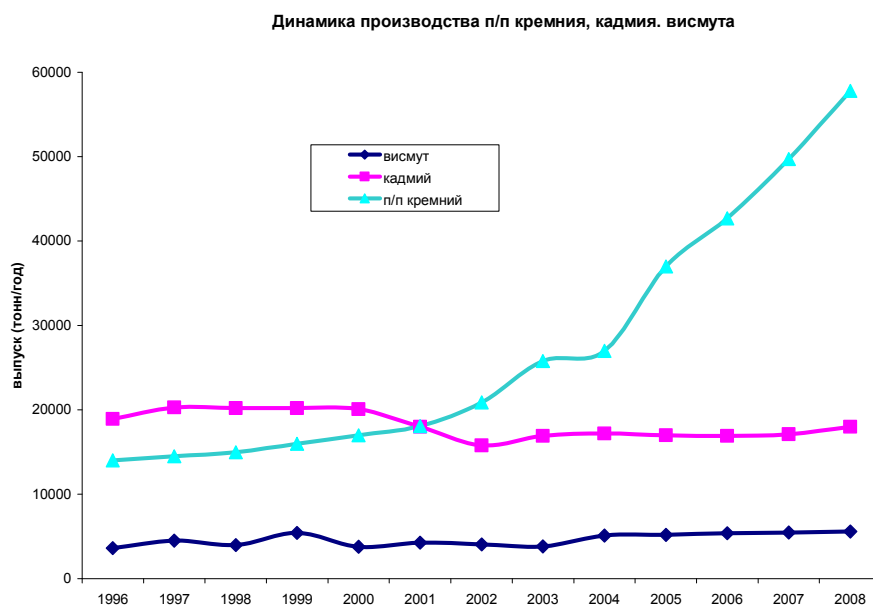


Рис.1б. Динамика потребления некоторых элементов, используемых в электронной и электротехнической промышленности. (п\п кремний, кадмий, висмут)

Однако последний из указанных аспектов по-прежнему остается недостаточно исследованной областью, в которой необходим поиск новых направлений, обеспечивающих полноту использования все более сужающихся источников сырья, а также экологическую чистоту технологии в целом. В особенности это относится к таким элементам как мышьяк, кадмий, теллур, ртуть, их соединениям и другим, являющихся чрезвычайно токсичными, выброс которых необходимо снижать до уровня предельно-допустимых концентраций. Это имеет особенное значение в связи с ужесточением экологических требований к производствам.

В данной работе будут рассмотрены некоторые вопросы, связанные с разработкой экологичной технологии утилизации и переработки некоторых видов отходов этих отраслей промышленности.

Значительное количество таких элементов как мышьяк, сурьма, галлий и индий используется для производства приборов СВЧ-техники и оптоэлектроники. Однако основным элементом, до настоящего времени широко используемым в полупроводниковом производстве, является кремний и его соединения, в частности, оксид.

Отправной точкой для создания экологически приемлемой технологии переработки отходов производства является их классификация по элементному и фазовому составу. Уже на стадии резки, шлифовки и полировки требуется разделение и сбор однородных по этим показателям продуктов - это резко упростит дальнейшую переработку.

Первичное разделение наиболее целесообразно осуществлять гравитационными методами – разделением в жидкостях (флотационное) или на центрифугах. При этом с большой эффективностью выделяются фракции, содержащие «легкие» элементы и их оксиды (кремния, алюминия, бор). В работе [8] описано выделение кремния и его оксида путем обработки твердой фазы, образующейся при резке и шлифовке кремния жидкостями с высокими удельными весами – бромсодержащими углеводородами. Этим методом можно отделять также элементарные формы и оксиды бора, алюминия. В производстве, основанном только на применении кремния, таким образом можно эффективно возвращать в циклы шлифовальные порошки карбида кремния. При этом флотационные реагенты могут быть регенерированы и возвращены в циклы.

Для переработки отходов, которые содержат большое количество таких соединений, как арсенид галлия или твердые растворы арсенида галлия-индия могут быть использованы два основных метода – термохимический и химический.

Первый основан на термической обработке твердой фазы при высоких температурах, достигающих 1200К. При этом происходит диссоциация арсенида галлия, выделяющийся мышьяк возгоняется и конденсируется в «холодной зоне» реактора разложения.

Химический метод состоит в обработке исходного материала газообразным хлором при повышенной температуре – до 700К. При этом происходит хлорирование исходного материала. Образующийся трихлорид мышьяка конденсируется в холодильнике при температуре около 420К и выделяется из реактора в «холодной» зоне. Трихлорид галлия, имеющий более высокую температуру кипения – около 470К при атмосферном давлении, выводится из реактора в «горячей зоне» через обогреваемый до 360 – 380К конденсатор. Аналогичным образом из системы выводят трихлорид индия, имеющего температуру сублимации ~670К при атмосферном давлении.

Оба метода имеют определенные достоинства и недостатки. Достоинством первого является отсутствие необходимости внесения дополнительных химических соединений для осуществления термического разделения. В результате разложения образуются элементарные галлий и мышьяк, которые можно либо использовать для дальнейшей очистки или химической переработки, либо хранить в удобной для этого форме. При этом мышьяк выделяется в достаточно чистом виде, что облегчает его дальнейшую очистку до уровня требований к исходным материалам для электронной техники.

Недостатком этого метода является неполнота разложения исходных соединений и образование при этом значительных количеств кубовых остатков неопределенного со-

става, в том числе, не разлагаемых оксидов галлия и мышьяка в форме арсенатов или арсенидов.

Достоинством метода хлорирования (или галогенирования бромом или йодом) является возможность достаточно полного выделения мышьяка и галлия из смеси в виде их летучих хлоридов. Полученные отгоны хлоридов достаточно хорошо разделяются дистилляционно-ректификационными методами из-за существенной разницы температур кипения или сублимации [9]. Проблема разделения галогенидов, а в особенности, наиболее доступных хлоридов не является чрезвычайно сложной в доступном интервале температур.

Недостаток этого метода заключается в том, что он требует применения достаточно больших количеств газообразного хлора или дефицитных или дорогостоящих брома или йода. Кроме того, в результате образуются гигроскопичные продукты, работа с которыми связана с использованием осушенной инертной атмосферы при технологических операциях разгрузки аппаратуры.

Нами были проведены эксперименты опыты по исследованию возможности регенерации компонентов, используемых в производстве полупроводниковых структур соединений класса $A^III B^V$.

В качестве исходного сырья использовали лом, образовавшийся при получении эпитаксиальных слоев арсенида галлия, загрязненный примесями мышьяка и его оксида, индия, остатками шлифовального порошка и полирующих смесей.

На первой стадии проводили отделение твердой фазы, имеющей плотность на уровне ниже 2,9. Отделение проводили флотацией в трибромметане. При этом были отделены основные примеси элементарного кремния и его диоксида.

На третьей стадии была использована высокотемпературная обработка образца, выделенного после флотации и имеющего плотность, большую, чем 2,9 в интервале температур 950 - 1150K. При этом в зоне, имеющей температуру ниже 800K, происходило выделение из паровой фазы и осаждение металлического мышьяка. В более холодной зоне осаждался триоксид мышьяка, количество которого не превышало 2% масс от исходной загрузки по мышьяку. Полученный металлический мышьяк имел чистоту по основному веществу на уровне 97 - 98%. Он может быть использован для получения высокочистого мышьяка сублимацией или направленной кристаллизацией из расплава под давлением, а также для синтеза арсенидов металлов для получения арсина для газофазной эпитаксии в системе «металлорганические соединения – гидрид».

После отделения выделившегося металлического галлия остаток после термообработки помещали в реактор хлорирования, нагревали до температуры 420-450K и подавали газообразный хлор. Реакция хлорирования является сильно экзотермичной. Образующийся хлорид галлия конденсировали при температуре 370-380K. При этом трихлорид мышьяка, имеющий температуру кипения 403K, удалялся и конденсировался при температуре 290 – 310 K.

Для повышения выхода по галлию в газовый поток добавляли пары четыреххлористого углерода в количествах, не превышавших 3-5 % масс от потока хлора. Процесс проводили при постепенном повышении температуры до 950K. При этом проходило полное хлорирование и отгонка оксидов галлия и индия. Суммарная степень извлечения галлия из начальной смеси составляла более 95% масс.

Смесь хлоридов галлия с другими труднолетучими хлоридами разделяли дистилляцией. Содержание примесей металлов в полученных хлоридах представлено в табл. 1.

Квалификация продуктов соответствует марке «технический», однако они могут быть с успехом использованы для получения высокочистых металлов традиционными методами.

Полученный трихлорид мышьяка подвергали сорбционной (на активированном угле БАУ) и ректификационной очистке на кварцевой насадочной колонне. Очищенный трихлорид мышьяка отвечает требованиям электронной техники и может использоваться в эпитаксиальной технологии арсенидов.

В результате двухстадийного процесса в результирующем остатке концентрация галлия составляла менее 0,1% масс, а мышьяка 0,05% масс. По результатам анализа основной составной частью остатка был оксид кремния (около 90% масс), загрязненный примесями мышьяка, сурьмы и некоторых других металлов на уровне 0,5 – 1,0% масс каждого.

Таблица 1

Содержание примесей в продуктах, получаемых при переработке отходов производства (% масс $\times 10^{-5}$).

Вещество Примесь	GaCl ₃	AsCl ₃	SiCl ₄	As
Al	5	0,5	0.1	8
Ca	0.5	0.1	2	3
Cr	0,3	0,2	0,1	0,2
Fe	4	0,2	0,3	1
K	0,5	0,5	0,3	0,2
Mg	0,5	0,5	0,2	3
Mn	0,2	0,1	0,1	0,1
Ni	0,2	0,1	0,1	0,5
Ti	0,8	2	0,4	0,8

Полученный остаток был обработан концентрированной азотной кислотой, после чего раствор отфильтрован и нейтрализован аммиаком. Твердая фаза представляла собой оксид кремния технической квалификации (более 95% масс). Жидкий фильтрат обрабатывали газообразным сероводородом и раствором сернистого натрия или сероводородом. Выпавший осадок фильтровали и сушили. Полученный продукт в количестве менее 0,5 % от исходного являлся смесью сульфидов сурьмы, мышьяка, железа и других металлов. Сульфиды мышьяка и сурьмы являются чрезвычайно трудно растворимыми соединениями и, поскольку их абсолютное количество невелико (оно может быть оценено в несколько десятков килограммов на весь объем годового производства соединений класса A^{III}B^V в России), эти отходы могут быть присоединены к отходам производства цветных металлов для последующей финишной переработки. Такие отходы составляют до нескольких десятков тысяч тонн в год.

Таким образом, для повышения степени использования сырья и уменьшения экологической нагрузки при переработке отходов электронного и электротехнического производства предлагается проводить обработку в следующей последовательности (рис.1):

гравитационное разделение (выделение «легких» и нетоксичных оксидов и элементов – бор, алюминий, кремний),

термическая обработка (термическая диссоциация и выделение летучих продуктов – мышьяк, селен) для последующей переработки и возвращения в технологические циклы,

химическая газофазная или жидкостная переработка с выделением летучих или растворимых химических соединений (хлориды галлия, индия, мышьяка, сурьмы и др.) с последующим разделением,

остаток после последней обработки, содержащий токсичные элементы, кадмий, мышьяк и др. подвергать взаимодействию с сульфидными растворами, что приведет к осаждению сульфидов элементов в нерастворимой или трудно растворимой форме для последующего захоронения.

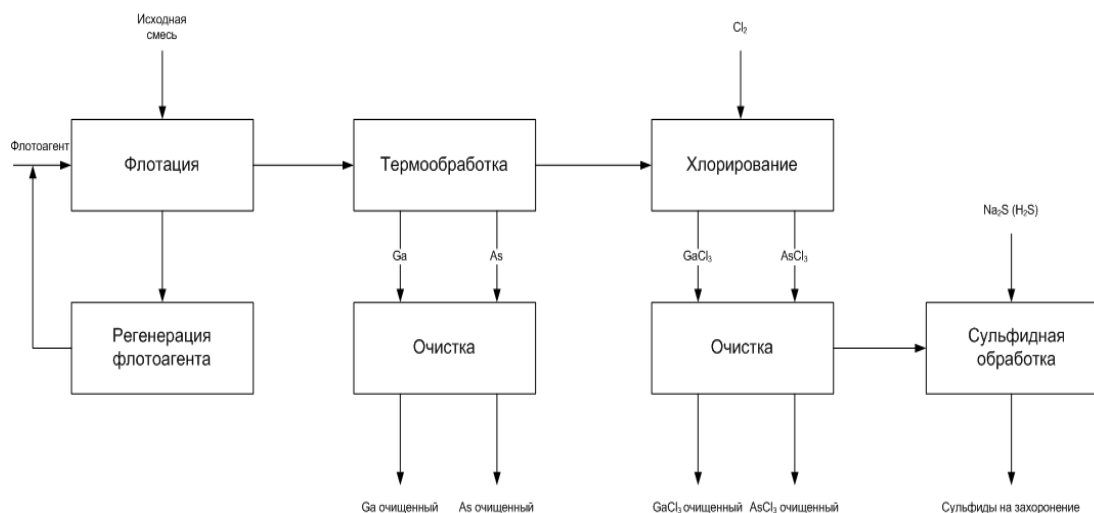


Рис. 2. Принципиальная схема переработки отходов производства.

Достоинством предлагаемой схемы переработки является то, что она может быть осуществлена как в локальных (по месту появления отходов), так и в централизованных условиях. Это позволит повысить степень использования рассеянных металлов и снизить экологическую нагрузку, создаваемую полупроводниковым производством.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наумов А.В., Гринберг Е.Е. // Изв. Вузов, Цв. металлургия, 2009, №1, С.53
2. Наумов А.В. // Изв. Вузов, Цв. металлургия, 2005, №3, С.14
3. Наумов А.В., Гринберг Е.Е. // Вестник Международной академии системных исследований, М., МАСИ, 2007, №3, С.69
4. Абрютин В.П., Калашиник О.Н., Нисельсон Л.А. Тез.докл. XII конф. «Высококачественные вещества и материалы», Н.Новгород, 2004, С.100
5. Потолоков Н.А., Козлов С.А., Петрухин И.О. и др. Там же, С.104.
6. Беляев В.В. Новые дисплейные технологии и их применения // Электронные компоненты, №3, с.26-27 (2003).
7. Беляев В.В., Коваленко В.И. Рынок жидкокристаллических дисплеев // Электронные компоненты, №3, с.59-63 (2003).

8. Баранов К.В., Жаданов В.Б., Сырычко В.В. и др. О некоторых возможностях переработки «солнечного» кремния // Химическая промышленность сегодня, М., №5, 2007, С.17-21
9. Кэй Дж., Лэби Т. Таблицы физических величин и химических постоянных, / ГИФМЛ, М., 1962, 247с.

SPECIAL FEATURES OF BOTH PHYSICAL AND CHEMICAL METHODS OF ECOLOGIC REGENERATION OF ELECTRONIC COMPONENTS MANUFACTURING WASTES

A. Naumov*, E. Grinberg*, I. Bykov*, V. Belyaev**

**FGUE "IREA", 103076, Bogorodsky val, 3, Moscow, Russia*

***Moscow Region State University, 105005, Radio st., 10a, Moscow, Russia*

Abstract. Some aspects of regeneration of waste of high purity silicon, silicon carbide and elements inter metallic compounds $A^{III}B^V$ are studied. It is shown that regeneration with both physical and chemical methods may be an effective approach to solve many ecological problems of electronic devices manufacturing.

Key words: regeneration of industrial waste, semiconductor materials, physical methods, chemical methods, industrial ecology

УДК 541.64

ДИАГРАММЫ СОСТОЯНИЯ В СИСТЕМАХ С БЛИЖНИМ ОРИЕНТАЦИОННЫМ ПОРЯДКОМ

Д.Н. Чаусов*, В.В. Иконникова*, О.В. Ноа, А.К. Дадиванян***

**Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а*

***Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
119992, Москва, Ленинские горы*

Аннотация. Установлено влияние ближнего ориентационного порядка на фазовые диаграммы растворов полимеров и лиотропных жидких кристаллов. Показано существование бинарных систем с более чем одной верхней и нижней критическими температурами растворения. Выведены уравнения бинодалей и спинодалей для лиотропных жидких кристаллов и систем полимер – растворитель с учетом ближнего ориентационного порядка.

Ключевые слова: ближний ориентационный порядок, бинарные смеси, бинодали, спинодали.

В растворах полимеров существует ближний ориентационный порядок, который оказывает существенное влияние на оптические, электрические, электрооптические, спектральные и релаксационные свойства макромолекул и молекул растворителя [1 – 10]. Ближний ориентационный порядок влияет и на фазовые переходы раствор – двух-фазная система [11 – 13].

Известно, что в растворах и лиотропных жидких кристаллах наблюдаются фазовые переходы двух типов – с верхней и нижней критическими точками. Условия существования ВКТР и НКТР определяются из равенства нулю химического потенциала $\Delta\mu$. При ВКТР парциальные энтропия и энтальпия смешения положительны, при НКТР – отрицательны.

Вклад изменения ближнего ориентационного порядка в энтропию и свободную энергию смешения был определен в работе [11]:

$$\Delta S_{CM} = \Delta S_{CM}^{noz} + \Delta S_{CM}^{op} = -k \left(n_1 \ln \varphi_1 + n_2 \ln \varphi_2 + \frac{xn_1n_2}{n_1 + xn_2} \left(Z_2 \ln \frac{\alpha_1}{\beta_1} + Z_1 \ln \frac{\alpha_2}{\beta_2} \right) \right). \quad (1)$$

Здесь Z_1 и Z_2 – координационные числа молекул растворителя и сегмента макромолекулы, соответственно, α_1 и α_2 – числа их ориентационных состояний, β_1 и β_2 – числа их ориентационных состояний в растворе, n_1 , φ_1 – число молекул и объемная доля растворителя, n_2 , φ_2 – число сегментов и объемная доля полимера, x – отношение объемов макромолекулярной цепи и молекулы растворителя.

$$\Delta G_{CM} = \Delta H_{CM} - T\Delta S_{CM}. \quad (2)$$

В работе [11] были найдены химические потенциалы и парциальные энтропии смешения компонентов раствора:

$$\begin{aligned} \Delta\mu_1 &= \Delta\bar{H}_1 - T\Delta\bar{S}_1 = RT \left[\ln(1 - \varphi_2) + \left(1 - \frac{1}{x}\right)\varphi_2 + \left\{ \chi_H + \left(Z_2 \ln \frac{\alpha_1}{\beta_1} + Z_1 \ln \frac{\alpha_2}{\beta_2} \right) \right\} \varphi_2^2 \right], \\ \Delta\mu_2 &= \Delta\bar{H}_2 - T\Delta\bar{S}_2 = RT \left[\ln(1 - \varphi_1) - \left(1 - \frac{1}{x}\right)x\varphi_1 + \left\{ \chi_H + \left(Z_2 \ln \frac{\alpha_1}{\beta_1} + Z_1 \ln \frac{\alpha_2}{\beta_2} \right) \right\} x\varphi_1^2 \right], \end{aligned} \quad (3)$$

где $\chi_H = \frac{\Delta\omega_{12}}{kT}$ – параметр взаимодействия, а $\Delta\omega_{12}$ – разность энергий взаимодействия, приходящаяся на один контакт, при замене контактов полимер–полимер, растворитель–растворитель на контакты полимер–растворитель,

$$\Delta\bar{S}_1 = -k \left(\ln(1 - \varphi_2) + \left(1 - \frac{1}{x}\right)\varphi_2 + \chi_S \varphi_2^2 \right),$$

$$\Delta \bar{S}_2 = -k \left(\ln(1 - \varphi_1) - \left(1 - \frac{1}{x} \right) x \varphi_1 + \chi_S x \varphi_1^2 \right),$$

где χ_S – энтропийный параметр, равный $Z_2 \ln \frac{\alpha_1}{\beta_1} + Z_1 \ln \frac{\alpha_2}{\beta_2}$, который характеризует ближний ориентационный порядок.

Для температур Флори и Роулинсона θ , критических температур T_{cr} и критических концентраций растворения было получено:

$$\theta = \frac{\Delta \bar{H}_1}{\Delta \bar{S}_1} = \frac{\chi_H T}{\psi_1^*},$$

$$\frac{1}{T_{cr}} = \frac{1}{\theta} + \frac{1}{\theta} \cdot \frac{1}{\psi_1^*} \left(\frac{1}{2x} + \frac{1}{\sqrt{x}} \right), \quad (4)$$

$$\varphi_{2,cr} = \frac{1}{1 + \sqrt{\delta}}, \quad (5)$$

Наш подход позволяет построить фазовые диаграммы раствор – двухфазная система. Бинодали соответствуют условию

$$\Delta \mu_1 = 0, \quad (6)$$

а спинодали –

$$\frac{\partial \Delta \mu_1}{\partial \varphi_2} = 0. \quad (7)$$

Для построения фазовых диаграмм необходимо знать зависимость величины $\chi_1 = \chi_H + \chi_S$ от температуры.

Рассмотрим зависимость от температуры энергии взаимодействия полимер растворитель. Среднее значение энергии взаимодействия определяется соотношением

$$\bar{E} = \frac{\sum_{i,k,l,m,n} E_{i,k,l,m,n} \cdot e^{-\frac{E_{i,k,l,m,n}}{kT}}}{\sum_{i,k,l,m,n} e^{-\frac{E_{i,k,l,m,n}}{kT}}}. \quad (8)$$

Зависимости средней энергии взаимодействия между сегментом макромолекулы и молекулой растворителя для различных систем приведены на рис.1. Как видно из рисунка, эти зависимости близки к линейным в широкой области температур.

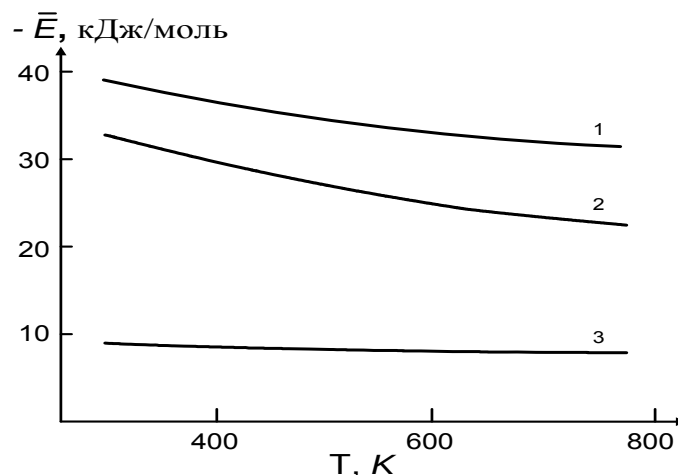


Рис. 1. Зависимость средней энергии взаимодействия молекул растворителя с сегментом полимерной цепи от температуры.
Системы ПЭ – декан (1), ПИБ – бензол (2) и ПЭ – бензол (3).

Если предположить, что зависимость ΔE от температуры вблизи критических температур также является линейной, то вблизи температуры Флори ее можно представить в виде

$$\Delta E = \chi_H T = \chi_H^F \theta_F + \gamma_F \chi_H^F (T - \theta_F),$$

тогда

$$\chi_H = \chi_H^F \frac{\theta_F}{T} (1 - \gamma_F) + \gamma_F \chi_H^F, \quad (9)$$

а вблизи температуры Роулинсона

$$\Delta E = \chi_H T = \chi_H^R \theta_R + \gamma_R \chi_H^R (T - \theta_R),$$

и

$$\chi_H = \chi_H^R \frac{\theta_R}{T} (1 - \gamma_R) + \gamma_R \chi_H^R. \quad (10)$$

Зависимости χ_S от температуры вблизи температур Флори и Роулинсона также могут быть представлены в виде:

$$\chi_S = \chi_S^F \frac{\theta_F}{T} (1 - \gamma_F) + \gamma_F \chi_S^F, \quad (11)$$

$$\chi_S = \chi_S^R \frac{\theta_R}{T} (1 - \gamma_R) + \gamma_R \chi_S^R. \quad (12)$$

Подставляя в уравнение (3) значение χ_H и χ_S из выражений (11), (12) и применяя условия (6) и (7), вблизи температуры Флори для бинодали и для спинодали можно получить, соответственно

$$T = - \frac{(\chi_H^F + \chi_S^F) \theta_F (1 - \gamma_F)}{\gamma_F (\chi_H^F + \chi_S^F) + \frac{\ln(1 - \varphi_2) + \left(1 - \frac{1}{x}\right) \varphi_2}{\varphi_2^2}}, \quad (13)$$

$$T = - \frac{2(\chi_H^F + \chi_S^F) \theta_F (1 - \gamma_F)}{2\gamma_F (\chi_H^F + \chi_S^F) + \frac{\left(1 - \frac{1}{x}\right) (1 - \varphi_2) - 1}{(1 - \varphi_2) \varphi_2}}. \quad (14)$$

Аналогично для бинодали и спинодали вблизи температуры Роулинсона получается

$$T = - \frac{(\chi_H^R + \chi_S^R) \theta_R (1 - \gamma_R)}{\gamma_R (\chi_H^R + \chi_S^R) + \frac{\ln(1 - \varphi_2) + \left(1 - \frac{1}{x}\right) \varphi_2}{\varphi_2^2}}, \quad (15)$$

$$T = - \frac{2(\chi_H^R + \chi_S^R) \theta_R (1 - \gamma_R)}{2\gamma_R (\chi_H^R + \chi_S^R) + \frac{\left(1 - \frac{1}{x}\right) (1 - \varphi_2) - 1}{(1 - \varphi_2) \varphi_2}}. \quad (16)$$

Для построения фазовых диаграмм необходимо знать значения γ и $\chi_H + \chi_S$ при заданном значении θ -температуры. Для определения этих величин, на основании уравнений (13) и (15) строились поверхности (рис. 2) в системе координат $T, \gamma, \chi_H + \chi_S$, в диапазоне величин γ от -4 до 4 и от -4 до 3. Так как для растворов полимеров фазовые переходы происходят при $\varphi_2 \ll 1$, можно считать, что $\varphi_2 \approx \varphi_{2,cr}$, а величину φ_2 определить из соотношения (5). Проведя сечение $T = const$ при известных значениях θ_F или θ_R , определяли значения γ и $\chi_H + \chi_S$.

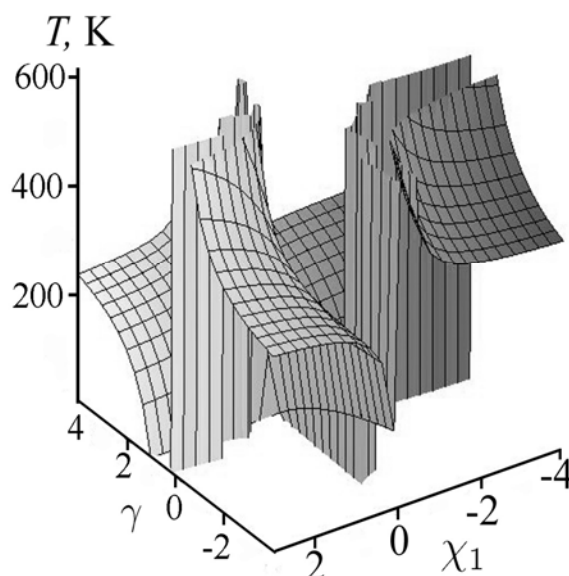


Рис. 2. Поверхность температур при разных значениях γ и $\chi_1 = \chi_H + \chi_S$.

Рассчитанные нами бинодали и спинодали для системы ПВС – вода приведены на рис. 3. Кривые под номерами 2, 3, 6 являются бинодалями, а кривые под номерами 1, 4, 5 – спинодалями. Там же приведены экспериментальные данные для этой системы из работ [14] и [15], которые соответствуют бинодалям. Из рисунка видно, что при малых концентрациях раствора уравнения (13) – (16) хорошо описывают экспериментальные данные.

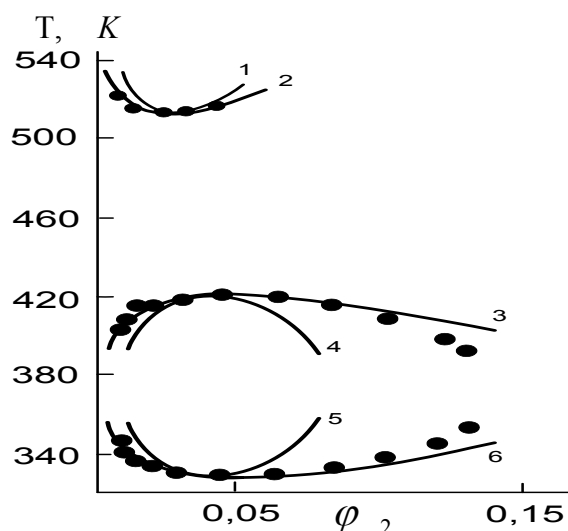


Рис. 3. Фазовые диаграммы раствора ПВС – вода.

Верхние точки – экспериментальные данные работы [21],
нижние – работы [22], кривые 2, 3, 6 – бинодали, 1, 4, 5 – спинодали.

Две НКТР, наблюдаемые для этой системы, можно объяснить изменением ориентационного порядка в растворителе и растворе. В области температур кривых 1 и 2, близ-

ких к критической температуре воды, ориентационный порядок в чистом растворителе отсутствует, в то время как в растворе он существует – парциальная энтропия смешения отрицательна. При понижении температуры степень ориентационной упорядоченности растет как в растворе, так и в растворителе, причем в растворителе растет быстрее. Парциальная энтропия смешения становится положительной – кривые 3, 4 соответствуют ВКТР. С дальнейшим понижением температуры степень ориентационной упорядоченности в растворе растет быстрее, чем в растворителе, что приводит к появлению второй НКТР – кривые 5, 6.

Множественность критических точек можно объяснить и из рассмотрения температурной зависимости энергии взаимодействия между молекулами компонентов 1 и 2 – E_{12} и средней энергии взаимодействия между молекулами компонентов E_{11} и E_{22} .

Действительно, величины $\Delta \bar{H}_1$ и $\Delta \bar{H}_2$ определяются соотношениями:

$$\Delta \bar{H}_1 = \chi_H \phi_2^2 ,$$

$$\Delta \bar{H}_2 = x \chi_H \phi_2^2 ,$$

где параметр взаимодействия $\chi_H = \frac{\Delta \omega_{12}}{kT}$ пропорционален разности энергий взаимодействия, приходящейся на один контакт, при замене контактов полимер – полимер, растворитель – растворитель на контакты полимер – растворитель,

$$\Delta \omega_{12} = E_{12} - \frac{E_{11} + E_{22}}{2} .$$

Величина $\Delta \omega_{12}$ может менять знак при изменении температуры, если зависимости E_{12} и $\frac{E_{11} + E_{22}}{2}$ от температуры различны – рис.4.

В области А $\Delta \omega_{12} = E_{12} - \frac{E_{11} + E_{22}}{2} < 0$, что соответствует НКТР. В области В

$\Delta \omega_{12} = E_{12} - \frac{E_{11} + E_{22}}{2} > 0$, что соответствует ВКТР. В области С эта величина снова меньше нуля, и наблюдается вторая НКТР.

Для растворов полимеров и лиотропных жидких кристаллов энтропия смешения выражается следующим образом [16]:

$$\Delta S_{\tilde{N}i} = -k \left[\frac{n_1}{x} \ln \varphi_1 + n_2 \ln \varphi_2 + \frac{n_1 n_2 x}{n_1 + n_2 x} \left(Z_2 \ln \frac{\alpha_1}{\beta_1} + Z_1 \ln \frac{\alpha_2}{\beta_2} \right) \right]. \quad (17)$$

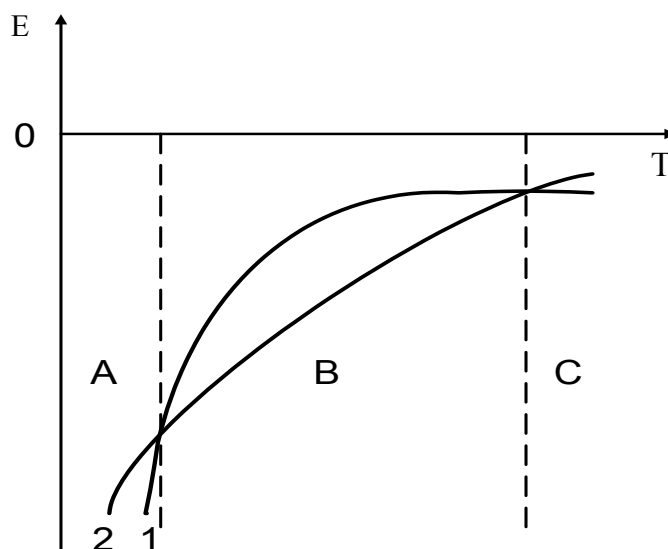


Рис. 4. Области существования ВКТР и НКТР. Кривая 1 – энергия взаимодействия между компонентами 1 и 2 – E_{12} , кривая 2 – средняя энергия межмолекулярного взаимодействия компонентов $\frac{E_{11} + E_{22}}{2}$.

Химические потенциалы компонентов в этом случае определяются как

$$\begin{aligned} \Delta \mu_1 &= \overline{\Delta H_1} - T \overline{\Delta S_1} = \left[\Delta E_{12} + RT \left(Z_2 \ln \frac{\alpha_1}{\beta_1} + Z_1 \ln \frac{\alpha_2}{\beta_2} \right) \right] \varphi_2^2 + RT \frac{1}{x} \cdot \ln \varphi_1 \\ \Delta \mu_2 &= \overline{\Delta H_2} - T \overline{\Delta S_2} = \left[\Delta E_{12} + RT \left(Z_2 \ln \frac{\alpha_1}{\beta_1} + Z_1 \ln \frac{\alpha_2}{\beta_2} \right) \right] x \varphi_2^2 + RT \ln \varphi_2. \end{aligned} \quad (18)$$

Критическая температура смешения может быть определена из условий:

$$\frac{\partial \Delta \mu_1}{\partial \varphi_1} = 0, \quad \frac{\partial^2 \Delta \mu_1}{\partial^2 \varphi_1^2} = 0.$$

Решение которых с использованием уравнений (18) дает

$$\varphi_{1cr} = \varphi_{2cr} = 1/2 ,$$

и

$$T_{cr} = - \frac{\Delta E_{12} / R}{\frac{2}{x} - \left(Z_1 \ln \frac{\alpha_2}{\beta_2} + Z_2 \ln \frac{\alpha_1}{\beta_1} \right)}$$

Представляя ΔE_{12} , как и в случае растворов полимеров, в виде линейной функции температуры:

$$\Delta E_{12} = \chi_H T_{cr} + \kappa \chi_H (T - T_{cr}) \quad (19)$$

и подставляя соотношения (18) и (19) в уравнения (6) и (7), получим для бинадали и спинодали, соответственно:

$$[\chi_H T_{cr} + \kappa \chi_H (T - T_{cr}) + RT \chi_S] \cdot \varphi_2^2 + \frac{1}{x} RT \ln(1 - \varphi_2) = 0 ,$$

$$[\chi_H T_{cr} + \kappa \chi_H (T - T_{cr}) + RT \chi_S] \cdot 2\varphi_2 - \frac{1}{x} RT \frac{1}{1 - \varphi_2} = 0 .$$

Таким образом, учет ближнего ориентационного порядка позволяет более полно описать фазовые переходы в растворах полимеров и лиотропных жидких кристаллах и в ряде случаев объяснить экспериментальные данные, которые до сих пор не имели теоретического подтверждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фрисман Э.В., Дадиванян А.К., Дюжнев Г.А. // Докл. АН СССР. 1963. Т. 153. № 5. С. 1063.
2. Фрисман Э.В., Дадиванян А.К. // Открытия. Изобретения. 1987. № 43.
3. Dadivanian A.K. // Polym. Prepr. 1975. Т. 16. №2. С. 654.
4. Бурштейн Л.Л., Малиновская В.П., Степанова Т.П. // Высокомолек. соед. Б. 1974. Т. 16. №1. С. 28.
5. Цветков Н.В., Ксенофонтов И.В., Беляева Е.В., Цветков В.Н. // Докл. РАН. . 1998. Т.361. № 4. С. 503.
6. Цветков Н.В., Ксенофонтов И.В., Куракина В.О., Аверина М.С., Кеишов М.Л., Шифрина З.Б., Русанов А.Л. // Высокомолек. соед. А. 2002. Т.44. № 2. С.297.
7. Дадиванян А.К., Джавриян Дж.М., Агасарян В.Ю., Айрапетян Г.А. // Высокомолек. соед. Б. 1981. Т. 23. №9. С. 674.
8. Platé N.A., Litmanovich A.D., Noah O.V. Macromolecular Reactions. Chichester; New York; Brisbane; Toronto; Singapore: Wiley, 1995.

9. Дадиванян А.К., Авоян Р.С., Айрапетян Г.А., Мушегян А.В., Григорян Г.Г. // Изв. АН Арм. ССР. Физика. 1977. Т.12. С.297.
10. Дадиванян А.К., Грищенко А.Е., Цветков Н.В., Рюмцев Е.И. // Высокомолек. соедин. Б. 2008. Т.50. № 10. С.1870.
11. Дадиванян А.К., Ноа О.В. // Высокомолек. соедин. А. 2007. Т. 49. №2. С.313.
12. Дадиванян А.К., Ноа О.В., Чаусов Д.Н., Игнатов Ю.А. // Высокомолек. соедин. Б. 2008. Т. 50. №2. С. 354
13. Дадиванян А.К., Чаусов Д.Н., Иконникова В.В., Рябова Ю.М. // «Лиотропные жидкие кристаллы и наноматериалы» Материалы VII международной научной конференции. Россия, Иваново. 22 – 25 сентября 2009 г.
14. Андреева В.М., Тагер А.А., Аникеева А.А., Кузьмина Т.А. // Высокомолек. соедин. Б. 1969. Т. 11. №8. С. 555.
15. Koningsveld R., Kleintjens L.A., // J. Polymer Sci. C. 1977. №61. P. 221.
16. Чаусов Д.Н., Дадиванян А.К. // Вестник Московского государственного областного университета Серия «Физика – математика». 2008. № 1. С. 22. Москва. Издательство МГОУ. 2008.
17. Дадиванян А.К., Игнатов Ю.А., Новикович В.М., Дадиванян А.К. // Вестник Московского государственного областного университета. Физика. 2007. № 1. С. 89. Москва. Издательство МГОУ. 2007.

PHASE DIAGRAMS IN SYSTEMS WITH SHORT-RANGE ORIENTATIONAL ORDER

D. Chausov*, V. Ikonnikova*, O. Noah, A. Dadivanyan***

**Moscow Region State University, 105005, Radio st., 10a, Moscow, Russia*

***M.V. Lomonosov Moscow State University, 119992, Leninskie gory*

Abstract. Influence of the short-range orientational order on phase diagrams of polymer solutions and lyotropic liquid crystals was found. Existence of binary systems with many upper and lower critical temperatures was shown. The binodals and spinodals equations were derived for lyotropic liquid crystals and polymer – solvent systems with account of the short-range orientational order.

Key words: short-range orientational order, binary systems, binodals spinodals.

КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ

УДК: 004.652.5

К ВОПРОСУ О ЦЕЛЕСООБРАЗНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПОСТРЕЛЯЦИОННЫХ СУБД ПРИ РАБОТЕ С ДАННЫМИ СЛОЖНОЙ АРХИТЕКТУРЫ

Ю.А. Тимофеев

*Московский инженерно-физический институт
115409 Москва, Каширское ш. 31*

Аннотация. Поставлена проблема использования классических реляционных баз данных при работе с динамичными блоками данных, представляющих себя объектами реализованными в виде классов объектно-ориентированных языков программирования. Предложена концепция организации построения постреляционной базы данных.

Ключевые слова: реляционные базы данных, классы.

Актуальность проблемы: ускоряется темп жизни и все большее значение приобретает вопрос о скорости разработки технического решения взаимодействия программного продукта и БД. Время, которое готовы предоставить на разработку данной связки ежегодно уменьшается. На сегодняшний день по опыту реализованных нами проектов (от кастинговых до блочных систем работы с данными) оно составляет от 14 до 60 дней, в то время как год назад эти сроки были вдвое больше. Тенденция к сокращению сроков разработки налицо. В связи с этим вопрос эффективного использования «классических» СУБД (систем управления базами данных) переживает актуализацию. Кроме того, нам предоставляется все меньше возможностей специализировать БД под конкретный вид данных. Все больше требуются универсальные решения, позволяющие сохранять объектные классы «как есть» [1].

Комплекс сложных научно-технических проблем, связанных с созданием производительных и надежных систем баз данных, не только сохраняет, но и усиливает свою актуальность с каждым днем с ростом объемов и сложности информации в целом. В настоящее время системы управления базами данных используются практически во всех сферах человеческой деятельности, связанных с хранением и обработкой информации.

Но не верно было бы считать классические СУБД панацеей для организации хранения данных. Решая часть задач по автоматизации производственных и иных процессов, они порождают проблемы, свойственные самой технологии. При организации хранения сложных данных периодически встает вопрос принудительной сериализации данных, которая далеко не всегда бывает удобна. Зачастую разработчики вынуждены искусственно ограничивать размеры данных исходя из формата полей базы данных.

Существует типичный набор проблем, связанных с СУБД: недостаточная производительность приложений, сложности при построении сложных систем данных [2], трудности моделирования данных в БД, скорость и простота разработки приложений, в том числе и для Web.

Частично вышеперечисленные проблемы могут решаться с помощью сериализации данных и нормализации БД в разрезе использования классических реляционных СУБД. Однако если размер структуры данных резко разнится от случая к случаю, данный подход является неэффективным.

При попытках создать так называемые «чисто объектные» или постреляционные системы удастся избавиться от многих недостатков реляционных СУБД [3], особенно при проектировании систем и моделировании данных, при работе с «сущностями», как с едиными информационными объектами. Но при этом теряются и такие достоинства реляционного подхода, как удобство и быстрота получения отчетов, хранение информации в структурах, пригодных для её многоаспектного анализа.

Известный факт: объектная база данных очень хорошо подходит для областей, где требуется работа с данными сложной структуры переменного объема.

В отличие от объектно-реляционных СУБД (Oracle, Microsoft SQL Server, PostgreSQL, Sav Zigzag и другие), где ядро остается реляционным, а «объектность» реализуется в виде специальной надстройки, ядро ООСУБД (объектно-ориентированной системы управления базами данных) может быть оптимизировано для типовых операций с объектами и производить операции кэширования объектов, ведение версий объектов, разделения прав доступа к конкретным объектам.

Поэтому ООСУБД имеет более высокое быстродействие на операциях, требующих доступа и получения данных, упакованных в объекты, по сравнению с реляционными СУБД, для которых необходимость выборки связанных данных ведет к выполнению дополнительных внутренних операций.

Наиболее важным новым качеством ООБД (объектно-ориентированной базы данных), которое позволяет реализовать объектно-ориентированный подход, является поведенческий аспект объектов. В прикладных информационных системах, основывавшихся на БД с традиционной организацией (вплоть до тех, которые базировались на семантических моделях данных – имена собственные), существовал принципиальный разрыв между структурной и поведенческой частями. Структурная часть системы поддерживалась всем аппаратом БД, ее можно было моделировать, верифицировать и т.д., а поведенческая часть создавалась изолированно. В частности, отсутствовали формальный аппарат, системная поддержка совместного моделирования и гарантии согласованности этих структурной (статической) и поведенческой (динамической) частей. В среде ООБД проектирование, разработка и сопровождение прикладной системы становится процессом, в котором интегрируются структурный и поведенческий аспекты. Конечно, для этого нужны специальные конструкции в существующих языках, позволяющие определять объекты и создавать на их основе прикладную систему. В настоящее время с переходом на разработку программных продуктов по принципу объектно-ориентированного программирования (ООП) данная задача не представляет большой сложности [4].

Специфика применения объектно-ориентированного подхода для организации и управления БД требует уточненного толкования классических концепций и значительного их расширения. Это определяется потребностями длительного хранения объ-

ектов во внешней памяти, ассоциативного доступа к объектам, обеспечения согласованного состояния ООБД в условиях мультидоступа и тому подобных возможностей, свойственных базам данных. Выделяются три аспекта, отсутствующие в традиционной парадигме, но обязательно требующиеся в ООБД.

Первый аспект касается потребности в средствах спецификации блоков данных при определении класса (ограничений целостности, правил обработки и т.п.)

Второй аспект – потребность в механизме определения разного рода семантических связей между объектами, вообще говоря, разных классов. Фактически это означает требование полного распространения на ООБД средств семантического моделирования данных. Потребность в использовании абстракции ассоциирования отмечается и в связи с возможностью использования ООБД в сфере автоматизированного проектирования и инженерии.

Наконец, третий аспект связан с пересмотром понятия класса. В контексте ООБД оказывается более удобным рассматривать класс как множество объектов данного типа, т.е. одновременно поддерживать понятия и типа и класса объектов[5]. Как мы можем заметить, в сообществе исследователей ООБД и разработчиков систем отсутствует полное согласие, но в большинстве практических работ используется некоторое расширение объектно-ориентированного подхода.

Как правило, база данных объединяет несколько хранилищ данных, каждое из которых ассоциируется с одним или несколькими файлами. Хранятся как метаданные (класс, атрибут, определения операций), так и пользовательские данные. В предложенной нами схеме выделяются три типа хранилищ:

- **системное хранилище** используется для хранения системы классов, создается на этапе формирования базы данных и содержит информацию о классах, о наличии и месторасположении пользовательских хранилищ;
- **пользовательское хранилище** предназначено для хранения пользовательских объектов;
- **служебное хранилище** содержит временную информацию, например сведения о заблокированных объектах, об активных транзакциях, различного вида списки запросов пользователей и т.д.

Перейдем к вопросу организации взаимодействия программной среды и базы данных. Варианты языков запросов можно разделить на две группы. Первая объединяет языки, унаследованные от SQL и представляющие собой разновидность OQL (Object Query Language) [6], языка, стандартизованного ODMG (Object Data Management Group). Объектно-реляционные СУБД используют различные варианты ограниченных объектных расширений SQL.

Вторая, сравнительно новая группа языков запросов базируется на XML. Собирательное название языков этой группы — XML QL (или XQL). Они могут применяться в качестве языков запросов в объектных и объектно-реляционных базах данных. Использование в чисто реляционных базах нецелесообразно, поскольку языком предусматривается объектная структура запроса.

Объектная модель предлагаемой архитектуры СУБД в большой степени соответствует объектной модели стандарта ODMG. В соответствии с ODMG каждый объект имеет определенный, единственный тип.

Следует заметить, что в целом стандарт ODMG оставляет противоречивые ощущения. С одной стороны, в документе содержится много интересных идей и технических спецификаций. С другой стороны, некоторые важные части стандарта кажутся недостаточно проработанными и плохо отредактированными. Местами встречаются противоречия и прямые ошибки. Но в настоящий момент это единственный общепризнанный стандарт ООСУБД.

Поведение объекта определяется операциями (методами), а состояние объекта – значениями его свойств (метаданные). Свойства и операции составляют характеристики типа. Тип определяется одним интерфейсом, которому может соответствовать одна или большее число реализаций. Объектная модель представлена на рис. 1.

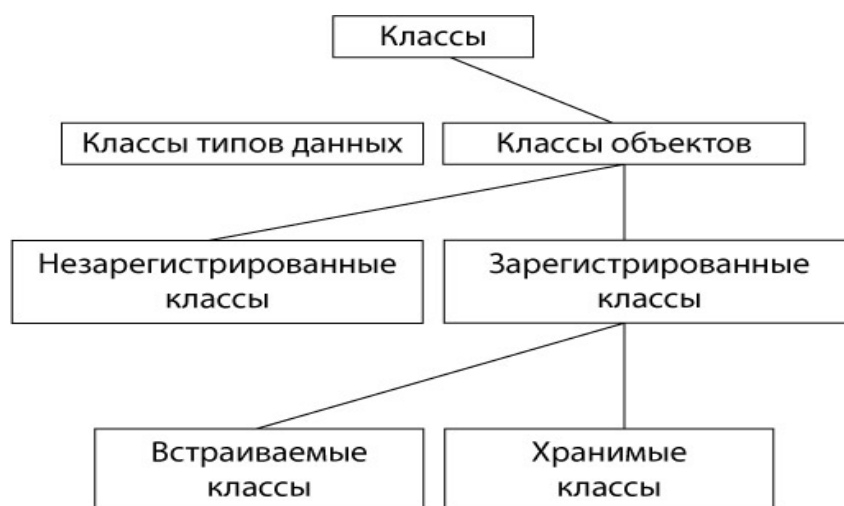


Рис 1. Объектная модель

При разработке модели данных часть объектов, исходя из их структуры, имеет смысл размещать в структурах в классических реляционных таблицах. Комбинируя подходы и сохраняя данные в разных структурах можно добиться наибольшего удобства и эффективности при работе с базами данных подобного типа [7].

Исходя из вышесказанного предлагается использовать два типа классов:

- классы типов данных;
- классы объектов.

Классы типов данных определяют допустимые значения констант (литералов) и позволяют их контролировать как в рамках реляционных таблиц, так и в виде объектных

моделей. Литерал не может существовать независимо от своего значения, в то время как объекты имеют уникальную идентификацию.

Классы типов данных подразделяется на два подкласса типов:

- атомарные;
- структурированные.

Атомарными литеральными типами являются традиционные скалярные типы данных (String, Integer, Float, Date и др.). Каждый литерал уникально идентифицируется индексом в массиве или порядковым номером в списке.

Структурированные классы позволяют сохранять заранее предопределенные блоки данных, целостность которых будет отслеживаться на уровне СУБД. Подход к реализации данного класса похож на организацию хранения нормализованного блока данных в классической реляционной базе данных.

Классы объектов предлагается целиком передать разработчику для сохранения объектно-ориентированных представлений классов из языка ООП. Разработчик может хранить метаданные для класса как отдельно, так и назначать их в виде указателей на структуру данных внутри класса.

В настоящий момент нами была реализована подобная структура базы данных в рамках реализации проекта компании ТелеКастинг, которая хранит и обрабатывает абстрактные объекты с использованием механизма «хэш таблиц». Благодаря подобной организации данных в рамках проекта удалось избежать потребности реорганизовывать структуру БД при появлении новых типов данных со стороны пользователей и в значительной мере сократить сроки разработки, так и повысить скорость работы системы в целом.

В заключение хочется добавить, что в прошлые годы много внимания уделялось вопросу трудоемкости разработки программного обеспечения. Возросшая сложность программ и объемы используемых данных не позволяют начать разрабатывать новый продукт без построения модели базы данных, рассчитанной на строго определенную задачу. Теперь на первый план начинают выходить технологии, позволяющие создавать легко сопровождаемые программы за счет использования наиболее гибких и универсальных средств разработки программного обеспечения и средств обработки и хранения данных..

Но реляционные базы данных, скорее всего, по-прежнему останутся в качестве недорогих средств разработки приложений и, во многих случаях, естественных средств представления предметной области, подобно радио и кино, которых не вытеснило телевидение.

Благодаря четному разделению данных на скалярные таблицы и блоки объектов данный подход позволит хранить данные в наиболее удобном для разработчика виде с применением собственных метаданных и свойств для индексации и поиска, используя преимущества от эффекта синергии двух подходов в реализации СУБД, что безусловно положительно скажется на сроках разработки и качестве итогового продукта.

Изложенные в настоящей работе принципы объектного проектирования базы данных и объектная технология обработки информации позволяют разработать оригинальную структуру СУБД, сетевая версия которой, построенная по архитектуре «клиент-сервер», воплощающую в себе идеи блочного хранения абстрактных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мутушев Д.М. Филиппов В.И. Объектно-ориентированные базы данных. Программирование. - М., 1995 №6.
2. Кирстен В., Ирингер М. и др. СУБД Cache'. Объектно-ориентированная разработка приложений. Питер, 2001.
3. Кренке Д. Теория и практика построения баз данных. Питер, 2005.
4. Буч Г. Объектно-ориентированное проектирование (с примерами применения) М.Конкорд. 1992.
5. Атkinson М., Бансилон Ф. и др. Манифест систем объектно-ориентированных баз данных // СУБД № 4 1995.
6. СУБД № 1 1996. Стандарт систем управления объектными базами данных ODMG-93: краткий обзор и оценка состояния Л.А.Калиниченко.
7. Data & Knowledge Engineering. Amsterdam 1996 Том 18 №1 Unifying data, behaviours, and messages in object-oriented databases. Sylvia L. Osborn, Li Yu.

ON THE QUESTION OF WHETHER TO USE POST-RELATIONAL DATABASE WHEN WORKING WITH COMPLEX DATA ARCHITECTURE

Yu. Timofeev

*Moscow Engineering Physics Institute
115409 Moscow, Russia, Kashirskoye shosse, 31*

Abstract. The following problem is raised: the use of classical relational databases when working with dynamic blocks of data representing the objects themselves implemented as classes in object-oriented programming languages. The concept of organization of building of post-relational database is offered.

Key words: relational databases, classes.

ТЕХНОЛОГИИ И МЕТОДИКИ ОБУЧЕНИЯ

УДК 681.3.07

МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

ГРАФИЧЕСКИХ ПРОГРАММ ДЛЯ СИСТЕМЫ ОБЩЕГО И ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Е.А. Антонова

*Московский государственный областной университет,
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а*

Аннотация. Рассматриваются характерные особенности графических программ при их изучении, предлагается методика использования графических редакторов в образовательном процессе. Показана возможность изучения в образовательных учреждениях графического редактора GIMP.

Ключевые слова: графические программы, методика, образовательный процесс.

Компьютерная графика – это одно из важнейших и быстро развивающихся направлений информационных технологий. Она применяется в работе самых разных профессий: художников, конструкторов, специалистов по компьютерной вёрстке, аниматоров, дизайнеров, создателей Web-страниц и мультимедиа-презентаций, разработчиков рекламной продукции, модельеров одежды и тканей, фотографов, специалистов в области теле- и видео-монтажа и др. В настоящее время появляется всё больше программ для работы с графикой, предлагаются различные аналоги популярных редакторов и сделать правильный выбор в пользу одной или другой программы очень трудно. Необходимо также учесть развитие тенденций в пользу программ свободного обеспечения: реализация программы перехода на СПО государственных учреждений продвигается с огромной скоростью. Образовательные учреждения уже получили в рамках данного проекта пакеты СПО. В рамках образовательной программы предлагается изучение графических редакторов с возможностью выбора преподавателем конкретной программы изучения. Чаще всего выбор делается в пользу уже состоявшейся, но всё ещё совершенствующейся программы Adobe PhotoShop. Данное программное обеспечение имеет огромное количество функций и различных эффектов, применяемых не только для обучения в образовательных учреждениях, но и в профессиональной сфере деятельности. В рамках образовательного процесса нет возможности рассмотреть все профессиональные возможности графического редактора в связи с ограниченным количеством учебных часов. В рамках СПО преподаватели получили возможность раскрыть основные возможности графических программ на упрощенном варианте графического редактора. Цель проведенного исследования: рассмотреть возможности разных графических редакторов, выявить сходства и различие их функциональных возможностей, выбрать оптимальную программу для использования в учебном образовательном процессе. Были рассмотрены две программы: Adobe PhotoShop и GIMP.

Назначение программы Adobe PhotoShop – создание фотореалистических изображений, ретуширование, работа с цветными сканированными изображениями, трансформации, цветокоррекция, коллажирование, цветоделение и другое. Adobe PhotoShop реализует возможность использования различных методов работы:

- с точечными изображениями,
- со слоями и контурами,

- позволяет легко изменять цветовое представление документов (битовое, в градациях серого, дуплекс, индексированные цвета, RGB или CMYK).

Adobe PhotoShop – это профессиональный графический редактор для работы с растровой графикой, прост в освоении и использовании. Имеет большую методическую базу для всех участников образовательного процесса. Использование программы упрощается и тем, что она локализована. Она использует для работы с изображениями различные цветовые модели:

- LAB - даёт возможность описывать как цвета печати, так и цвета, излучаемые монитором;
- HSB - описывает цвета и представляется в виде тона (Hue), насыщенности (Sturation), и яркости (Brightness), т.е. она описывает не цветовые составляющие, а качества световых волн, воспринимаемых глазом;
- RGB строится по принципу сочетания Красного (Red), Зелёного (Green) и Синего (Blue) различных яркостей, в режиме которого осуществляется сканирование изображения, данная модель положена в основу конструкции экрана монитора и соответствует восприятию цветов человеческим глазом;
- CMYK модель управляет цветом при печати изображения.

Работа с различными слоями даёт уникальную возможность создавать изображения различного вида и содержания. Отображение и скрытие слоя представляет возможность выбрать лучший вариант для редактирования изображения. Для отображения информации в программе используются палитры. Палитру можно свернуть или развернуть нажатием кнопки. Программа представляет возможность использования различных инструментов для редактирования изображений:

- лупа – увеличивает масштаб отображения на экране;
- штамп – используется для копирования произвольной области в различных режимах;
- фокус (размытие / резкость) – позволяет смягчить или усилить переход между цветовыми областями;
- тонирование (осветлитель / затемнитель / губка) – позволяет осветлить или затемнить участки рисунка.

Особо нужно отметить использование фильтров в программе, которые позволяют добиться различных эффектов изображения: размытия, уменьшения шумов рисунка, геометрической деформации изображения, смещения области изображения, искривления, сферизация, скручивания, освещения и многих других. Выделение различных областей рисунка предоставляет работу с определёнными областями изображения и применять к ним необходимые эффекты. Горячие клавиши - залог быстрого доступа к различным инструментам и ресурсам программы. Доступность представленного графического редактора, его многофункциональность, методическая обеспеченность программы давали ей возможность безоговорочного использования в различных отраслях и сферах деятельности людей.

Графический редактор GIMP - это растровый графический редактор свободного программного кода. Он обладает практически всеми возможностями, необходимыми для полноценной обработки растровой графики:

- возможность открывать и сохранять графические файлы большинства популярных форматов;
- полный набор средств для рисования - карандаш, перо, кисть, аэрограф, штамп;

- набор средств для преобразования изображений – поворот, масштабирование, искривление и зеркалирование, разнообразные средства выделения;
- поддержка слоев, каналов и контуров изображения;
- работа с текстом.

GIMP является единственным графическим редактором, который работает на большинстве популярных операционных платформ, включая основные версии Windows, Linux, семейство операционных систем BSD, Solais, MacOS X и некоторых других. Исходные тексты GIMP открыты всем желающим, которые могут вносить изменения в программу, дополняя её новыми функциями. GIMP умеет открывать и преобразовывать в растровый формат некоторые векторные файлы (WMF), работать с текстом и контурами при помощи векторов, что позволяет экспортировать контуры в векторном формате(SVG). Данная программа поддерживает русский язык, что упрощает возможность использования всех её функций. Горячие клавиши дают возможность оперативного применения некоторых функций программы. Как и в любой другой программе графического редактора, GIMP содержит набор различных инструментов, которые можно разделить на несколько групп:

- инструменты выделения и контуры;
- вспомогательные инструменты (лупа, получения цвета из изображения, измерение углов и расстояний – «циркуль», перемещение слоёв и выделенных областей);
- инструменты для модификации изображения (кадрирование изображения, поворот выделенных областей, масштабирование и искривление изображений, изменение перспективы и отражение слоёв);
- инструменты для рисования (текст, заливка, карандаш, кисть, ластик, аэрограф, перо, штамп, резкость и размытость изображений, осветление и затемнение штрихов).

Возможности программы не ограничиваются только инструментами - в меню можно скорректировать цветовой баланс изображений (яркость и контрастность). Производители программы предоставили возможность использования различных фильтров для коррекции изображений:

- резкость изображения – для получения четкости,
- смешение каналов – для получения черно – белого изображения,
- выделение края – для получения маски четкости изображений,
- размывание – для эффекта потери четких очертаний области.

Программа имеет возможность работы со слоями изображения. Принцип работы слоёв остаётся прежним: фоновый слой, возможность включения режимов видимости и невидимости слоя, сведение слоёв, обесцвечивание (для удаления эффекта красных глаз на фотографии) и инвертирование областей. Плюсы программы – возможность использования в любой операционной среде, изменение программного кода для включения новых функций, преобразование в растровый формат векторных файлов.

Рассмотренный графический редактор предоставляет аналогичные возможности корректировки изображений, как и Adobe PhotoShop, имея в наличии схожие функции. Однако, он не столь широко используется и этому есть свои причины, главная из которых – сравнительно небольшое методическое сопровождение, опираясь на которое возможно его изучение в образовательных учреждениях. В настоящее время разработан методический материал, предназначенный для изучения GIMP в общеобразовательных школах, в виде практических работ, формирующих базовые знания в области компью-

терной графики и навыки работы с графическим редактором. Ведётся разработка материалов для обучения студентов педагогических специальностей.

Анализ возможностей рассмотренных графических редакторов выявил, что Adobe PhotoShop обладает большим преимуществом. Имея огромное количество функций, предложенная программа приспособлена для более профессионального использования, чем для изучения в образовательных учреждениях, где необходим минимальный набор функций для ознакомления с графическими программами. Поэтому, начальный этап изучения графических программ лучше начинать с обучения на основе программы типа GIMP, обладающей минимальным набором функций. В дальнейшем обучающиеся могут применять и совершенствовать свои знания в данной области. Полученные навыки и знания о принципах работы графических редакторов легко позволяют адаптироваться к любой графической программе. Основы, заложенные в образовательных учреждениях при изучении графических программ, способствуют развитию творческих способностей и повышению интереса обучающихся к последующему изучению и применению графики в профессиональной деятельности.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Панюкова Т.А.* Лекции по растровой графике: GIMP и Adobe Photoshop. Москва: Либроком, 2009г., - 280с.
2. *Тыщенко О.Б.* Эффективная работа в Adobe PhotoShop // Компьютерная хроника, 2004, № 11, стр. 3-24.
3. *Якушин А.В.* The GIMP. Редактирование изображений. М.: ДМК – Пресс, 2005 г. – 154с.
4. <http://www.adobe.com/eeurope/education/solutions/students/>

METHODICAL FEATURES OF USING OF COMPUTER GRAPHIC PROGRAMS FOR SYSTEM OF THE GENERAL AND PROFESSIONAL EDUCATION

E. Antonova

*Moscow Region State University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. This work considers characteristic features of computer graphic programs at their studying in system of educational process, offers a method of using of graphic programs in educational process. The work analysis shows, that for studying in educational institutions where the minimum set of functions is necessary for acquaintance graphic editor GIMP approaches, further the students can apply and improve the knowledge in the domain, using for this professional graphic program Adobe PhotoShop.

Key words: graphic programs, method, educational process.
УДК 681.3.07

ПРОГРАММИРОВАНИЕ ИНТЕРАКТИВНОЙ ГРАФИКИ В СРЕДЕ A.FLASH: ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ОБУЧЕНИЯ ПРОГРАММИРОВАНИЮ И ПОЗИТИВНОЕ ВОСПИТАТЕЛЬНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

В.А. Птицын

Московский государственный областной университет,
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а

Аннотация. Рассматривается задача повышения эффективности обучения программированию студентов и обеспечения позитивного воспитательного воздействия при обучении программированию. Программирование на языке Action Script А. Flash интерактивной графики по мотивам традиционных узоров народов России предлагается как звено решения поставленной задачи.

Ключевые слова: программирование, обучение, воспитание, Action Script А. Flash.

Задачи и методы обучения программированию отслеживают развитие информационных технологий. На первом этапе, с ЭВМ работал узкий круг специалистов. Компьютерные технологии напрямую не воздействовали на общество. При обучении программированию главное внимание уделялось основным алгоритмическим структурам, типам данных и эффективности алгоритмов. Далее к кругу изучаемых тем добавляются обработка прерываний и новый тип данных – объекты. Нынешний этап характеризуется распределенными алгоритмами. Алгоритмы, стоящие «на переднем крае» стали параллельными, ориентированными на многопроцессорные ЭВМ. Изменилась и структура пользователей компьютерами: «Среди людей, пользующихся ЭВМ, квалифицированных программистов ничтожный процент» [1]. В тоже время с развитием сети Интернет миллионы людей стали пользоваться ЭВМ. На нынешнем этапе компьютерные технологии стали напрямую влиять не только на внешние факторы жизни, но и на внутренний мир миллионов людей. Многие страны стали переходить к так называемому «информационному обществу». ***Следовательно, в настоящее время при обучении студентов программированию необходимо уделять внимание не только новым технологическим вопросам программирования, но и проблемам воздействия процесса обучения на внутренний мир обучаемых, то есть необходимо учитывать факторы воспитания.*** Эта необходимость нашла отражение в новых государственных стандартах на обучение, в которых в чисто компьютерные дисциплины вписаны вопросы воспитания.

С учетом особенностей нынешнего этапа развития информационных технологий и социальных последствий этого развития можно поставить следующие задачи формирования методики обучения программированию в современных условиях:

1. Обучение программированию должно быть высокоэффективным: за относительно малое количество учебных часов обучающиеся должны усвоить как азы программирования, которым студенты специализированных ВУЗов обучались уже в 1970-х годах, так и новые разделы программирования.
2. Обучение программированию необходимо производить с учетом задачи обеспечения позитивного воспитательного воздействия на студентов.

Обе эти задачи необходимо решать взаимосвязано, с учетом таких объективных факторов как уменьшение количества учебных часов, отводимых государственными программами на изучение информатики и программирования, а также общее снижение уровня подготовки в средних школах будущих студентов – первокурсников, большинство которых не проходили программирования в школьном курсе информатики.

При этом вопрос «чему учить?» не стоит, на него отвечают государственные стандарты. Остается вопрос «как учить?», то есть методика обучения. Важным шагом в выборе методики является вопрос о выборе языков программирования, которые необходимо использовать при обучении информатике (на первом курсе как вводного курса), а затем программирования на старших курсах. Для педагогических ВУЗов при подготовке будущих учителей информатики выбор языков программирования необходимо увязывать со сложившимися традициями школ и олимпиадного школьного движения по программированию. Целесообразная последовательность языков программирования автору представляется следующей. На первом курсе в качестве базового языка на практических занятиях использовать один из процедурных языков. Основным и существенным недостатком изучения процедурного языка на первом курсе является то, что человек, научившийся первому не объектно-ориентированному языку, в последствие с большим трудом воспринимает объектно-ориентированные подходы. Но необходимость на первом курсе изучить на практике основные алгоритмические структуры без каких либо интерфейсных или иных «излишеств» при нынешней стартовой подготовке первокурсников практически не оставляет альтернативы процедурному языку. В тоже время изучение программирования уже на первом курсе не следует сводить к подробному изучению какого-либо языка. Необходимо на практических занятиях на примере одного из языков подробно изучать основные алгоритмические структуры, а в лекционном курсе проводить сравнительные параллели между различными языками. Следующими базовым языком для изучения программирования несомненно должен быть один из универсальных объектно-ориентированных языков.

Однако для будущего учителя информатики указанных языков недостаточно: необходимо познакомиться еще и с языками, преимущественно ориентированными на сеть Интернет. И здесь безусловным лидером среди кандидатов на изучение является язык Action Script среды A.Flash.

Рассмотрим преимущества и недостатки данного языка с точки зрения, поставленной нами в статье задачи. Преимущества. Action Script среды A.Flash является наиболее распространенным и бурно развивающимся языком для создания мультимедийных приложений сети Интернет, что повышает мотивацию студентов при его изучении. Кроме того, с помощью среды A.Flash можно создавать любые мультимедийные приложения, викторины, игры, выполняемые на локальном компьютере. Эти приложения будут иметь меньшую производительность, чем приложения, написанные, например, на СИ++, но трудозатраты на их создания несоизмеримо меньшие. Кроме того, новая технология AIR (Adobe integrated runtime) позволяет создавать локальные программы, которые составляют единую систему с Интернет приложениями. По этим причинам среда A.Flash в последние годы набирает все большую популярность в школе, и, следовательно, будущий учитель информатики должен быть знаком с данной средой не только в общих чертах, но и практически. Второе преимущество. Язык Action Script в последней своей версии (3.0) – полностью объектно-ориентированный, поэтому при его изучении можно закреплять и углублять знания, полученные при знакомстве с другими объектно-ориентированными языками.

К технологическим недостаткам языка Action Script 3.0 среды A.Flash можно отнести малое количество числовых типов данных: только целые и вещественные без градаций по длине слов. Это не позволяет знакомиться с важными нюансами программирования, и рассматривать данный язык как альтернативу более универсальным языкам. По

этой причине изучение языка Action Script среды A.Flash целесообразно осуществлять на курсах по выбору.

При изучении языка Action Script среды A.Flash будущими учителями информатики представляется целесообразным заниматься в основном программированием интерактивной графики. Причины предпочтения интерактивной графике следующие:

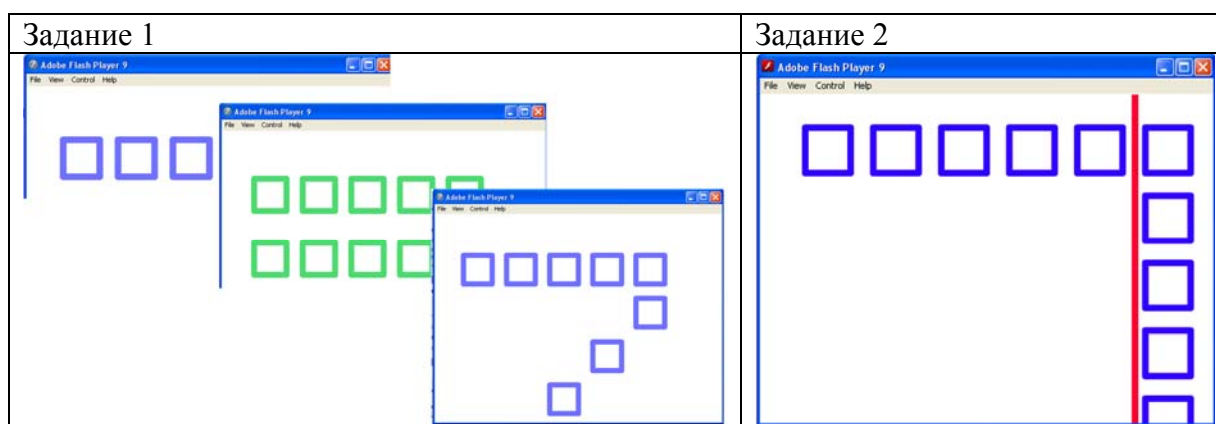
1. Запрограммированные графические образы обладают значительно большей наглядностью и эмоциональным воздействием, чем, например, выходные числовые данные. Если графическое изображение запрограммировано неверно, то это сразу видно, что повышает эффективность обучения программированию. Наглядность интерактивности, вносимой именно в графические образы, особенно очевидна.
2. При изучении других языков программирования на более ранних этапах обучения, вследствие традиции или из-за ограниченности времени обычно работают с выходной числовой информацией, поэтому программирование интерактивной графики повышает мотивацию студентов к изучению данного курса.
3. Команды работы с графикой в A.Flash универсальны (близки по структуре и синтаксису к другим языкам программирования), ясны и прозрачны (лишены нагромождений специфических команд, свойственных задачам, например, обмена данными). Кроме того, при построении запрограммированных графических образов необходимо обращаться к основным алгоритмическим структурам: операторам условного перехода и циклам разных видов; а это полезно любому студенту.
4. При работе с запрограммированной графикой открывается возможность осуществлять положительное воспитательное воздействие на студентов, подбирая соответствующим образом задачи на программирование.

Необходимо теперь определиться, что понимается в данной статье под положительным воспитательным воздействием. Рассмотрим для этого одно из противоречий информационного общества, важнейшим технологическим признаком которого является сеть Интернет. Это противоречие: «между тенденцией глобализации, которую несет информационное общество и в первую очередь сеть Интернет и необходимостью патриотического и духовного воспитания детей и молодежи в соответствии с традициями России» [2]. Такая задача не является уникальной для нашей страны. Задачи воспитания в соответствии с традициями родины являются очевидными в любой стране. Поэтому при обучении программированию для сети Интернет из всех возможных направлений педагогического воздействия представляется необходимым в первую очередь выделить патриотическое воспитание. Это особенно актуально, поскольку обучаются будущие учителя детей и будущие творцы визуальной среды сети Интернет. В качестве методики патриотического воспитания при обучении программированию автор выбрал предложение студентам, будущим учителям информатики, запрограммировать традиционные узоры одного из народов России – на выбор. Задание по созданию узоров, помимо воспитывающего воздействия, имеет то преимущество, что они могут быть построены преобразованиями нескольких элементарных фигур, содержат повторяющиеся элементы. Поэтому при программном построении узоров не требуется большой объем рутинных трудозатрат, но необходима определенная предварительная алгоритмическая проработка. Оказалось, очень немногие студенты способны самостоятельно подобрать образцы узоров для программирования, поэтому тем студентам, которые не представили

своих предложений по образцам для программирования, даются возможные варианты, но предлагается самостоятельно придумать их возможные реакции на действия пользователей. Воспитательное воздействие, в том числе и визуальной среды, формируется по капельке, а эти капельки становятся весомее, если студент сам работает с этой средой в процессе обучения программированию.

В качестве *первого примера* рассмотрим использование программного рисования на Action Script A.Flash для закрепления темы «циклы».

Первое задание на эту тему напоминает студентам, как использовать циклы с фиксированным количеством просчетов. *«Используя циклические алгоритмические конструкции и относительную систему координат, программно нарисуйте картинку, аналогичные приведенным в таблице. Указание: программирование рисования квадрата оформите в виде функции».*



Второе задание на тему циклы требует скомбинировать циклы с фиксированным количеством просчетов и циклы с условием. *«Для заданных: параметров квадрата, шага смещения квадратов и положения вертикальной черты-границы запрограммируйте картинку, аналогичную приведенной ниже. Требования. Первое: квадраты в горизонтальном ряду не должны пересекать вертикальной черты-границы (то есть количество квадратов в горизонтальном ряду определяется входными данными, задающими параметры базового квадрата и положение черты-границы). Второе: количество квадратов в вертикальном ряду фиксированное (их количество и положение этого ряда относительно черты-границы задается входными данными)».*

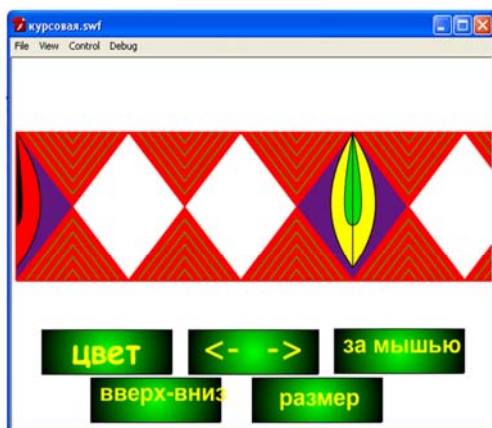
Практика показала, что такие задания (особенно второе из них) оказываются не легки большинству студентов, следовательно, эти задания целесообразны. Такие задания позволяют студентам вспомнить особенности использования циклов с фиксированным количеством просчетов и циклов с условием. Отметим, что в рассматриваемом случае данные задания давались студентам старших курсов, уже знакомых с циклическими алгоритмическими конструкциями. Однако из практики преподавания данной темы в средней школе можно констатировать, что аналогичные задания весьма эффективны и при изучении темы циклов в средней школе. Графическая наглядность помогает уяснить само понятие цикла, а также особенности применения различных циклов.

В качестве *второго примера* перечислим типовые примеры организации интерактивности, которые изучают студенты, прежде чем начать формировать интерактивности для своей задачи: *координаты мыши отображаются в окнах вывода; создание*

пользовательского курсора; картинка (нарисованная программно или ручным способом) перемещается в соответствии с командами, подаваемыми с клавиатуры; картинка (нарисованная программно или ручным способом) изменяет свои геометрические размеры и/или положение на экране в зависимости от положения мыши на экране; один конец прямой линии неподвижен, другой следует за мышью; кривая линия рисуется мышью; над картинкой программно располагается кнопка с регулируемой прозрачностью и программно нарисованной рамкой или другие рисунком.

Отметим, что для создания интерактивности A.Flash предлагает два механизма: более универсальный – «слушатели», и уникальный для данной среды «кадровый цикл». Из соображений преемственности обучения по отношению к другим программным средам при изучении интерактивности, в частности, указанных выше примеров, основное внимание уделяется «слушателям». Когда A.Flash предлагает разные альтернативы решения одной и той же задачи: универсальные и специфические для A.Flash, предпочтение следует отдавать универсальным приемам, предоставляя студентам возможность при их желании вникнуть в особенности и области возможного применения универсальных и уникальных приемов.

В качестве последнего примера приведем снимок экрана одного из учебных интерактивных орнаментов, выполненных студентами 5 курса отделения информатики.



При нажатиях соответствующих кнопок изменяется характер интерактивности:

1. Случайное изменение цветов при движении мыши.
2. Движение картинки вправо-влево или вверх-вниз при нажатии стрелок клавиатуры.
3. Следование картинки за мышью.
4. Изменение размеров картинки в зависимости от положения мыши на экране.

Таким образом, программирование интерактивной графики в среде A.Flash позволяет эффективно углублять знания и навыки программирования или изучать программирование. При этом открывается возможность осуществлять позитивное воспитательное воздействие.

ЛИТЕРАТУРА

1. Королев Л.Н., Миков А.И. Введение в компьютерные науки. Высшая школа. М. 2003.
2. Птицын В.А. Учебно-воспитательная Интернет система как один из инструментов обучения информатике и воспитания детей в информационную эпоху. Материалы

XX Международной конференции «Применение новых технологий в образовании». Троицк. 2009.

**PROGRAMMING INTERACTIVE SCHEDULES IN A.FLASH
ENVIRONMENT: INCREASE OF THE LEARNING EFFICIENCY TO PROGRAM-
MING AND POSITIVE EDUCATIONAL INFLUENCE**

V. Ptitsyn

*Moscow Region State University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. The problem of increase of a learning efficiency to programming of students and maintenance of positive educational influence is considered at training to programming. Programming in language Action Script A. Flash interactive schedules on motives of traditional patterns of peoples of Russia is offered as a part of the decision of a task in view.

Key words: programming, training, education, Action Script A. Flash.

НАШИ АВТОРЫ

Антонова Елена Александровна - Московский государственный областной университет (МГОУ), 105005, Москва, ул. Радио, 10а, аспиранка кафедры Вычислительной математики и МПИ (AntonovaAlena@inbox.ru).

Банникова Евгения Михайловна - Московский государственный областной университет, администратор учебно-методического отдела № 3, Института открытого образования, 105005, Москва, ул. Радио, 10а, аспирантка кафедры общей физики janebannikova@gmail.com.

Беляев Виктор Васильевич - Московский государственный областной университет, 105005, Москва, ул. Радио, 10а, заведующий кафедрой Теоретической физики, заведующий лабораторией нанотехнологий, доктор технических наук старший научный сотрудник vic_belyaev@mail.ru.

Быков Иван Сергеевич - ФГУП «ИРЕА», 103076, Москва, Богородский вал, 3, ireon@mail.ru.

Гладков Сергей Октябрьнович - Московский государственный областной университет, 105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а, профессор кафедры математического анализа и геометрии, доктор физико-математических наук профессор sglad@newmail.ru.

Голов Александр Николаевич - Московский государственный областной университет, 105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а, доцент кафедры Теоретической физики, кандидат физико-математических наук доцент.

Гринберг Евгений Ефимович - ФГУП «ИРЕА», 103076, Москва, Богородский вал, 3, ireon@mail.ru,

Дадиванян Артем Константинович - Московский государственный областной университет (МГОУ), 105005, Москва, ул. Радио, 10а, профессор кафедры Теоретической физики, доктор физико-математических наук профессор.

Иконникова Вероника Витальевна - Московский государственный областной университет (МГОУ), 105005, Москва, ул. Радио, 10а, аспирантка кафедры Теоретической физики.

Кузнецов Михаил Михайлович - Московский государственный областной университет, 105005, Москва, ул. Радио, 10а, доцент кафедры Теоретической физики, доктор физико-математических наук доцент.

Кулешова Юлия Дмитриевна - Московский государственный областной университет, 105005, Москва, ул. Радио, 10а, аспирантка кафедры Теоретической физики.

Мазаева Вера Генриховна - ГНЦ Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений, Москва, Россия.

Минько Анатолий Антонович - НИИ прикладных физических проблем, Минск, Белоруссия.

Наумов Аркадий Валерьевич - ФГУП «ИРЕА», 103076, Москва, Богородский вал, 3, ireon@mail.ru,

Нелаев Александр Владимирович - Московский государственный областной университет, 105005, Москва, ул. Радио, 10а, доцент кафедры Математического анализа и Геометрии, кандидат физико-математических наук доцент.

Ноа Ольга Викторовна - Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (МГУ), 119992, Москва, Ленинские горы.

Птицын Владимир Анатольевич - Московский государственный областной университет, 105005, Москва, ул. Радио, 10а, Старший преподаватель кафедры Вычислительной математики и МПИ vl_pt@mail.ru.

Сурнычев Вячеслав Владимирович - Московский государственный областной университет, 105005, Москва, ул. Радио, 10а, доцент кафедры Общей физики, кандидат физико-математических наук con-rad@nm.ru

Тимофеев Сергей Николаевич - НИИ прикладных физических проблем, Минск, Белоруссия.

Тимофеев Юрий Алексеевич Московский инженерно-физический институт (МИФИ), 115409, г.Москва, Каширское ш., 31, аспирант.

Чаусов Денис Николаевич Московский государственный областной университет (МГОУ), 105005, Москва, ул. Радио, 10а.

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Нелаев А.В. Обобщение интеграла типа коши, ассоциированного с бикругом 3

ФИЗИКА

Голов А.Н. Эволюция газодисперсного облака с вязкой газовой фазой в поле потенциальных сил 17

Гладков С.О. К вопросу о поглощении электромагнитного излучения металлическими наночастицами 28

Богданов Д.Л., Геворкян Э.В., Банникова Е.М., Обыденков Ю.Н., Барабанова Н.Н., Ларионов А.Н. Влияние давления на вращательную вязкость нематических жидких кристаллов 33

Сурнычев В.В., Беляев В.В., Банникова Е.М. Исследования релаксационных свойств нематического жидкого кристалла ЖК–1282 в окрестности температуры просветления акустическим методом 43

Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д. Об учете поступательной неравновесности при пиролизе углеродосодержащих веществ в ударных волнах 48

Беляев В.В., Мазаева В.Г., Минько А.А., Тимофеев С.Н. Кремнийорганические пленки с молекулярным микрорельефом для ориентации жидких кристаллов ... 52

Наумов А.В., Гринберг Е.Е., Быков И.С., Беляев В.В. Особенности физических и химических методов для экологичной регенерации отходов производства электронной промышленности 57

Чаусов Д.Н., Иконникова В.В., Ноа О.В., Дадиванян А.К. Диаграммы состояния в системах с ближним ориентационным порядком 63

90

КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ

<i>Тимофеев Ю.А.</i> К вопросу о целесообразности использования постреляционных субд при работе с данными сложной архитектуры	73
---	----

ТЕХНОЛОГИИ И МЕТОДИКИ ОБУЧЕНИЯ

<i>Антонова Е.А.</i> Методические особенности использования графических программ для системы общего и профессионального образования	79
<i>Птицын В.А.</i> Программирование интерактивной графики в среде a.flash: повышение эффективности обучения программированию и позитивное воспитательное воздействие	83

НАШИ АВТОРЫ	89
--------------------------	----

CONTENTS

MATHEMATICS

<i>Nelayev A.</i> Generalization koshi's integral type connected with twice-circle	3
--	---

PHYSICS

<i>Golov A.</i> Evolution gas-dispersed clouds with a viscous gas phase in the field of potential forces	17
<i>Gladkov S</i> On question of electromagnetic radiation's absorption by metallic nanoparticles	28
<i>Bogdanov D., Gevorkyan E., Bannikova E., Obidenkov J. Barabanova N., Larionov A.</i> Effect of pressure on the rotational viscosity of nematic liquid crystals	33
<i>Surnichov V., Belyaev V., Bannikova E.</i> Acoustic study of relaxation properties of zhk-1282 nematic liquid crystal in vicinity of nematic-isotropic phase transition	43
<i>Kuznetsov M., Kuleshova Ju.</i> On the translational nonequilibrium pirols of carbone materials	48
<i>Belyaev V., Mazaeva V., Min'ko A., Timofeev S.</i> Organosilicon films with molecular microrelief to align liquid crystals	52
<i>Naumov A., Grinberg E., Bykov I., Belyaev V.</i> Special features of both physical and chemical methods of ecologic regeneration of electronic components manufacturing wastes	57
<i>D. Chaousov D., Ikonnikova V., Noah O., Dadivanyan A.</i> Phase diagrams in systems with short-range orientational order	63

COMPUTER SCIENCES

<i>Timofeev Yu.</i> On the question of whether to use post-relational database when working with complex data architecture	73
--	----

TECHNOLOGIES AND TECHNIQUES OF TRAINING

<i>Antonova E.</i> Methodical features of using of computer graphic programs for system of the general and professional education	79
<i>Ptitsyn V.</i> Programming interactive schedules in a.flash environment: increase of the learning efficiency to programming and positive educational influence	83
OUR AUTHORS	89

УДК 517.55

Обобщение интеграла типа коши, ассоциированного с бикругом / Нелаев А.В. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.3-16.

. Рассматривается обобщение интеграла типа Коши, ассоциированного с бикругом. Основное внимание уделено вскрытию обобщенно-аналитических свойств рассматриваемого интеграла вне бикруга.

Библиогр.3.

УДК.533.72

Эволюция газодисперсного облака с вязкой газовой фазой в поле потенциальных сил / Голов А.Н. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.17-27.

Найдена нестационарная статистическая функция распределения для микроскопической модели системы дисперсных частиц в квазинепрерывной вязкой среде и в поле потенциальных сил. Получено выражение плотности облака дисперсных частиц, эффективно представляемого квазинепрерывной средой в смысле кинетической теории. Выявлены основные закономерности эволюции широкого плоского облака.

Библиогр.12.

УДК 539.19

К вопросу о поглощении электромагнитного излучения металлическими наночастицами / Гладков С.О. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.28-32.

Показано, что для размеров наночастицы $R \ll \lambda, l_{ee}$ сечение поглощения следует вычислять с помощью квантово – механических принципов и считать температуру электронов равной нулю. В подобных условиях функцию распределения электронов вводить не правомерно, а сечение поглощения, как показывает чисто квантовый расчет, оказывается довольно сложной функцией от частоты внешнего поля.

Ил.1. Библиогр.6.

УДК 532.783:534.6

Влияние давления на вращательную вязкость нематических жидких кристаллов / Богданов Д.Л., Геворкян Э.В., Банникова Е.М., Обыденков Ю.Н., Барабанова Н.Н., Ларионов А.Н. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.33-43.

Экспериментально исследовано воздействие вращающегося магнитного поля на анизотропию коэффициента поглощения ультразвука в нематических жидких кристаллах. Предложен возможный механизм зависимости коэффициента вращательной вязкости от давления и температуры.

Ил.6. Табл.3. Библиогр.12.

УДК 532.783

Исследования релаксационных свойств нематического жидкого кристалла ЖК-1282 в окрестности температуры просветления акустическим методом / Сурнычев В.В., Беляев В.В., Банникова Е.М. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.43-47.

Представлены результаты экспериментальных исследований вязко-упругих свойств нематического жидкого кристалла (НЖК) ЖК-1282 методами акустической спектроскопии в диапазоне частот от 3 до 63 МГц и интервале температур от 290 до 360 К, температурные зависимости плотности и коэффициента сдвиговой вязкости. Рассчитаны значения термодинамических констант, времени релаксации и его критический показатель.

Ил.1. Табл.3. Библиогр.5.

УДК 533 6.011

Об учете поступательной неравновесности при пиролизе углеродосодержащих веществ в ударных волнах / Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.48-52.

Исследована химическая релаксация релеевского газа в ударной волне. Аналитически вычислены функция распределения пар молекул и константа поступательно неравновесной скорости пиролиза типичных углеродосодержащих летучих веществ.

Табл.1. Библиогр.3.

УДК 532.783

Кремнийорганические пленки с молекулярным микрорельефом для ориентации жидких кристаллов / Беляев В.В., Мазаева В.Г., Минько А.А., Тимофеев С.Н. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.52-57.

Созданы новые кремнийорганические соединения (КОС) на основе циклических и линейных силоксанов с различной структурой заместителей, обеспечивающей микрорельеф с размером в диапазоне размеров молекулярных фрагментов. Измерены характеристики ориентации жидких кристаллов (ЖК) на пленках исследованных КОС. Получена однородная планарная ориентация ЖК с углом наклона от 0,7°

до 1,9°. Увеличение глубины микрорельефа приводит к небольшому увеличению угла наклона. Азимутальное сцепление лучше для пленок КОС без молекулярного микрорельефа или для пленок КОС, молекулы которых содержат полярную группу.

Табл.2. Библиогр.7.

УДК 532.783

Особенности физических и химических методов для экологичной регенерации отходов производства электронной промышленности / Наумов А.В., Гринберг Е.Е., Быков И.С., Беляев В.В. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.57-63.

Рассмотрен ряд вопросов, связанных с регенерацией отходов производства кремниевых и интерметаллидных $A^{III}B^V$ компонентов электронной и промышленной промышленности. Показано, что ряд экологических проблем этих производств может быть решен при использовании регенерации с применением различных физических и химических методов.

Ил.2. Библиогр.9.

УДК 541.64

Диаграммы состояния в системах с ближним ориентационным порядком / Чаусов Д.Н., Иконникова В.В., Ноа О.В., Дадиванян А.К. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.63-72.

Установлено влияние ближнего ориентационного порядка на фазовые диаграммы растворов полимеров и лиотропных жидких кристаллов. Показано существование бинарных систем с более чем одной верхней и нижней критическими температурами растворения. Выведены уравнения бинодалей и спинодалей для лиотропных жидких кристаллов и систем полимер – растворитель с учетом ближнего ориентационного порядка.

Ил.4. Библиогр.17.

УДК 004.652.5

К вопросу о целесообразности использования постреляционных субд при работе с данными сложной архитектуры / Тимофеев Ю.А. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.73-78.

Поставлена проблема использования классических реляционных баз данных при работе с динамичными блоками данных, представляющих себя объектами реализованными в виде классов объектно-ориентированных языков программирования. Предложена концепция организации построения постреляционной базы данных.

Ил.1. Библиогр.7.

УДК 681.3.07

Методические особенности использования графических программ для системы общего и профессионального образования / Антонова Е.А. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.79-82.

Рассматриваются характерные особенности графических программ при их изучении, предлагается методика использования графических редакторов в образовательном процессе. Показана возможность изучения в образовательных учреждениях графического редактора GIMP.

Библиогр.4.

УДК 681.3.07

Программирование интерактивной графики в среде a.flash: повышение эффективности обучения программированию и позитивное воспитательное воздействие / Птицын В.А. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №1. С.83-88.

Рассматривается задача повышения эффективности обучения программированию студентов и обеспечения позитивного воспитательного воздействия при обучении программированию. Программирование на языке Action Script A. Flash интерактивной графики по мотивам традиционных узоров народов России предлагается как звено решения поставленной задачи.

Ил.2. Библиогр.2.

ПРАВИЛА

подготовки рукописей, представленных для опубликования в журнале
«Вестник Московского государственного областного университета.
Сер. Физика - математика»

Для публикации научных работ в выпусках серии «Вестник МГОУ» принимаются статьи на русском языке. Публикуются научные материалы преимущественно докторантов, аспирантов, соискателей, преподавателей ВУЗов, докторов и кандидатов наук.

Требования к оформлению статей. Статья должна быть представлена:

- в текстовом варианте (текст статьи должен быть подписан всеми авторами);
- в виде документа MS Word (с расширением doc);
- в виде файла в формате rtf;

Файл должен содержать построчно:

На русском языке	УДК (в верхнем левом углу первого листа рукописи) НАЗВАНИЕ СТАТЬИ – прописными буквами Фамилия, имя, отчество (полностью) Полное наименование организации (в скобках – сокращенное), почтовый адрес Должность (другие сведения, например, E-mail, телефон) Аннотация (1 абзац до 400 символов) под заголовком «АННОТАЦИЯ»
На английском языке	НАЗВАНИЕ СТАТЬИ – прописными буквами Фамилия (полностью), инициалы Полное наименование организации, город Аннотация (1 абзац до 400 символов) под заголовком «ABSTRACT»
На русском	Объем статьи ограничен темя уровнями: а) 12 страниц с числом иллюстраций до пяти (к этим статьям предъявляются повышенные требования); б) 6 страниц с числом иллю-

языке	страций до трех (содержатся основные результаты без излишних деталей выводов и доказательств); в) 4 страницы с числом иллюстраций до двух (выходят в разделе краткие сообщения вне очереди). Список использованной литературы под заголовком «ЛИТЕРАТУРА»
-------	--

Формат страницы – А4, книжная ориентация. Поля – 2,5 см. Шрифт Times New Roman Cyrillic, цвет шрифта черный, размер 12 пикселей, междустрочный интервал – полуторный.

Запрещены специфические действия над текстом: уплотнение интервалов, использование цветowych заливок, «красные строки», центрирование, табуляция, отступы, переносы в словах (делаемые автором), сноски (лучше их оформлять в виде примечаний, замечаний и т.п.). Не допускаются сокращения слов, имен, названий, за исключением общепринятых (и оговоренных).

Формулы нумеруются (справа) только те, на которые в тексте имеются ссылки.

Рисунки и таблицы допускаются в том случае, если описать процесс в текстовой форме невозможно. В этом случае каждый из объектов не должен превышать указанные размеры страницы, а шрифт в нем – 12 пикселей. Возможно использование только вертикальных таблиц и рисунков. Запрещены цветowe заливки, применение «фонов».

Рисунки, схемы, графики выполняются на отдельных листах в формате, обеспечивающем ясность передачи деталей. Места расположения иллюстраций в тексте должны быть указаны простым карандашом на полях. На обороте иллюстрации должны быть написаны фамилия автора и название статьи. Текст к иллюстрациям, а также таблицы следует поместить на отдельных страницах.

Все формулы должны быть созданы с использованием компонента Microsoft Equation.

Абзацы должны быть отделены друг от друга пустой строкой (дополнительным «Enter»).

Список литературы должен содержать библиографические сведения о всех публикациях, упоминаемых в статье, и не должен содержать указаний на работы, на которые в тексте нет ссылок. Располагать публикации в списке следует в порядке упоминания о них в статье. Список литературы приводится на отдельном листе с обязательным указанием следующих данных: для книг (монография, сборник и т.д.) - фамилия и инициалы автора, название книги, издательство, место издания (город), год издания; для журнальных статей – фамилия и инициалы автора, название статьи, название журнала, год издания, том, номер, выпуск, страницы (первая и последняя).

Ссылки на неопубликованные работы не допускаются.

Редакционная коллегия оставляет за собой право на редактирование статей, хотя с точки зрения научного содержания авторский вариант сохраняется. Статьи, не соответствующие указанным требованиям, решением редакционной коллегии серии не публикуются и не возвращаются (почтовой пересылкой).

В случае принятия статьи, условия опубликования оговариваются с ответственным редактором.

Ответственный редактор серии «Физика-математика» декан физико-математического факультета, доктор технических наук, профессор Бугримов Анатолий Львович.

Адрес редколлегии серии «Физика-математика» «Вестника МГОУ»: 105005, г.Москва, ул. Радио, д.10-а, комн. 36. Тел. (495) 261-09-48