

ISSN 2072-8549



Вестник

МОСКОВСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
ОБЛАСТНОГО
УНИВЕРСИТЕТА

Серия

ФИЗИКА-
МАТЕМАТИКА

2013 / № 2

МАТЕМАТИКА

УДК 519.6

ПРИБЛИЖЕННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ОСЦИЛЛИРУЮЩИХ ИНТЕГРАЛОВ ТРЕХ ПЕРЕМЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНТЕРФЛЕТАЦИИ ФУНКЦИЙ

О.Н. Литвин, О.П. Нечуйвистер

Украинская инженерно-педагогическая академия (г. Харьков)

Аннотация. При решении задач трехмерной компьютерной томографии, цифровой обработки сигналов и многих других необходимо рассматривать математические модели, где в качестве данных используются не только значения функции в узловых точках, но и следы функции на системе линий или плоскостей. В статье рассматривается и исследуется кубатурная формула вычисления осциллирующего интеграла функции трех переменных с использованием операторов сплайн-интерфлетиции. Информация о функции задана её следами на взаимноперпендикулярных плоскостях. На классе Гельдера получена оценка погрешности кубатурной формулы. Доказано, что эту оценку также можно получить через оценки погрешностей соответствующих квадратурных формул.

Ключевые слова: кубатурная формула, осциллирующие интегралы, класс Гельдера, сплайн-интерфлетиция.

Введение. При изучении известных математических моделей и построении новых все чаще в качестве данных используются следы функции на системе линий или плоскостей. Такие модели возникают, например, при решении задач трехмерной компьютерной томографии, цифровой обработки сигналов. Поэтому построение кубатурных формул с использованием таких информационных операторов на данный момент является актуальной задачей, которую позволяет решать аппарат интерликации [2 с. 146-249] и интерфлетиции функций [2 с. 383-417]. Результаты применения теории интерликации и интерфлетиции к приближенному вычислению многомерных осциллирующих интегралов представлены, например, в [6, р. 90-96; 7, р. 45-56]. В данной работе для решения этой же задачи построена кубатурная формула с использованием операторов сплайн-интерфлетиции. В качестве данных заданы следы неосциллирующего множителя подинтегральной функции на системе взаимноперпендикулярных плоскостей. Получена оценка погрешности кубатурной формулы на классе Гельдера. Заметим, что оценки самих многомерных осциллирующих интегралов исследованы в [1, с. 211]. Задача приближенного вычисления многомерных интегралов от быстроосциллирующих функций с использованием асимптотических методов, методов Файлона, Левина рассматривалась в работах [4, р. 7-35; 5, р. 11-17]. В этих методах использовалась информация о следах неосциллирующего множителя внутри и на границе n -мерного куба, но на других классах функций.

1. Кубатурная формула приближенного вычисления интеграла.

Пусть $C_{\alpha,L,\tilde{L}}^3$, $0 < \alpha \leq 1$ – класс действительных функций трех переменных, определенных на $G = [0,1]^3$ и

$$\begin{aligned} |f(x_1, y, z) - f(x_2, y, z)| &\leq L|x_1 - x_2|^\alpha, \\ |f(x, y_1, z) - f(x, y_2, z)| &\leq L|y_1 - y_2|^\alpha, \\ |f(x, y, z_1) - f(x, y, z_2)| &\leq L|z_1 - z_2|^\alpha, \end{aligned}$$

а также

$$\begin{aligned} &|f(x_1, y_1, z_1) - f(x_2, y_1, z_1) - f(x_1, y_2, z_1) - f(x_1, y_1, z_2) + f(x_2, y_2, z_1) + f(x_2, y_1, z_2) + \\ &+ f(x_1, y_2, z_2) - f(x_2, y_2, z_2)| \leq \tilde{L}|x_1 - x_2|^\alpha |y_1 - y_2|^\alpha |z_1 - z_2|^\alpha. \end{aligned} \quad (1)$$

Определение. Под следом функции $f(x, y, z)$ на плоскостях $\{(x, y, z): x = x_k, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1\}$ понимаем $f(x_k, y, z)$, $0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1$.

Следы функции на других плоскостях определяются аналогично.

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} h_{10}(x) &= \begin{cases} \frac{x-x_1}{-\Delta}, & x_0 \leq x < x_1, \\ 0, & x \geq x_1, \end{cases} \quad h_{1\ell}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_{\ell-1}, \\ \frac{x-x_\ell}{\Delta}, & x_{\ell-1} \leq x < x_\ell, \end{cases} \\ h_{1k}(x) &= \begin{cases} 0, & x \leq x_{k-1}, \\ \frac{x-x_{k-1}}{\Delta}, & x_{k-1} < x < x_k, \\ \frac{x-x_{k+1}}{-\Delta}, & x_k \leq x < x_{k+1}, \\ 0, & x \geq x_{k+1}, \end{cases} \quad x_k = k\Delta, \quad \Delta = \frac{1}{\ell}, \quad k = \overline{1, \ell-1}. \end{aligned}$$

Функции $h_{20}(y)$, $h_{2j}(y)$, $h_{2\ell}(y)$, $h_{30}(z)$, $h_{3s}(z)$, $h_{3\ell}(z)$, $j, s = \overline{1, \ell-1}$, где $y_j = j\Delta$, $z_s = s\Delta$, $\Delta = \frac{1}{\ell}$, определяются аналогично.

Пусть $O_1 f(x, y, z) = \sum_{k=0}^{\ell} f(x_k, y, z) h_{1k}(x)$, $O_2 f(x, y, z) = \sum_{j=0}^{\ell} f(x, y_j, z) h_{2j}(y)$,

$O_3 f(x, y, z) = \sum_{s=0}^{\ell} f(x, y, z_s) h_{3s}(z)$, $k, j, s \in \overline{0, \ell}$. Тогда оператор сплайн-интерфлетации

$Of(x, y, z)$ представляется через операторы $O_\mu f(x, y, z)$, $\mu = 1, 2, 3$ следующим образом:

$$Of(x, y, z) = O_1 f(x, y, z) + O_2 f(x, y, z) + O_3 f(x, y, z) - \\ - O_1 O_2 f(x, y, z) - O_2 O_3 f(x, y, z) - O_1 O_3 f(x, y, z) + O_1 O_2 O_3 f(x, y, z).$$

Для вычисления интеграла

$$I_1^3(m, n, p) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 f(x, y, z) \sin 2\pi mx \sin 2\pi ny \sin 2\pi pz dx dy dz,$$

предлагается формула:

$$\Phi_1^3(m, n, p) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 Of(x, y, z) \sin 2\pi mx \sin 2\pi ny \sin 2\pi pz dx dy dz.$$

2. Способы получения оценки погрешности приближенного вычисления интеграла. В [7, р. 45- 56] показано, что оценка погрешности кубатурных формул выражается через соответствующие погрешности квадратурных формул.

Пусть

$$\tilde{R}_\mu(f; y, z) = \int_0^1 (f(x, y, z) - O_\mu f(x, y, z)) \sin 2\pi mx dx, \quad \mu = 1, 2, 3.$$

Лемма 1. [7, р. 47] Для остатка

$$R(f) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 (f(x, y, z) - Of(x, y, z)) \sin 2\pi mx dx \sin 2\pi ny dy \sin 2\pi pz dz$$

справедливо следующее равенство $R(f) = \tilde{R}_1 \tilde{R}_2 \tilde{R}_3 f(x, y, z)$.

Далее используем утверждение о функции одной переменной.

Лемма 2. Пусть $g(x)$, определена на $[0, 1]$ и $\forall x_1, x_2 \in [0, 1]$ выполняется $|g(x_1) - g(x_2)| \leq L|x_1 - x_2|^\alpha$, $0 < \alpha \leq 1$. Тогда для квадратурной формулы справедливо неравенство:

$$\left| \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (g(x) - S_k g(x)) \sin 2\pi mx dx \right| \leq \frac{2L\Delta^{\alpha+1}}{(\alpha+1)(\alpha+2)},$$

где $S_k g(x) = g(x_k) \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} - g(x_{k+1}) \frac{x - x_k}{\Delta}$, $x \in [x_k, x_{k+1}]$, $x_k = k\Delta$, $\Delta = \frac{1}{\ell}$.

Доказательство.

$$\begin{aligned}
 & \left| \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} (g(x) - S_k g(x)) \sin 2\pi m x dx \right| \leq \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} |g(x) - S_k g(x)| dx = \\
 & = \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left| g(x) \left(\frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} + \frac{x - x_k}{\Delta} \right) - g(x_k) \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} - g(x_{k+1}) \frac{x - x_k}{\Delta} \right| dx = \\
 & = \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left| (g(x) - g(x_k)) \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} + (g(x) - g(x_{k+1})) \frac{x - x_k}{\Delta} \right| dx \leq \\
 & \leq \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} |g(x) - g(x_k)| \frac{|x - x_{k+1}|}{\Delta} dx + \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} |g(x) - g(x_{k+1})| \frac{|x - x_k|}{\Delta} dx \leq \\
 & \leq L \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} |x - x_k|^\alpha \frac{|x - x_{k+1}|}{\Delta} dx + L \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} |x - x_{k+1}|^\alpha \frac{|x - x_k|}{\Delta} dx = \\
 & = 2L \sum_{k=0}^{\ell-1} \frac{\Delta^{\alpha+1}}{(\alpha+1)(\alpha+2)} = \frac{2L\Delta^\alpha}{(\alpha+1)(\alpha+2)}.
 \end{aligned}$$

Лемма доказана.

4. Оценка погрешности кубатурной формулы.

Теорема. Для кубатурной формулы $\Phi_1^3(m, n, p)$ вычисления $I_1^3(m, n, p)$ справедлива следующая оценка погрешности $|R(f)| \leq \frac{8\tilde{L}}{(\alpha+1)^3 (\alpha+2)^3 \ell^{3\alpha}}$.

Доказательство. Доказательство теоремы осуществляется на основании лемм 1, 2:

$$|R(f)| = |\tilde{R}_1 \tilde{R}_2 \tilde{R}_3(f; x, y, z)| \leq \frac{8\tilde{L}}{(\alpha+1)^3 (\alpha+2)^3} \Delta^{3\alpha} = \frac{8\tilde{L}}{(\alpha+1)^3 (\alpha+2)^3 \ell^{3\alpha}},$$

а так же непосредственно.

Ввиду громоздкости выкладок, изложим основные моменты:

$$\begin{aligned}
 |R(f)| & = \left| \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 (f(x, y, z) - Of(x, y, z)) \sin 2\pi m x \sin 2\pi n y \sin 2\pi p z dx dy dz \right| \leq \\
 & \leq \sum_{k=0}^{\ell-1} \sum_{j=0}^{\ell-1} \sum_{s=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{z_s}^{z_{s+1}} |f(x, y, z) - Of(x, y, z)| dx dy dz = \\
 & \leq \sum_{k=0}^{\ell-1} \sum_{j=0}^{\ell-1} \sum_{s=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{z_s}^{z_{s+1}} \left| f(x, y, z) - f(x_k, y, z) \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} - f(x_{k+1}, y, z) \frac{x - x_k}{\Delta} - \right. \\
 & \quad \left. - f(x, y_j, z) \frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} - f(x, y_{j+1}, z) \frac{y - y_j}{\Delta} - f(x, y, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} - f(x, y, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \left(f(x_k, y_j, z) \frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} - f(x_k, y_{j+1}, z) \frac{y - y_j}{\Delta} \right) \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} + \\
 & + \left(f(x_{k+1}, y_j, z) \frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} - f(x_{k+1}, y_{j+1}, z) \frac{y - y_j}{\Delta} \right) \frac{x - x_k}{\Delta} + \\
 & + \left(f(x_k, y, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + f(x_k, y, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} \right) \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} + \\
 & + \left(f(x_{k+1}, y, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + f(x_{k+1}, y, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} \right) \frac{x - x_k}{\Delta} + \\
 & + \left(f(x, y_j, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + f(x, y_j, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} \right) \frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} + \\
 & + \left(f(x, y_j, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + f(x, y_j, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} \right) \frac{y - y_j}{\Delta} - \\
 & - \left(f(x_k, y_j, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + f(x_k, y_j, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} \right) \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} \frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} - \\
 & - \left(f(x_k, y_{j+1}, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + f(x_k, y_{j+1}, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} \right) \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} \frac{y - y_j}{\Delta} - \\
 & - \left(f(x_{k+1}, y_j, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + f(x_{k+1}, y_j, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} \right) \frac{x - x_k}{\Delta} \frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} - \\
 & - \left(f(x_{k+1}, y_{j+1}, z_s) \frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + f(x_{k+1}, y_{j+1}, z_{s+1}) \frac{z - z_s}{\Delta} \right) \frac{x - x_k}{\Delta} \frac{y - y_j}{\Delta} \Big| dx dy dz.
 \end{aligned}$$

Представив на $\Pi_{kjs} = [x_k, x_{k+1}] \times [y_j, y_{j+1}] \times [z_s, z_{s+1}]$ функции следующим образом:

$$\begin{aligned}
 f(x, y, z) &= f(x, y, z) \left(\frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} + \frac{x - x_k}{\Delta} \right) \left(\frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} + \frac{y - y_j}{\Delta} \right) \left(\frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + \frac{z - z_s}{\Delta} \right), \\
 f(x_\mu, y, z) &= f(x_\mu, y, z) \left(\frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} + \frac{y - y_j}{\Delta} \right) \left(\frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + \frac{z - z_s}{\Delta} \right), \quad \mu = k, k+1, \\
 f(x_\mu, y_\nu, z) &= f(x_\mu, y_\nu, z) \left(\frac{z - z_{s+1}}{-\Delta} + \frac{z - z_s}{\Delta} \right), \quad \mu = k, k+1, \quad \nu = j, j+1, \\
 f(x_\mu, y, z_\rho) &= f(x_\mu, y, z_\rho) \left(\frac{y - y_{j+1}}{-\Delta} + \frac{y - y_j}{\Delta} \right), \quad \mu = k, k+1, \quad \rho = s, s+1, \\
 f(x, y_\nu, z_\rho) &= f(x, y_\nu, z_\rho) \left(\frac{x - x_{k+1}}{-\Delta} + \frac{x - x_k}{\Delta} \right), \quad \nu = j, j+1, \quad \rho = s, s+1,
 \end{aligned}$$

и воспользовавшись дополнительным свойством (1) функции на классе, получим, что

$$|R(f)| \leq \frac{8\tilde{L}}{\Delta^3} \sum_{k=0}^{\ell-1} \sum_{j=0}^{\ell-1} \sum_{s=0}^{\ell-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} |x - x_k| |x - x_{k+1}| dx \int_{y_j}^{y_{j+1}} |y - y_j| |y - y_{j+1}| dy \int_{z_s}^{z_{s+1}} |z - z_s| |z - z_{s+1}| dz =$$

$$= \frac{8\tilde{L}}{\Delta^3} \sum_{k=0}^{\ell-1} \sum_{j=0}^{\ell-1} \sum_{s=0}^{\ell-1} \frac{\Delta^{3(\alpha+1)}}{(\alpha+1)^3(\alpha+2)^3} = \frac{8\tilde{L}}{(\alpha+1)^3(\alpha+2)^3} \ell^3 \Delta^{3(\alpha+1)} = \frac{8\tilde{L}}{(\alpha+1)^3(\alpha+2)^3} \Delta^{3\alpha}.$$

Теорема доказана.

5. Численный эксперимент. В [3, р.400] показано, что для функции $g(u) = \arccos u$ выполняется следующее неравенство:

$$|\arccos u_1 - \arccos u_2| \leq \frac{\pi}{\sqrt{2}} |u_1 - u_2|^{1/2}, \quad \forall u_1, u_2 \in [-1, 1].$$

Рассмотрим функцию $f(x, y, z) \in C_{2, L, \tilde{L}}^3$:

$$f(x, y, z) = \frac{-1}{2} \left(\arccos^2 \left(xy + \sqrt{1-x^2} \sqrt{1-y^2} \right) - \arccos^2 x - \arccos^2 y \right) \arccos z.$$

Функцию $f(x, y, z)$ так же можно представить в виде:

$$f(x, y, z) = \arccos x \cdot \arccos y \cdot \arccos z.$$

Пусть $g(u) = \arccos u$, $u = x, y, z$, а

$$\tilde{R}_i(g, u, s) = \left| \sum_{k=0}^{\ell-1} \int_{u_k}^{u_{k+1}} (g(u) - S_k g(u)) \sin 2\pi s u du \right|, \quad i = 1, 2, 3, \quad s = m, n, p.$$

Обозначим через $\varepsilon_1 = \prod_{i=1}^3 \tilde{R}_i(g, u, s)$, $u = x, y, z$, $s = m, n, p$, а через

$$\varepsilon = |R(f)| = |I_1^3(3, 4, 5) - \Phi_1^3(3, 4, 5)|. \text{ Покажем, что } \varepsilon = \varepsilon_1.$$

Точное значение интеграла $I_1^3(3, 4, 5) = 0.000181219970879$.

Таблица 1.

Погрешности $\tilde{R}_i(g, u, s)$, $i = 1, 2, 3$, $u = x, y, z$, $s = m, n, p$.

ℓ	$\tilde{R}_1(g, x, 3)$	$\tilde{R}_2(g, y, 4)$	$\tilde{R}_3(g, z, 5)$
4	0.0150335906054	0.006997971781591	0.00347231291402
9	0.005583986050581	0.005908334316872	0.005709895326273
16	0.00180160006497	0.002096660207992	0.002308844693237

Таблица 2.

Погрешности ε и ε_1 .

ℓ	ε	ε_1
4	$3.653 \cdot 10^{-7}$	$3.653 \cdot 10^{-7}$
9	$1.884 \cdot 10^{-7}$	$1.8838 \cdot 10^{-7}$
16	$8.75 \cdot 10^{-9}$	$8.72 \cdot 10^{-9}$

Численный эксперимент подтверждает теоретический результат.

Заключение. В статье рассматривается и исследуется кубатурная формула приближенного вычисления интеграла от осциллирующей функции трех переменных. Кубатурная формула строится на использовании операторов интерфлетации. Информация о неосциллирующем множителе подинтегральной функции задана на системе взаимноперпендикулярных плоскостей. На классе Гельдера получены оценки приближенного вычисления интеграла двумя способами. Численный эксперимент подтвердил теоретический результат: оценка погрешности предлагаемой кубатурной формулы выражается через оценки погрешностей соответствующих квадратурных формул.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Чахкиев М.А.* Оценки осциллирующих интегралов с выпуклой фазой // Изв. РАН. – Сер. Матем. – 2006. Т. 70. – №1. – С. 183-220.
2. *Литвин О.М.* Інтерплінація функцій та деякі її застосування. – Харків.: Основа, 2002. – 544 с.
3. *Gal S.G., Szabados J.* On the preservation of global smoothness by some interpolation operators // *Studia Scientiarum Mathematicarum Hungarica* 35 (1999), 391'1, 14. – P. 397-414.
4. *Iserles A., Norsett S. P.* From high oscillation to rapid approximation III: Multivariate expansions, Technical Report NA2007/01, DAMPT, - University of Cambridge, 2007. – p. 37.
5. *Iserles A., Norsett S. P.* From high oscillation to rapid approximation IV: Accelerating convergence, Technical Report NA2007/07, DAMPT, - University of Cambridge, 2007. – p. 24.
6. *Lytvyn Oleg N., Nechuyviter Olesya P.* Methods in the multivariate digital signal processing with using spline-interlineation: proceeding of the IASTED International Conferences on Automation, Control, and Information Technology, ASIT 2010, 15-18.06.2010. – Novosibirsk, 2010. – P. 90 – 96.
7. *Lytvyn, O.N., Nechuyviter O.P.* 3D Fourier Coefficients on the Class of Differentiable Functions and Spline Interflatation // *Journal of Automation and Information Sciences.* – 2012. – Vol. 44, – № 3. – P. 45–56.

THE CALCULATION OF TRIPLE INTEGRALS OF HIGHLY OSCILLATORY FUNCTIONS WITH USING INTERFLATATION

O. Lytvyn, O.Nechuyviter

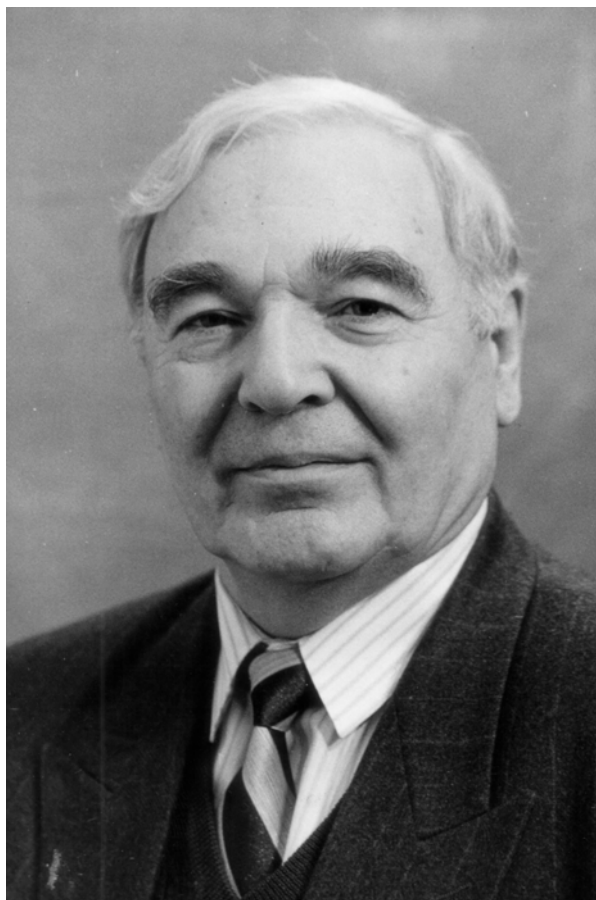
Ukrainian Engineering and Pedagogical Academy, Kharkiv

Abstract. Today a new data, such as traces of the function on a system of lines or planes, are considered in mathematical models in solving of problems of three-dimensional computer tomography, digital signal processing and in many others. In this article cubature formula of the calculation of high oscillating integrals is presented by using operators of spline-interflatation in the case when information about function is set of values on the perpendicular flats. The estimation of error of approaching of the cubature formula is getting on Gelder's class of functions. It is proved that this evaluation can also be obtained through the error estimates corresponding quadrature formulas.

Keywords: cubature formula, High oscillating integrals, Gelder's class, spline-interflatation.

ФИЗИКА

В память о Юрии Ивановиче Яламове в Московском государственном университете на кафедре теоретической физики 20.04.2013 состоялся семинар. В настоящем разделе публикуются работы, представленные на семинаре.



ЮРИЙ ИВАНОВИЧ ЯЛАМОВ
(20.04.1932 – 02.02.2009)

Юрий Иванович Яламов – Заслуженный деятель науки Российской Федерации, действительный член Российской Академии естественных наук, Международной Академии наук высшей школы, Нью-Йоркской Академии наук, Международной Академии информатизации и ряда других общественных академий награжден серебряной медалью имени Нобелевского лауреата академика П.Л. Капицы, заведующий кафедрой теоретической физики (1976 – 2009), проректор университета по научно-исследовательской работе и международному сотрудничеству (в течение 18 лет) физико-математических наук, профессор (Вестник МГОУ. Сер. «Физика - Математика». 2012. № 2).

УДК.533.72.

**КИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ВИХРЕВЫХ ДВИЖЕНИЙ
ГАЗОПОДОБНОГО ОБЛАКА,
ДВИЖУЩЕГОСЯ В ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОЛЕ
С НАЧАЛЬНОЙ СКОРОСТЬЮ, ОРТОГОНАЛЬНОЙ ПОЛЮ**

А.Н. Голов, М.Н. Зудина, А.А. Перов, А.И. Шутов

*Московский Государственный Областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Рассмотрено выражение плотности потока вещества в нестационарной газоподобной системе многих частиц с учётом непотенциального слагаемого. Получены аналитические выражения компонент вихря плотности потока вещества. Дан анализ и графическое представление полученных формул.

Ключевые слова: кинетика, вихревые движения, газоподобная среда.

1. Данной работа является продолжением и развитием исследований, результаты которых опубликованы в [1, 2]. Целью данной работы является теоретическое исследование закономерностей вихревых движений в нестационарных газоподобных системах большого числа частиц N в потенциальном внешнем поле. Подобные явления широко распространены в природе, а также происходят в ряде технических процессов, ввиду чего их исследование имеет как теоретический, так и практический интерес. Ранее эти явления преимущественно рассматривались в феноменологической теории сплошных сред [3 – 6 и др.], большей частью для несжимаемых (а иногда и невязких) жидкостей. Теоретическое рассмотрение вихревых течений в газах также, обычно, исходит из уравнений динамики сплошной среды, не углубляясь в её молекулярную структуру [5 и др.]. Поэтому остаётся актуальным исследование таких движений на основе микроскопической теории (см. [7, 8] и др.).

В отличие от большого числа работ, посвящённых вихревым движениям жидкостей и газов в рамках механики сплошных сред, мы исходим из микроскопической неравновесной статистической теории, на основе которой разработанными методами можно дать кинетическое описание рассматриваемых процессов. Предлагаемая ниже модель применима, как к облакам атомарно-молекулярного состава, так и к системам более крупных дисперсных частиц, включая нестационарные системы с переменной плотностью. Рассмотрим микроскопическую модель облака однородных, бесструктурных, слабо взаимодействующих частиц массы m , образованного быстрым диспергированием исходной массы из малого источника в вакуум в однородном постоянном поле, так что на все частицы действует одна и та же сила $\mathbf{f}$. Такой силой, например, может быть сила тяжести в приближении однородного поля, или сила, действующая на дипольные частицы со стороны неоднородного постоянного электрического поля. Система принята неограниченной (т. е., физически достаточно большой, чтобы не рассматривать граничные условия). Обобщая модель, рассмотренную в [1], мы допускаем, что источник облака имел постоянную начальную скорость $\mathbf{v}_0$, вследствие чего имеется унаследованная от этого массовая скорость облака (что эквивалентно рассмотрению процесса в движу-

щейся системе отсчёта). В отличие от модели, рассмотренной в [2], здесь мы рассмотрим случай, когда действующая сила $\mathbf{f}$ ортогональна $\mathbf{v}_0$.

Многочастичную функцию распределения находим из решения уравнения Лиувилля – Гиббса методом интегралов однородного лиувиллиана [4]. Она является обобщением на данный случай формул, приведённых в [9 - 11] и имеет вид:

$$F_N = \frac{1}{Z} \cdot \prod_{i=1}^N f_{ix} \cdot f_{iy} \cdot f_{iz}, \quad (1)$$

где Z – статистический интеграл, определяемый нормировкой, и

$$f_{ix} = \exp \left[-a(p_x - p_0)^2 - b(q_x - p_x t / m)^2 + c(p_x - p_0) \cdot (q_x - p_x t / m) \right]; \quad (2)$$

$$f_{iy} = \exp \left[-a p_y^2 - b(q_y - p_y t / m)^2 + c p_y \cdot (q_y - p_y t / m) \right]; \quad (3)$$

$$f_{iz} = \exp \left[-a(p_z - ft)^2 - b(q_z - p_z t / m + ft^2 / 2m)^2 + c(p_z - ft) \cdot (q_z - p_z t / m + ft^2 / 2m) \right], \quad (4)$$

где q, p – фазовые переменные i -й частицы (индекс i опущен); t – время; $p_0 = mv_0$; a, b, c – константы задачи, вводимые из соображений размерности, приняты одни и те же для всех однородных частиц и подлежат определению из дополнительных условий. ОЗ выбрано в направлении действия силы поля $\mathbf{f}$, ОХ по направлению скорости $\mathbf{v}_0$ (в ЛСО).

2. Известно ([12, 13] и др.), что, зная статистическую функцию распределения системы, можем описать эту систему, в рамках кинетической теории квазинепрерывной средой с некоторой эффективной плотностью $\rho(x, y, z, t)$. Используя (1 – 4), находим эффективную плотность среды:

$$\rho = Nm(\beta / \pi)^{3/2} \cdot \exp \left[-\beta(x - v_0 t)^2 - \beta y^2 - \beta(z - ft^2 / 2m) \right], \quad (5)$$

где x, y, z – координаты в физическом пространстве, и обозначено: $\beta = bw/u$, причём:

$$u = 1 + \frac{ct}{am} + \frac{bt^2}{am^2}; \quad w = 1 - \frac{c^2}{4ab}.$$

Формула (3) есть обобщение соответствующей формулы, использованной в [1].

Компоненты вектора плотности потока вещества:

$$j_x = \left[k(x - v_0 t) / 2amu + v_0 \right] \cdot \rho; \quad (6)$$

$$j_y = ky \cdot \rho / 2amu; \quad (7)$$

$$j_z = \left[k \cdot (z - ft^2 / 2m) / 2amu + ft / m \right] \cdot \rho. \quad (8)$$

(Здесь и далее $k = c + 2bt / m$) Выражения (5) – (8) удовлетворяют принципу соответствия, при $f \rightarrow 0$ и $v_0 \rightarrow 0$ они переходят в формулы, полученные в [1, 2]. Легко увидеть, что выражение (7) пропорционально градиенту плотности (3) (с зависящим от времени коэффициентом). При $f = 0$ и $v_0 = 0$ к такому же виду приводятся (6) и (8). Т. о., в отсутствие внешнего поля и начального движения системы вектор $\mathbf{j}$ – потенциальный, и поле течений среды – безвихревое. При наличии внешнего поля и начальной скорости выражения (6) и (8) содержат дополнительно конвективный член, пропорциональный плотности и не являющийся потенциальным. Вследствие этого и возникают вихревые течения среды. Отметим, что в z -проекции (8) вектора плотности потока вещества непотенциальное слагаемое проявляется и растёт, только начиная с момента «включения» поля или вхождения частицы в поле ($t = 0$). В x -проекции (6) такое слагаемое присутствует и имеет конечное значение уже в начальный момент.

В гидродинамике и газодинамике обычно пренебрегают неконвективной (диффузионной) частью потока вещества. В начале же развития феноменологической теории переноса рассматривались только потоки, пропорциональные градиентам. Включение в теорию переноса конвективных потоков произошло уже на следующем этапе [13 – 15], и исходило из макроскопического рассмотрения среды в движущейся системе отсчёта. В данном подходе мы получаем и те, и другие потоки. Притом исследование показывает, что в разные моменты времени и в разных областях системы преимущественное значение может иметь как тот, так и другой [1]. Проверка показывает, что уравнение непрерывности выполняется именно для полного вектора плотности потока с компонентами (6) – (8). Т. е.:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0.$$

3. Находя частные производные по координатам от (6) – (8), по стандартным формулам получим проекции вихря плотности потока вещества:

$$\operatorname{rot}_x \mathbf{j} = -2\beta f t y \cdot \rho / m; \quad (9)$$

$$\operatorname{rot}_y \mathbf{j} = -2\beta \cdot [m v_0 z - f t (x - v_0 t / 2)] \cdot \rho / m; \quad (10)$$

$$\operatorname{rot}_z \mathbf{j} = 2\beta v_0 y \cdot \rho. \quad (11)$$

В частном случае, при $v_0 = 0$ и $f = 0$, формулы (9) – (11) переходят в соответствующие формулы, приведённые в [1, 2]. Отметим, что в отличие от задачи с соосными векторами $\mathbf{f}$ и $\mathbf{v}_0$ [2], здесь нет постоянной осевой симметрии вихревого движения, так что имеем все три ненулевых проекции вихря. Объёмное вихревое движение в среде образуется сложением двух ортогональных плоских вихрей. Вихрь, вызванный начальным движением источника, существует уже при $t = 0$ и его вектор расположен в плоскости YZ . Вихрь, вызванный движением частиц под действием поля, возникает в момент «включения» поля и его вектор расположен в плоскости XY . Оба эти вихря пространственно неоднородны и сложным образом зависят от времени. Т. о., для данной модели теория описывает возникновение, развитие и затухание вихревых движений среды в ходе её эволюции. Их эволюция происходит в результате перераспределения импульса вследствие как хаотического, так и направленного движения частиц, и их упругих столкновений. Известно, что плоское вращательное движение создаёт вихрь, ортого-

нальный плоскости вращения. Не следует смешивать рассматриваемый случай с этим явлением. Данный случай не является и вполне обратным к указанному примеру, т. к. не приводит к «закручиванию» системы в целом вокруг направления движения. Полученные формулы описывают локальное и мгновенное распределение плотности вихревых движений, образующее сложную пространственно-временную картину. Проекции вихря меняют знак при отражении координат, что особенно наглядно видно из формул (9) и (11). Это описывает пару локальных вихрей противоположного направления. Полный момент импульса системы не изменяется.

Заметим, что, в сходных задачах, наличия поля или начального движения недостаточно для образования вихрей. Например, в модели с одномерным движением, когда плотность не зависит от координат, ортогональных оси движения, вихри не возникают. Для их образования требуются ещё определённые геометрические свойства модели. Но и одних этих свойств недостаточно. Неоднородное распределение плотности в сферически симметричном облаке не приводит к образованию вихря без нарушения сферической симметрии внешним полем или начальным движением. Т. о., для образования вихрей необходимо: 1) наличие внешнего поля или начального движения системы; 2) наличие конвективного члена в векторе $\mathbf{j}$; и 3) неоднородность плотности с зависимостью от не менее, чем двух координат.

Из найденных выражений (9 – 11) следует: 1) в момент $t = 0$ отсутствует x -проекция вихря, вихрь плотности потока расположен в плоскости YZ , ортогональной начальной скорости, вихревые течения вызваны только начальным движением; 2) выражения (9) и (11) аннулируются при $y = 0$ для любого $t > 0$; 3) для больших t выражение (11) убывает со временем быстрее, чем (9) и (10) и вихревое движение сосредоточивается преимущественно в плоскости XY ; 4) при $t \rightarrow \infty$ вихревые течения асимптотически аннулируются (совместно с предыдущим это приводит к существованию экстремума вихревых движений при конечном $t > 0$); 5) на бесконечности вихревые течения также асимптотически аннулируются (совместно с предыдущим это означает наличие экстремумов проекций вихря при конечных x, y, z); 6) при разнонаправленных векторах $\mathbf{f}$ и $\mathbf{v}_0$ направление $\mathbf{rot} \mathbf{j}$ изменяется со временем.

Отметим, что в гидродинамике обычно рассматриваются вихри поля скоростей, что эквивалентно полю плотности потока только для несжимаемой среды постоянной плотности. В газах, сжимаемость которых существенна, вихри скорости, вообще, не совпадают с вихрями плотности потока. Приблизительное совпадение может быть только в специальных случаях движения потока газа с постоянной плотностью. Ввиду этого, следует с осторожностью относиться к сопоставлению полученных выше результатов с известными формулами гидродинамики.

4. Каждое из трёх выражений (9) – (11) есть функция четырёх переменных, вследствие чего графическое представление этих функций требует объема, превышающего допустимый размер статьи. Поэтому далее мы ограничимся графическим представлением результатов, используя квадрат модуля вихря, образуемый из его проекций (8) – (10):

$$R = \sqrt{(\mathbf{rot} \mathbf{j})^2}, \quad (12)$$

где квадрат вектора понимается в смысле скалярного произведения. Эта функция также зависит от четырёх переменных. На рисунках ниже представлены профили этой функции на плоскостях $X = 0$, $Y = 0$, $Z = 0$. Для каждого из этих случаев представлены:

начальный профиль (при $t = 0$) и профиль по истечении достаточного для определённых выводов времени. Для удобства и унификации графического представления во всех случаях выбран условный масштаб, в котором $[a=1, b=1, c=1, N=1, m=1, v_0=1, f=1]$; время дано также в соответствующих условных единицах.

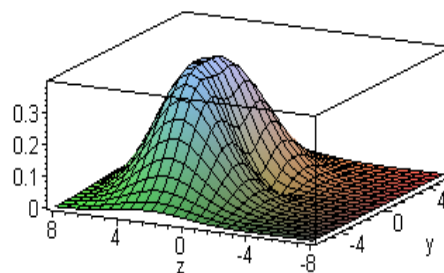
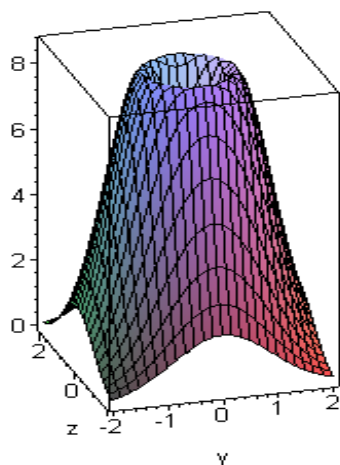


Рис. 1. $x = 0$. а) $t = 0$

б) $t = 2$

Начальное осесимметричное распределение модуля вихря разрушается и эволюционирует к горбу в форме полумесяца, двигаясь вдоль OZ .

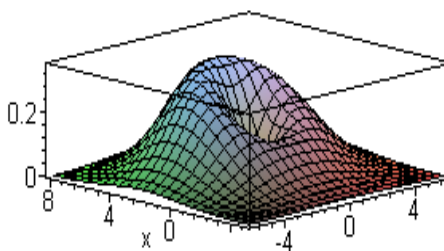
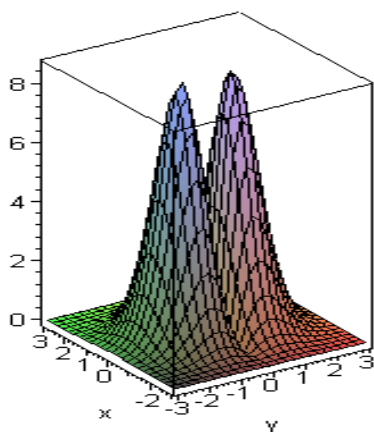


Рис. 2. $z = 0$. а) $t = 0$

б) $t = 2$

Начальное двугорбое распределение описывает пару противоположно закрученных вихрей, зеркально симметричных относительно оси $y=0$; затем оно разрушается, и формируется осесимметричное распределение, причём ось его ($\parallel OZ$) движется вдоль OX .

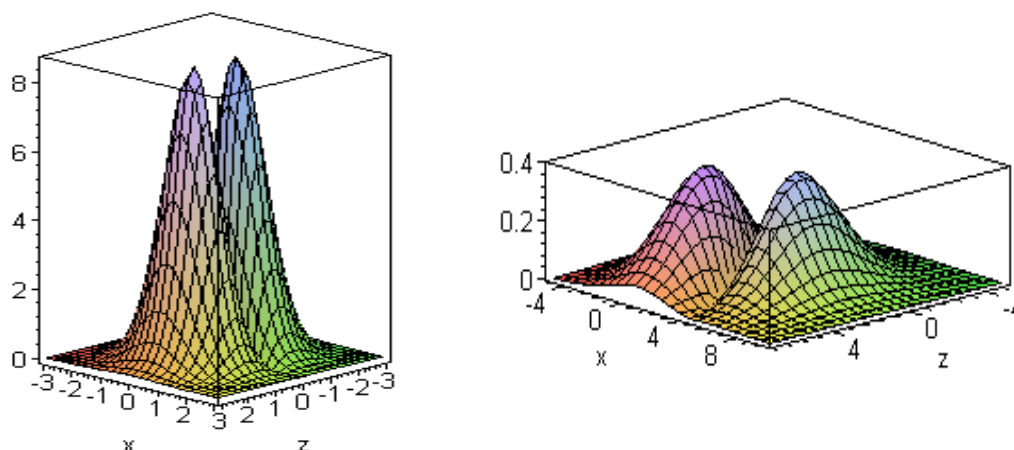


Рис. 3. $y = 0$. а) $t = 0$

б) $t = 2$

Начальное двугорбое распределение описывает пару противоположно закрученных вихрей, зеркально симметричных относительно оси $z=0$; затем они, расплываясь, ползут в сторону положительных X и Z , причём ось симметрии поворачивается по часовой стрелке.

Выражается благодарность сотрудникам кафедры теоретической физики МГОУ за полезное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Голов, А. Н., Зудина М. Н. Кинетика вихревых движений газоподобной среды в постоянном потенциальном поле/ А. Н. Голов, М. Н. Зудина.//Вестник МГОУ. Серия «Физика-Математика», - 2012. - № 1, - с. 39 – 43.
2. Голов, А. Н., Зудина М. Н. Вихревые движения газоподобного облака с начальной скоростью в однородном постоянном поле.//Вестник МГОУ. Серия «Физика-Математика», № 3, 2012, с. 50 – 55.
3. Вилля, Г. Теория вихрей/Г. Вилля. - Л. – М.: ОНТИ, 1936 г. - 266 с.
4. Гольдштик, М. А./М. А. Гольдштик. Вихревые потоки. – Новосибирск: Наука, 1981, - 366 с.
5. Белоцерковский, О. М., Андрущенко, В. А., Шевелев, Ю. Д. Динамика пространственных вихревых течений в неоднородной атмосфере/О. М.Белоцерковский, В. А. Андрущенко, Ю. Д. Шевелев. РФФИ. 2000 г.
6. Алексеенко, С. В., Куйбин, П. А., Окулов, В. Л. Введение в теорию концентрированных вихрей/С. В. Алексеенко, П. А. Куйбин, В. Л. Окулов. – Новосибирск: Институт теплофизики СО РАН, 2003 г. - 504 с.
7. Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 1. Кинетическая теория. Новосибирск: Наука, 2004. 320 с.
8. Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 2. Гидромеханика. Новосибирск: Наука, 2005. 468 с.
9. Голов, А. Н., Яламов, Ю. И. Статистическая и кинетическая теория нестационарных газоподобных и газодисперсных систем/ А. Н. Голов, Ю. И. Яламов. - М.: изд. МГОУ. 2011, - 230 с.

10. Голов, А.Н., Харитонов, А.П. Эволюция газоподобной системы многих дисперсных частиц в потенциальном поле/А. Н. Голов, А. П. Харитонов//Вестник МГОУ. Серия «Физика-математика», - 2008, - №3–4, - с. 12 – 21.
11. Голов А.Н., Харитонов А.П. Эволюция плоского газоподобного облака в потенциальном поле. ВИНТИ. № 621 – В2008, 21 с., 2008.
12. Гуров, К.П. Основания кинетической теории/ К. П. Гуров. - М.: «Наука», 1966. - 351 с.
13. Куни, Ф.М. Статистическая физика и термодинамика/Ф. М. Куни. - М.:«Наука», 1981- 351с.
14. Де Грот, С. Р. и Мазур, П. Неравновесная термодинамика/ С. Р. Де Грот, П. Мазур. - М.: «Мир», 1964. - 510 с.
15. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика./ т.т. 1, 2. «Мир», М. 1978.

**THE KINETIC THEORY OF THE VORTEX MOTIONS
OF THE GAS-LIKED CLOUDS
WITH A INITIAL VELOCITY ORTHOGONAL A FIELD**

A. Golov, M. Zudina, A. Perov, A. Shutov

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

Abstract. The formula of the density of the matter flow in the non-stationary gas-like system of many particles with regard for the non-potential term is considered. The analytical formulae of the components of the curl of the density of the matter flow are obtained. The analysis and graphical presentation of the obtained formulae are performed.

Keywords: kinetics, vortex motion, gas-like medium.

УДК 533

**КИНЕТИКА ИЗМЕНЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРЕЛОМЛЕНИЯ
ФОТОАНИЗОТРОПНЫХ ПЛЕНОК
ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПЕРЕМЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ**

А.Н. Голов, Л.В. Смотров, М.М. Кузнецов

*Московский Государственный Областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Рассмотрена статистическая модель нестационарной поляризации диэлектрика, развивающая представления теории Ланжевена – Дебая и работ Майера – Мейера на нестационарные состояния. На её основе получены формулы для поляризации вещества, выражения диэлектрической проницаемости и показателя преломления. С использованием релаксационного приближения найдены кинетические кривые, описывающие изменение показателя преломления со временем при длительном воздействии на образец периодического электрического поля. Рассмотрен

вариант модели с ограничением вращательной подвижности дипольных кинетических единиц среды и найдена модификация указанных формул для этого случая.

Ключевые слова: поляризация диэлектрика, показатель преломления, ограничение вращательной подвижности.

Данная работа является теоретическим исследованием поляризации конденсированных сред в переменном электрическом поле, которым может быть, например, поле проходящей электромагнитной волны (далее примем это поле периодическим вида $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot \sin(\omega t)$). Мы рассмотрим модель вещества, состоящего из кинетических единиц с постоянными дипольными моментами $\mathbf{p}$ (диэлектрик первого рода). Указанными кинетическими единицами могут быть молекулы жидких кристаллов или сегменты макромолекул полимера, каковые вещества широко применяются при изготовлении дисплеев. Близким вариантом является модель среды, в которой дипольные кинетические единицы располагаются в массе неполярных частиц. В этом случае теория относится только к «дипольной фракции» среды.

В отличие от сред газоподобных (или жидких, но с малой вязкостью и плотностью) в достаточно плотных конденсированных средах следует ожидать существенного влияния соседей на подвижность данной кинетической единицы. Здесь мы исследуем вращательную подвижность диполей, которая будет ограничена отталкивательными силами со стороны соседей. Такой отталкивательный потенциал, как известно, является короткодействующим и весьма крутым. Поэтому, как первое приближение, можно предположить диполи свободно вращающимися в некотором конусе с непроницаемыми стенками (центр конуса совмещён с центром масс диполя). При этом угол их отклонения от оси конуса α не превышает некоторого максимального значения $\alpha \leq \pi/2$, при свободном вращении по азимуту. Далее выбираем систему координат так, что вектор напряжённости поля направлен вдоль оси конуса (по OZ).

В рамках статистической теории поляризации, исходя из представлений Ланжевена – Дебая и Майера – Мейера [1], примем за исходное распределение типа распределения Больцмана, включив периодическую зависимость поля от времени. Модель, в которой векторы дипольных моментов направлены в один полуконус, приводит к наличию остаточной поляризации среды и здесь не рассматривается. Мы предполагаем, что при приготовлении образца в исходном веществе направления дипольных моментов «вверх» и «вниз» были равновероятны, и конденсация среды не нарушила это положение, а привела лишь к указанному ограничению вращательной подвижности диполей. В этом случае функция распределения отлична от нуля только внутри указанного конуса. Соответственно этому определяется её нормировка и правило вычисления средних значений. При выбранной системе координат, очевидно, отлична от нуля только z-проекция поляризации:

$$\mathbf{P} = \mathbf{e}_z \cdot v \cdot \langle p_z \rangle, \quad (1)$$

где $\mathbf{e}_z$ – единичный орт, v – концентрация дипольных частиц, $\langle \rangle$ – символ усреднения, p_z – проекция дипольного момента, причём:

$$p_z = p \cdot \cos(\alpha),$$

где p – модуль дипольного момента (константа). Выполняя для этого случая стандартные выкладки, использованные в [2], получим следующее выражение поляризации образца (по модулю):

$$P = \nu p \left(\frac{-e^{(g(\cos(A)+2))} + \cos(A)e^{(g(2\cos(A)+1))} + e^g \cos(A) - e^{(g\cos(A))}}{e^{(g(\cos(A)+2))} - e^{(g(2\cos(A)+1))} + e^g - e^{(g\cos(A))}} + \frac{1}{g} \right). \quad (2)$$

Здесь: ν – концентрация диполей и характерный параметр $g = pE/\theta$, где $\theta = k_B \cdot T$ – температура среды в единицах энергии (k_B – константа Больцмана).

Анализ формулы (2) показывает, что при $A \rightarrow \pi/2$ выражение поляризации имеет вид известной формулы Ланжевена:

$$P = \nu p \left(\frac{e^{(2g)} + 1}{e^{(2g)} - 1} - \frac{1}{g} \right) \quad (3)$$

с параметром g , периодически зависящим от времени. При $A \rightarrow 0$ имеем

$$P(A=0) = \nu p \cdot \frac{e^{2g} - 1}{e^{2g} + 1}. \quad (4)$$

Последняя формула показывает более крутой рост поляризации с ростом g при той же асимптотике. Это – следствие сильного ограничения вращательной подвижности диполей.

Диэлектрическая восприимчивость среды κ вводится в макроскопической электродинамике известной формулой:

$$\mathbf{P} = \kappa \mathbf{E}. \quad (5)$$

Тогда из (2) получим:

$$\kappa = \frac{\nu p \left(\frac{-e^{(g(\cos(A)+2))} + \cos(A)e^{(g(2\cos(A)+1))} + e^g \cos(A) - e^{(g\cos(A))}}{e^{(g(\cos(A)+2))} - e^{(g(2\cos(A)+1))} + e^g - e^{(g\cos(A))}} + \frac{1}{g} \right)}{E} \quad (6)$$

и диэлектрическая проницаемость среды (в СГС):

$$\varepsilon = 1 + 4\pi\kappa \quad (7)$$

Заметим сразу, что выражение (6) не имеет особенности при стремлении g (или E) к нулю.

Выражения (6) и (7) сложным образом зависят от амплитуды поля, дипольного момента кинетических единиц, температуры, величины ограничивающего угла и времени.

Для выяснения их свойств, рассмотрим выражение (2) в случае относительно слабых полей, когда $g \ll 1$. Разложение (2) в ряд в окрестности точки $g = 0$ в 1-м неисчезающем приближении (для чего надо взять 4 члена разложения) даёт:

$$P = \frac{1}{3} \nu p g (1 + \cos(A) + \cos(A)^2). \quad (8)$$

Эта формула отличается, от использовавшейся ранее, зависимостью от максимального угла A . Легко видеть, что уменьшение A от $\pi/2$ до нуля (при тех же прочих параметрах) приводит к возрастанию поляризации втрое. Это означает, что рассматриваемое ограничение вращательной подвижности диполей может привести к существенным и реально наблюдаемым эффектам. В этом приближении:

$$\kappa = \frac{1}{3} \frac{\nu p^2 (1 + \cos(A) + \cos(A)^2)}{\theta} \quad (9)$$

с той же поправкой на зависимость от максимального угла A . Определив диэлектрическую проницаемость согласно (7), для сред, в которых выполняется известная закономерность:

$$n \approx \sqrt{\epsilon}, \quad (10)$$

получим для показателя преломления:

$$n = \sqrt{1 + (n_0^2 - 1)(\cos(A)^2 + \cos(A) + 1)}, \quad (11)$$

где n_0 - показатель преломления среды при отсутствии ограничения вращательной подвижности диполей ($n_0 > 1$). Подкоренное выражение в (11) всегда положительно, причём 2-й член под корнем, вообще, не мал. При уменьшении максимального угла A от $\pi/2$ до нуля показатель преломления возрастает от значения n_0 до наибольшего значения:

$$n_m = \sqrt{3n_0^2 - 2}. \quad (12)$$

Представление о зависимости выражения (11) от угла A при разных n_0 дано на рис.1.

Из формулы (11) и рис. 1 видно, что при значениях показателя преломления в состояниях со свободным вращением диполей, обычных для прозрачных диэлектриков, значения этой величины в конденсированных состояниях с ограниченной вращательной подвижностью диполей могут увеличиться в полтора – два раза при максимальном ограничении поворота диполей относительно вектора поля. В принятом выше 1-м приближении значения n и ϵ не зависят от действующего поля.

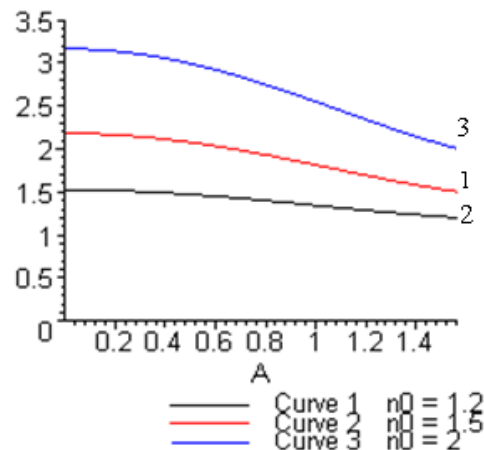


Рис. 1. Зависимость показателя преломления среды от максимального угла A при разном n_0 .

Во втором приближении слабых полей находим диэлектрическую восприимчивость:

$$\kappa = \frac{1}{3} v p^2 \left(1 + \cos(A) + \cos(A)^2 - \frac{1}{30} g^2 (2 \cos(A)^4 + 7 \cos(A)^3 + 12 \cos(A)^2 + 7 \cos(A) + 2) \right) / \theta. \quad (13)$$

Поправка видна из сравнения (13) с (9). Последнее выражение через параметр g зависит от действующего поля, а для переменного поля – от времени. Но для высокочастотных полей эта зависимость от времени практически неизмерима и нет смысла в её теоретическом расчёте. Целесообразно, для периодического поля, использовать средние за период значения функции (13). Такое усреднение даёт:

$$\kappa = \frac{1}{3} v p_0^2 \left(\cos(A)^2 + \cos(A) + 1 - \frac{1}{60} g_0^2 (2 \cos(A)^4 + 7 \cos(A)^3 + 12 \cos(A)^2 + 7 \cos(A) + 2) \right) / \theta, \quad (14)$$

где $g_0 = p E_0 / \theta$. Отсюда видно, что это выражение зависит от амплитуды поля через параметр g_0 . Зависимость от максимального угла A та же, что и в формуле (13). Коэффициент при второй поправке достаточно мал, так что даже при $g_0 = 1/2$ эта поправка мала и приводит лишь к небольшому уменьшению диэлектрической восприимчивости. Соответствующие поправки войдут в выражения диэлектрической проницаемости и показателя преломления.

Полученные результаты могут быть использованы для уточнения кинетики поведения показателя преломления при релаксации концентрации диполей и слабом линейном росте температуры образца вследствие его нагрева, как это показано в работе [3].

Эти результаты могут быть применены к рассмотрению явлений, связанных с прохождением электромагнитных волн через слои прозрачного конденсированного диэлектрика, если в таковом имеются особенности структуры, приводящие к ограничению вращательной подвижности диполей. Так же следует учитывать их при рассмотрении поведения образцов, подвергающихся длительному облучению и нагреву, что может происходить как в технологических процессах производства дисплеев, так и в процессе их эксплуатации. Точные измерения показателей преломления в подобных средах могут показать, насколько существенны в данном материале ограничения вра-

щательной подвижности диполей и тем самым дать дополнительные сведения о структуре материала.

Авторы выражают благодарность проф. В. В. Беляеву за полезное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дебай П. Полярные молекулы. М. – Л., 1931.
2. Блинов Л.М. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. - М.: «Наука» Главная редакция физико-математической литературы. 1978 г.
3. Голов А.Н., Кузнецов М.М., Смотров Л.В. К теории фотоориентации и фотоанизотропии при поляризации и ударном сжатии диэлектриков.// Вестник МГОУ. Серия «Физика-математика», №1, 2012

KINETICS OF CHANGES IN REFRACTIVE INDEX IN PHOTO-ANISOTROPIC FILMS AT THE ALTERNATING ELECTRIC FIELD

A. Golov, L. Smotrova, M. Kuznetsov

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

Abstract. Consider a statistical model of transient polarization of the dielectric by theory Langevin - Debye and works Mayer – Meyer. To get formulas for polarization substance, expression of the dielectric constant and refractive index. A variant of the model with the restriction of the rotational mobility of the kinetic units of the dipole environment and modification of these formulas is found for this case.

Keywords: polarization of the dielectric, refractive index, the restriction of the rotational mobility

УДК 53.044

ИОНООБМЕННЫЕ ПРОЦЕССЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЧИСТЫХ РАСТВОРОВ ГИДРОКИСЕЙ ТЕТРААЛКИЛАММОНИЯ И ИХ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Е.П. Крысин, А.Н. Коновалов, М.В. Рябцева

*ФГУП «ИРЕА»,
107076, Москва, Богородский вал, 3*

Аннотация. Рассмотрена возможность получения растворов тетраметиламмоний гидроксида и тетрабутил аммоний гидроксида на ионообменных смолах. Рассмотрена оптимизация соотношений между количеством смол и степенью конверсии исходного тетраметиламмоний галогенида для получения высокочистых растворов гидроксидов.

Ключевые слова: ионообменные смолы, растворы гидроксидов

Введение

В настоящее время гидроокиси четвертичных аммониевых оснований находят применение во многих отраслях промышленности и хозяйственной деятельности: химическом синтезе, литографических процессах для проявления фоторезистов [1], полярографическом анализе [2], кислотно-основном титровании и медицине, поэтому получение гидроокисей тетраалкиламмония является актуальной задачей. Подобные соединения в виде растворов, как правило, получают электрохимическим методом [3]. Однако у данного метода есть некоторые недостатки, такие как: выделение газообразного или летучего галогена в окружающую среду (в случае электролиза хлоридов и бромидов тетраалкиламмония), высокая энергоемкость производства и невозможность реализации совмещенной схемы производства, т.е. данную технологическую схему нельзя быстро перепрофилировать с производства одной гидроокиси тетраалкиламмония на другую, имеющую иные алкильные радикалы. Кроме того, такой подход не позволяет получать высокочистые растворы целевого соединения пригодные без дополнительной доочистки для использования в субмикронной литографии и полярографическом анализе.

Перспективным методом получения гидроокисей четвертичных аммониевых оснований, лишенным большинства этих недостатков, является ионный обмен на различных анионитах. При этом разбавленный раствор галогенида тетраалкиламмония пропускают через колонну, содержащую влажный анионит в форме основания, получая на выходе раствор целевого гидроксида тетраалкиламмония. По имеющимся данным данный способ получения целевых соединений хотя и был рассмотрен в ряде работ [4,5], но не был реализован на технологическом уровне.

Экспериментальная часть.

В работе на примере получения тетраметиламмоний гидроокиси исходя из тетраметиламмоний бромида была рассмотрена зависимость степени конверсии исходной соли (по Br⁻) в соответствующее основание от количества использованной ионообменной смолы амберлит IRA-96 в форме основания.

Опыты проводили на указанной смоле с заявленной обменной емкостью $\geq 1,4$ мэкв/мл. В работе применяли колонки с внутренним диаметром 15 мм и высотой столба анионита 50 мм, 100 мм, 150 мм, 200 мм, 250 мм, 300 мм, 350 мм, 400 мм, 450 мм и 500 мм. Эксперименты проводили при 18-190С. В каждом из проведенных экспериментов объем водного раствора исходной соли составлял 60 мл. Концентрация соли в водном растворе составляла 3,33%. Скорость элюирования 2,8 мл/мин.

В каждом из экспериментов смолу переводили в основную форму непосредственно перед использованием. Для этого через колонку, содержащую слой смолы пропускали 10% раствор едкого натра со скоростью 5 мл/мин до «проскока». Затем колонну заливали свежей порцией 10% раствора NaOH в количестве необходимом для полного смачивания смолы, и оставляли отстаиваться в течение 30 мин, после чего промывали колонку дистиллированной водой до pH 6-7. Степень отмычки ионообменной смолы от щелочи также контролировали измерением электропроводности элюата. Через подготовленную таким образом смолу пропускали раствор исходного тетраметиламмоний бромида. По завершении процесса смолу промывали дистиллированной водой до отсутствия щелочной реакции. Элюат и промывные воды, полученные в ходе экспери-

мента, смешивали, определяли содержание исходной соли (по Br-) в растворе и степень конверсии ее в продукт. Концентрацию бромид-иона определяли потенциометрическим титрованием отобранной аликвоты 0,1 н раствором азотнокислого серебра с использованием серебряного ионселективного электрода. Результаты опытов представлены в табл. 1.

Таблица 1.

Зависимость степени конверсии тетраметиламмоний бромида
в тетраметиламмоний гидроксид
от высоты столба ионообменной смолы амберлит IRA-96.

Высота столба анионита, мм	50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
Степень конверсии исходной соли в продукт, % ($\pm 0,1$ %)	15,8	26,4	30,1	57,3	75,2	94,5	97,9	99,9	99,9	99,9

Из проведенных опытов видно, что достаточная степень конверсии происходит уже при высоте слоя в 400 мм.

В аналогичных условиях было исследовано получение тетрабутиламмоний гидроксида, исходя из тетрабутиламмоний иодида. Полученные данные представлены в табл.2.

Таблица 2.

Зависимость степени конверсии тетрабутиламмоний иодида
в тетрабутиламмоний гидроксид
от высоты столба ионообменной смолы амберлит IRA-96.

Высота столба анионита, мм	50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
Степень конверсии исходной соли в продукт, % ($\pm 0,1$ %)	4,6	13,3	26,7	37,4	45,5	60,2	74,9	86,7	92,5	99,9

По результатам проведенных экспериментов для процессов получения тетраметиламмоний гидроксида и тетрабутиламмоний гидроксида были выбраны условия, позволяющие получить раствор продуктов, не содержащий примесей, соответствующих галогенид-ионов характерных исходным солям на уровне 0,1 %.

При перенесении технологического процесса из лаборатории на масштабное производство возникает задача его масштабирования. Эта задача решается с помощью теории подобия, но при этом следует учитывать, что простое умножение объемов, масс и прочих параметров, рассчитанных для небольших количеств, вступающих во взаимодействие веществ, не может использоваться для её решения. Объёмы аппаратов и массы взаимодействующих веществ также нуждаются в тщательно рассчитанном и обоснованном масштабировании на основе математического моделирования процессов [6].

В общем случае масштабирование может быть линейным, плоским или объёмным. В случае геометрического подобия отношение всех соответственных размеров посто-

янно. В кинематических системах имеет место кинематическое подобие, если сходственные частицы передвигаются по геометрически подобным путям в промежутки времени, отличающиеся постоянным множителем, т.е. в этом случае можно говорить о подобии движения, например, двух потоков жидкости. При динамическом подобии должны быть подобны многоугольники сил, построенные для пар сходственных частиц, расположенных подобным образом в пространстве и во времени. Понятие подобия можно также распространить на тепловые и физико-химические процессы.

Для использования понятий о подобии необходимо найти условия подобия рассматриваемых явлений. При этом возникают следующие вопросы:

- Возможно ли известные опытные данные, полученные путём измерения в одном аппарате (лабораторном), перенести в точности на другой (производственный)?
- Каковы условия, при которых допустим такой перенос или пересчёт?
- Как правильно применить полученные на лабораторной установке опытные данные для производственного аппарата?

Перенос опытных лабораторных данных с модели на производственный аппарат принципиально возможен в таких случаях, где имеется подобие обоих процессов. Разумеется, это подобие не должно ограничиваться только геометрическими формами; все другие величины, которые влияют, например, на теплопередачу, должны находиться в определенных отношениях подобия. Нельзя пытаться найти подобие между ламинарным и турбулентным потоками, так как распределение скоростей в обоих потоках принципиально различно. [7]

В ионообменной колонне протекают в основном три процесса, а именно: проточная экстракция, реакция обменного разложения, сопровождающегося диффузией, и фильтрование, т.е. движение жидкости через слой ионита.

Исходя из основных положений о кинетике химических реакций для случая двух противоположно направленных реакций второго порядка, уравнение скорости реакции в этом случае будет:

$$-\frac{d(c \cdot dx)}{d\tau} = k \cdot f(c) \cdot dx ,$$

где k – постоянная величина, характеризующая природу реакции;

$$f(c) = (c_{\infty} - c)(c + \beta); \dots \beta = c_{\infty} + \frac{b}{a}.$$

Количество вещества, вступающего в реакцию ионного обмена в элементарном объёме за время $d\tau$, составит:

$$g = -d(c \cdot dx) = k \cdot f(c) \cdot dx \cdot d\tau$$

Составляя материальный баланс, получим уравнение:

$$-D \frac{dc}{dx} d\tau + D \left[\left(\frac{dc}{dx} \right) + d \left(\frac{dc}{dx} \right) \right] d\tau - k f(c) dx d\tau = 0 ,$$

где D – коэффициент диффузии.

Применив метод масштабных множителей для приведения дифференциального уравнения ионного обмена к критериальному виду:

$$c' = A_c c; \quad x' = A_l x; \quad k' = A_k k; \quad D' = A_D D.$$

Для модели из дифференциального уравнения:

$$\frac{1}{A_l^2} = \frac{A_k}{A_D}.$$

Отсюда:

$$\frac{kl^2}{D} = \frac{k'l'^2}{D'}.$$

т.е. критерий, характеризующий реакцию обменного разложения, сопровождающуюся диффузией.

Ниже представлены результаты расчетов по масштабированию лабораторных исследований процесса получения тетраалкиламмониевых гидроокисей на ионообменной смоле. При расчетах принимались следующие параметры и условия:

1. Производительность установки;
2. Физическая модель ионообменной колонки–аппарат идеального вытеснения;
3. Степень использования смолы за цикл «синтез-регенерация» - 95%;
4. Концентрация раствора $[R_4N]Hal$ не может быть более 10% масс. Дальнейшее увеличение не дает увеличения концентрации $[R_4N]OH$ на выходе;
5. Увеличение скорости пропускания раствора отрицательно сказывается на степени превращения $[R_4N]Hal$ в $[R_4N]OH$ (при скорости пропускания 5 мл/см²мин выход гидроокиси 99% от теоретического; при 25 мл/см²мин - 80%). Однако этот недостаток может быть преодолен установкой дополнительной поглотительной колонки, работающей как регенератор.
6. Увеличение высоты колонки повышает выход, но незначительно (от 80% до 87% от теоретического), к тому же колонку труднее обслуживать (увеличивается время регенерации, труднее промывать от ионов OH^- и Hal^+), что не окупает затраты.

Были получены следующие результаты для рекомендации к выбору размеров аппаратуры:

высота абсорбционной колонки -	600 мм;
внутренний диаметр колонки -	30 мм;
вес анионита (одной колонки) -	95 г.

Двухступенчатый каскад из четырех колонн (рис. 1) обладает максимальной производительностью 500 г/час. Следовательно, для обеспечения производительности 500 кг/месяц необходимо запланировать 6 двухступенчатых каскадов. Необходимо предусмотреть один резервный каскад.

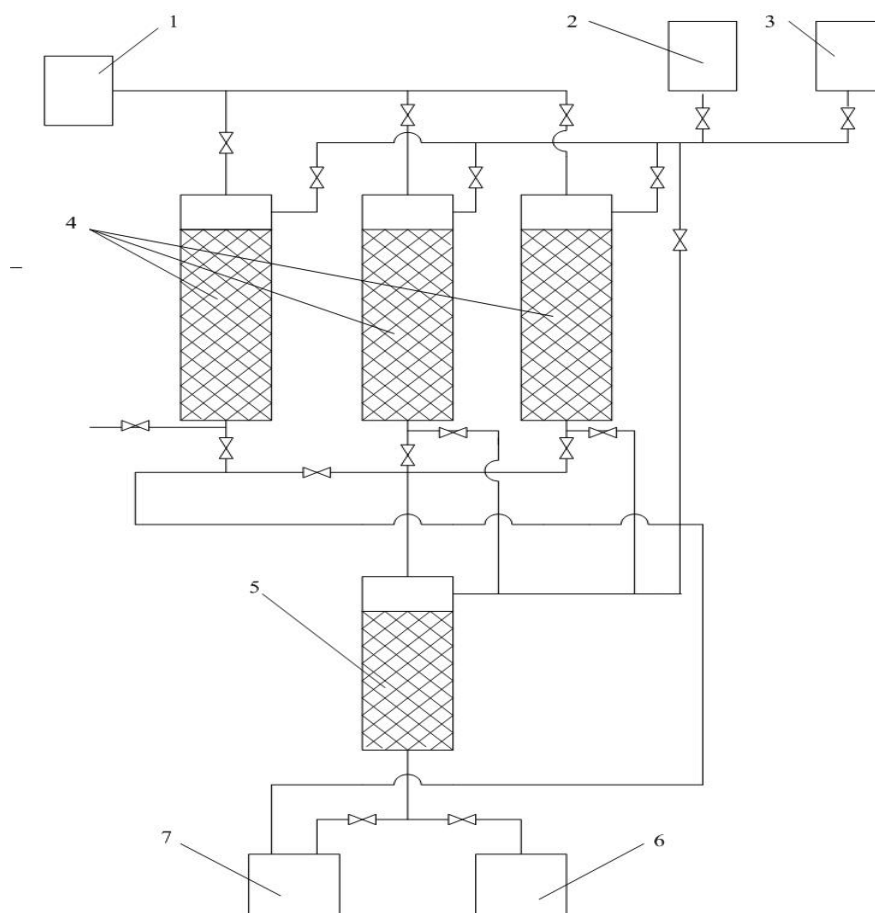


Рис. 1. Принципиальная схема установки получения тетраалкиламмоний гидроксидов.

- 1 - Емкость с раствором тетраалкиламмоний галогенида.
- 2 - Емкость с раствором щелочи. 3 - Емкость с водой.
- 4 - Колонки с ионообменной смолой первой ступени.
- 5 - Колонки с ионообменной смолой второй ступени.
- 6 - Емкость приемная для раствора продукта.
- 7 - Емкость приемная для растворов.

Выводы

1. Исследован метод получения тетраалкиламмоний гидроксидов ионным обменом на ионообменной смоле амберлит IRA-96 и показана возможность высокой конверсии тетраалкиламмоний галогенидов в целевые продукты.

2. На основе моделирования процесса ионного обмена определены размеры ионообменной аппаратуры, обеспечивающей требуемую производительность по тетраалкиламмоний гидроксидам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Моро, У. Микролитография. М:Мир, 1990. 606 с.
2. Платонова, М.Н. Получение основания тетраметиламмония для полярографических целей на анионите // ЖОХ, 1957, XXVII, С.264-266.

3. Получение гидроокисей тетраалкиламмония электрохимическим методом, www.ximicat.com/ebook.php?file=li.djvu&page=38.
4. Вольфсон, А.И. Крохов В.В. Получение гидрата окиси тетраметиламмония из тетраметиламмония иодистого на анионите // ЖПХ, 1961, XXXIV, С.223-237.
5. Крешков, А.П. Саюшкина Е.Н. Дроздов В.А. Получение раствора гидроокиси тетраметиламмония методом ионного обмена // Журнал прикладной химии, 1964, 37, 9-10, С.1894-1897.
6. Теория систем. Математические методы моделирование. Сборник. М.: Мир; 1989.
7. Батурун Л.М., Позин М.Е. Математические методы в химической технике. Л.: Химия, 1971.

ION-EXCHANGE PROCESSES TO OBTAIN HIGH PURE SOLUTIONS OF TETRAALKYLAMMONIUM HYDROOXIDES AND THEIR MODELLING

E. Krysin, A. Konovalov, M. Ryabtseva

*Institute for Chemically Pure Reagents
3, Bogorodsky Val, Moscow, 107076, Russia*

Abstract. Making solutions of tetramethylammonium hydroxide (ТМАН) and tetra-n-butylammonium hydroxide on the ion-exchange resin is discussed. Optimizing the ratio of the used resins number and the degree of conversion of initial concentration of Hal-tetraalkylammonium to obtain high purity target hydroxides solutions is considered.

Keywords: ion-exchange pitch, solutions of hydroxides

УДК 533

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ОРИЕНТАЦИИ МОЛЕКУЛ КРАСИТЕЛЯ В ФОТООРИЕНТИРУЮЩЕМ СЛОЕ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННОГО ПУЧКА

Н.Н.Барабанова*, В.В.Беляев*, Д.Л.Богданов*,
А.Л. Бугримов*, А.К.Дадиванян*, В.Г.Чигринов**

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

***Гонконгский университет науки и технологии, Гонконг, Китай*

Аннотация. Предложен механизм ориентации красителей лазерным излучением, основанный на учете анизотропии оптической поляризуемости молекул. Найдена зависимость энергии кластера молекул красителя от анизотропии оптической поляризуемости молекул, параметра порядка и числа молекул в кластере. Построена функция распределения кластера по углам.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, фотоориентация, лазерное излучение, функция распределение, кластер

Одним из наиболее эффективных методов ориентирования жидких кристаллов и красителей является метод их ориентации лазерным излучением [1-6]. Теория этого яв-

ления, основанная на решении уравнения диффузии [7], позволила получить зависимость параметра порядка от времени. Однако зависимость распределения молекул по углам как функция угла падения светового пучка не была рассмотрена.

Цель настоящей работы – найти связь распределения по углам директора кластера жидкого кристалла и красителя при их ориентации лазерным излучением со свойствами ЖК и красителей и углом падения волнового вектора лазера (под кластером будем понимать группу молекул, ориентирующихся под действием световой волны).

Энергия взаимодействия электрического поля с молекулой определяется соотношением:

$$U = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_{ij} E_i E_j,$$

$i, j = x, y, z$; α_{ij} – компоненты тензора поляризуемости молекулы; E_i, E_j – компоненты вектора электрического поля в той же системе координат.

Пусть луч света с волновым вектором $\mathbf{k}$ падает под углом γ к нормали $\mathbf{n}$ к поверхности. $\mathbf{n}'$ направлена по оси z лабораторной системы координат x, y, z . yOz – плоскость поляризации излучения (рис. 1).

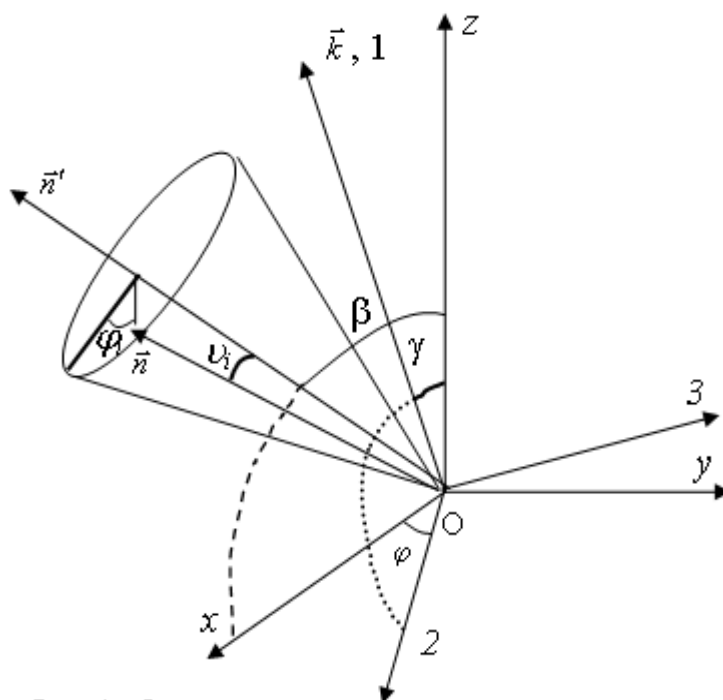


Рис. 1. Ориентация молекулы красителя или мезогена относительно лабораторной системы координат XYZ. Ось z перпендикулярна поверхности раздела; $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$ – направления оси симметрии эллипсоида поляризуемости молекулы и директора кластера соответственно, лежащие в плоскости xOz ; α и β – полярный и азимутальный углы, определяющие ориентацию молекулы в системе координат $x'y'z'$, связанной с кластером (ось z' направлена вдоль $\mathbf{n}'$); $\mathbf{k}$ – волновой вектор излучения лазера; углы β и γ – углы между осью z и волновым вектором и осью z и директором кластера.

Волновой вектор направлен по оси 1, электрическое поле по оси 2. Компоненты напряженности электрического поля E_x и E_z найдем, пользуясь матрицей перехода от системы координат, связанной с волновым вектором световой волны к лабораторной системе координат:

$$\begin{aligned} E_x &= E_0 (\cos \varphi \cdot \cos \psi \cdot \cos \gamma - \sin \varphi \cdot \sin \psi) \\ E_y &= E_0 (\cos \varphi \cdot \sin \psi + \sin \varphi \cdot \cos \psi \cdot \cos \gamma) \\ E_z &= -E_0 \sin \gamma \cdot \cos \psi. \end{aligned}$$

γ - полярный угол оси 1 в неподвижной системе координат; φ - азимут оси 1 (угол между плоскостями XZ и 1Z); ψ - азимут подвижной системы (угол между плоскостями 1Z и 12)).

Так как излучение плоско поляризовано (плоскость поляризации xOz), то $E_y = 0$, т.е.

$$\cos \varphi \cdot \sin \psi + \sin \varphi \cdot \cos \psi \cdot \cos \gamma = 0 \text{ и } \operatorname{tg} \psi = -\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma \Rightarrow \psi = -\operatorname{arctg}(\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma).$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} E_x &= E_0 \{ \cos \varphi \cdot \cos [-\operatorname{arctg}(\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma)] \cdot \cos \gamma - \sin \varphi \cdot \sin [-\operatorname{arctg}(\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma)] \} \\ E_y &= 0, \quad E_z = -E_0 \sin \gamma \cdot \cos [-\operatorname{arctg}(\operatorname{tg} \varphi \cdot \cos \gamma)]. \end{aligned}$$

Компоненты тензора поляризуемости молекулы в системе координат x', y', z' , связанной с кластером красителя или ЖК, определяются соотношением:

$$\alpha_{ij} = \sum_{\sigma, \tau} \alpha_{\sigma\tau}(\sigma, i)(\tau, j).$$

$i, j = x', y', z'$; $\sigma, \tau = 1, 2, 3$; $\alpha_{\sigma\tau}$ и α_{ij} – компоненты тензора поляризуемости соответственно в системах координат, связанных с молекулой и кластером.

Считая эллипсоид поляризуемости молекулы аксиально симметричным, $\alpha_{11} \equiv \alpha_1$, $\alpha_{22} = \alpha_{33} \equiv \alpha_2$ и пользуясь матрицей перехода от системы координат, связанной с кластером, к лабораторной системе координат для поляризуемостей молекулы в направлениях, параллельном и перпендикулярном направлениям директора кластера $\mathbf{n}'$ (соответственно, $\alpha_{||}$ и $\alpha_{\perp}$), при равновероятном распределении молекул по углу φ_i можно получить [8]:

$$\alpha_{||} = (\alpha_1 - \alpha_2) \cos^2 \vartheta_i + \alpha_2, \quad \alpha_{\perp} = \frac{1}{2}(\alpha_1 - \alpha_2) \sin^2 \vartheta_i + \alpha_2,$$

где ϑ_i – угол между направлениями оси симметрии молекулы и директора.

После усреднения по ϑ_i , учитывая, что $\overline{\cos^2 \vartheta_i} = \frac{2S+1}{3}$ и $\overline{\sin^2 \vartheta_i} = \frac{2-2S}{3}$, где S – параметр порядка:

$$S = \frac{\overline{3 \cos^2 \vartheta_i} - 1}{2}$$

$$\text{имеем: } \alpha_{||} = \frac{2S+1}{3}(\alpha_1 - \alpha_2) + \alpha_2, \quad \alpha_{\perp} = \frac{1-S}{3}(\alpha_1 - \alpha_2) + \alpha_2.$$

Если угол между директором кластера и нормалью к поверхности пленки (ось z) равен β , компоненты тензора поляризуемости молекулы в системе координат, связанной с поверхностью раздела, равны:

$$\begin{aligned}\alpha_{xx} &= (\alpha_1 - \alpha_2) \left(\frac{1-S}{3} + S \sin^2 \beta \right) + \alpha_2, \\ \alpha_{xz} &= \alpha_{zx} = (\alpha_1 - \alpha_2) S \sin \beta \cos \beta, \\ \alpha_{zz} &= (\alpha_1 - \alpha_2) \left(\frac{1-S}{3} + S \cos^2 \beta \right) + \alpha_2.\end{aligned}$$

Так как электрическое поле перпендикулярно оси y ($E_y = 0$), то нас интересуют только приведенные выше компоненты тензора поляризуемости и остальные компоненты мы не приводим. При $\beta = 0^\circ$ получим:

$$\bar{\alpha}_{xx} = (\alpha_1 - \alpha_2) \frac{1-S}{3} + \alpha_2, \quad \bar{\alpha}_{xz} = \bar{\alpha}_{zx} = 0, \quad \bar{\alpha}_{zz} = (\alpha_1 - \alpha_2) \frac{2S+1}{3} + \alpha_2.$$

При апертуре источника света δ величина γ меняется от 0 до $\delta/2$ величину E необходимо усреднить по γ и φ , и энергия кластера в поле световой волны будет равна:

$$U = U_1(\beta, \varphi) + U_2(\beta, \varphi) - \frac{1}{2} N F^2 A,$$

где $U_1(\beta, \varphi)$ – энергия взаимодействия молекул внутри кластера, $U_2(\beta, \varphi)$ – энергия взаимодействия между кластерами,

$$\begin{aligned}A &= \left[(\alpha_1 - \alpha_2) \left(\frac{1-S}{3} + S \sin^2 \beta \right) + \alpha_2 \right] \times \\ &\times \{ \cos \varphi \cdot \cos [- \arctg(tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \cos \gamma - \sin \varphi \sin [- \arctg(tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \}^2 - \\ &- 2(\alpha_1 - \alpha_2) S \sin \beta \cos \beta \{ \cos \varphi \cdot \cos [- \arctg(tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \cos \gamma - \\ &- \sin \varphi \cdot \sin [- \arctg(tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \} \sin \gamma \cos [- \arctg(tg \varphi \cdot \cos \gamma)] + \\ &+ \left[(\alpha_1 - \alpha_2) \left[\left(\frac{1-S}{3} + S \cos^2 \beta \right) + \alpha_2 \right] \sin^2 \gamma \cdot \cos^2 [\arctg(tg \varphi \cdot \cos \gamma)] \right] \\ &\text{и } F = E_0 \frac{n_0^2 + 2}{3},\end{aligned}$$

n_0 – показатель преломления, N – число молекул в кластере.

Для функции распределения директора по углам имеем:

$$\rho(\beta) = C \exp \left(\frac{U_1(\beta) + U_2(\beta) - \frac{1}{2} N F^2 A}{kT} \right),$$

$$\text{где } C = \left(\int_0^{\pi/2} \exp \left(\frac{U_1(\beta) + U_2(\beta) - \frac{1}{2} N F^2 A}{kT} \right) \sin \beta d\beta \right)^{-1}.$$

При не очень больших значениях интенсивности света $I < 10^4$ Вт/м² можно считать U_1 и U_2 независимыми от β . Тогда

$$\rho(\beta) = C \exp\left(\frac{-\frac{1}{2}NF^2A}{kT}\right),$$

$$\text{где } C = \left(\int_0^{\pi/2} \exp\left(\frac{-\frac{1}{2}NF^2A}{kT}\right) \sin \beta d\beta \right)^{-1}.$$

При $N=10^7$ функция распределения имеет вид δ -функции (отношение $\rho(90^\circ)/\rho(0^\circ)$ составляет порядка 10^{43}), при $N=10^5$ она достаточно размыта (рис. 2). Сравнение с экспериментальными данными показывает, что $N=10^5$. Эта величина близка к данным, полученным в работе [5]. В работе [9] получено значение N на несколько порядков ниже. Это расхождение связано, по-видимому, с тем, что разные экспериментальные методы дают разные значения размеров кластера.

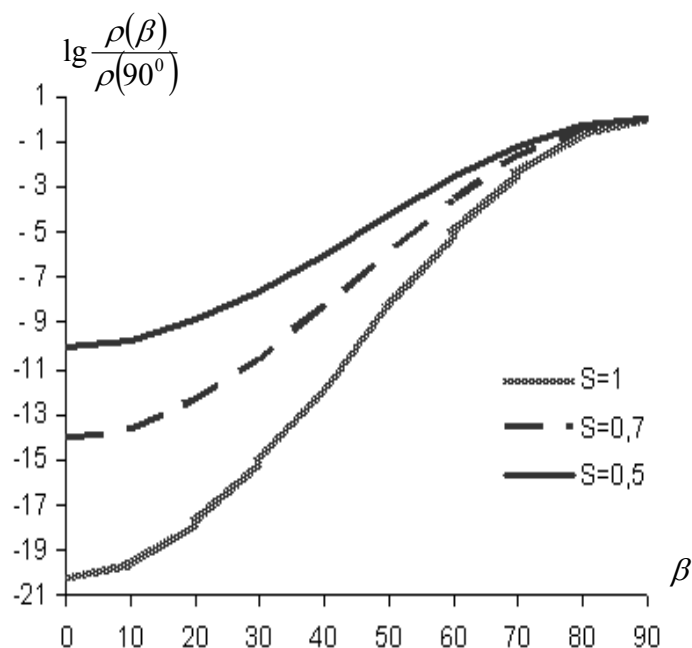


Рис. 2. График зависимости $\lg \frac{\rho(\beta)}{\rho(90^\circ)}$ от угла β при различных значениях параметра порядка S

Можно получить зависимость степени ориентации от времени облучения или от поглощенной энергии E , которая пропорциональна времени облучения:

$$\begin{aligned}dn &= -\aleph n dt, \\n &= n_0(1 - \exp(-\aleph t)),\end{aligned}$$

где n – число неориентированных молекул в момент времени t ; n_0 – число неориентированных молекул в необлученном образце, т.е. при $t=0$. Так как энергия излучения пропорциональна времени t , то

$$n = n_0(1 - \exp(-\aleph' E)).$$

ВЫВОДЫ. Предложен механизм ориентации жидких кристаллов и красителей лазерным излучением, основанный на учете анизотропии оптической поляризуемости молекул. Найдена зависимость энергии молекул мезогенов и красителя от анизотропии оптической поляризуемости молекул, параметра порядка и числа молекул в кластере. Найдена зависимость энергии молекул от напряженности электрического поля световой волны и угла падения светового пучка. Построена функция распределения кластера по углам. Оценено число молекул в кластере. Получена зависимость числа ориентированных молекул от времени облучения.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 12-07-31172_мол-а 12-07-90006-Бел-а, 12-07-90007-Бел-а, грантов Президента РФ НШ-1495.2012.8 и МК-1969.2012.9.

ЛИТЕРАТУРА

1. Квасников, Е.Д., Козенков, В.М., Барачевский, В.А./Е. Д. Квасников, В. М. Козенков, В.А. Барачевский // Доклады Академии наук СССР. – 1977. – **237**. – С. 633.
2. Ishimura, K., Hayashi, Y., Akiyama, H., Ikeda, T., Ishizuki, N. / K. Ishimura, Y. Hayashi, H. Akiyama, T. Ikeda, N. Ishizuki. // Applied Physics Letters/ - 1993. - **63**. – p. 449.
3. Gibbons, W.M., Kosa, T., Palffy-Muhoray, P., Shannon, P.J., Sun, S.T. / W.M. Gibbons, T. Kosa, P. Palffy-Muhoray, P.J. Shannon, S.T. Sun. // Letters to Nature. 1995. – **377**. – p. 43.
4. Schadt, M., Seiberle, H., Schuster, A. / M. Schadt, H. Seiberle, A. Schuster // Nature. 1996. - **381**, p. 212.
5. Chigrinov, V., Kozenkov, V., Kwok, H.-S. Photoalignment of Liquid Crystalline Materials / V. Chigrinov, V. Kozenkov, H.-S. Kwok. // Wiley-SID Serlesin Display Technology. John Wiley & Sons. - 2008.
6. Kozenkov, V., Belyaev, V., Chigrinov, V., Tumovskii, G., Spakhov, A. Structure and Properties of Azo Dye Films for Photoalignment and Photochromic Applications / V. Kozenkov, V. Belyaev, V. Chigrinov, G. Tumovskii, and A. Spakhov // SID'12 Digest. – 2012. - p.1411.

7. Chigrinov, V., Pikin, S., Verevochnikov, A., Kozenkov, V., Khazimullin, M., Ho, J., Huang, D.D., Kwok H.-S./ V.Chigrinov, S.Pikin, A.Verevochnikov, V.Kozenkov, M. Khazimullin, J. Ho, D.D. Huang, H.-S. Kwok // Phys. Rev. – **69**. – 061713. - p. 1.
8. Цветков, В.Н., Эскин, В.Е., Френкель, С.Я. Структуры макромолекул в растворах / В.Н. Цветков, В.Е. Эскин, С.Я. Френкель. // М.: Наука, 1964.
9. Беляев, В.В., Немцов В.Б. Молекулярное трение и вращательная вязкость нематических жидких кристаллов / В.В. Беляев, В.Б. Немцов // Журнал физической химии. – 1992. – **66**. - № 10. С. 1492.

DISTRIBUTION OF DYE MOLECULES ORIENTATION IN PHOTOALIGNING LAYERS. INCIDENCE ANGLE OF POLARIZED LIGHT BEAM

N. Barabanova*, V. Belyaev*, D. Bogdanov*,
A. Bugrimov*, A. Dadivanyan*. V. Chigrinov**

**Moscow Region State University*

10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia

***University of Science and Technology, Hong Kong, China*

Abstract. A mechanism of dyes molecules orientation by laser radiation is proposed that takes into account anisotropy of molecular optical polarizability. A dependence of dye molecules energy on polarizability anisotropy, order parameter, quantity of molecules in a cluster dyes, strength of light wave electrical field, light beam incidence angle is derived.

Keywords: liquid crystals, photoorientation, laser radiation, cluster.

УДК 621.378+514.76

КВАНТОВО-ИНФОРМАЦИОННЫЙ ПОДХОД К РАСПРОСТРАНЕНИЮ СИГНАЛОВ ВО ВСЕЛЕННОЙ ГЁДЕЛЯ

Е.О. Матвеева

*Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»
127994, Москва, Вадковский пер., 1*

Аннотация. Рассматриваются геометрические основания для мгновенного распространения световых сигналов в пространстве Вселенной Гёделя с использованием квантовой теории информации. Исследуются тензорные характеристики пространства, получена система обыкновенных дифференциальных уравнений для описания геодезических линий.

Ключевые слова: общая теория относительности, метрика Вселенной Гёделя, телепортация, квантовая теория информации.

В данной работе рассматривается возможность мгновенного распространения световых сигналов в пространстве Вселенной Гёделя на основе квантовой теории информации, обсуждаются теоретические основы и экспериментальные методы по телепортации световых сигналов. Эта тема является актуальной в наше время, поскольку возможность переноса объектов в пространстве и времени является огромным прорывом в области связи и передачи информации. Квантовая теория информации является наукой относительно молодой, сочетающая в себе разделы физики, математики, кибернетики и инженерии, еще не совсем сформировавшейся и представляет большой интерес к изучению. Ее целью является выяснение роли фундаментальных законов физики, открытых в XX веке в процессах получения, передачи и обработки информации. Сейчас ясно, что теория классической информации не всегда может адекватно ответить на вопрос, как информация может быть использована в реальном (физическом) – то есть в квантовом мире. Некоторые выводы теории квантовой информации могут быть представлены как обобщение классической теории в тех случаях, когда информация передается и хранится с помощью квантовых состояний, а не в форме классических битов [1].

Данная работа предполагает возможность телепортации световых сигналов на большие расстояния с помощью квантового канала связи и основывается на эксперименте ученых из Австралийского национального университета, которые получили Нобелевскую премию в области физики за «Экспериментальное исследование непрерывной переменной квантовой телепортации».

Геометрические свойства Вселенной Гёделя моделируют гипотезу о реальности мгновенного распространения сигналов. Это связано прежде всего с поведением геодезических линий в этом пространстве. В последнее время возник интерес к одному из псевдоримановых многообразий аффинной связности типа Гёделя [2],[3].

Как и в любом лоренцевом пространстве – времени, решение Гёделя можно задать метрическим тензором в системе локальных координат:

$$ds^2 = (dt)^2 - (dx)^2 + \frac{1}{2} \exp(2\sqrt{2}\omega x)(dy)^2 + 2 \exp(\sqrt{2}\omega x) dt dy - (dz)^2, \quad (1)$$

где ω – положительная постоянная, являющаяся угловой скоростью вращения вектора потока идеальной жидкости, заполняющей Вселенную Гёделя [3].

Метрика Гёделя не имеет сингулярностей, то есть нет особых точек, так как компоненты метрического тензора являются непрерывными дифференцируемыми функциями при всех допустимых значениях аргументов. Это означает, что Вселенная Гёделя не допускает черных дыр.

Произведем вычисления по следующей формуле [2]:

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\lambda} = \frac{1}{2} g^{\lambda\sigma} (\partial_{\mu} g_{\sigma\nu} + \partial_{\nu} g_{\sigma\mu} - \partial_{\sigma} g_{\mu\nu}). \quad (2)$$

Получаем следующие ненулевые компоненты объектов аффинной связности второго рода (символов Кристоффеля второго рода, которые симметричны относительно нижних двух индексов):

$$\begin{aligned}\Gamma_{12}^1 &= \Gamma_{21}^1 = \sqrt{2}\omega, \\ \Gamma_{23}^1 &= \Gamma_{23}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\exp(\sqrt{2}\omega x)\omega, \\ \Gamma_{31}^2 &= \Gamma_{13}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\exp(\sqrt{2}\omega x)\omega, \\ \Gamma_{33}^2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\exp(\sqrt{2}\omega x)\omega, \\ \Gamma_{12}^3 &= \Gamma_{21}^3 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\exp(-\sqrt{2}\omega x)\omega.\end{aligned}\tag{3}$$

Поскольку все компоненты объектов связности второго рода с индексом 4 равны нулю, то пространство Гёделя приводимо, то есть является декартовым произведением $M^3 \times R$, где M^3 - трехмерное пространство, а R – множество действительных чисел. Допуская вольность речи, можно говорить, что четвертая координата z «отщепляется».

Приведем уравнения геодезических линий в метрике Гёделя (1):

$$\begin{cases} t'' = -\sqrt{2}\omega x'(2t' + \exp(\sqrt{2}\omega x)y'), \\ x'' = -\frac{1}{\sqrt{2}}\omega \exp(\sqrt{2}\omega x)y'(2t' + \exp(\sqrt{2}\omega x)y'), \\ y'' = 2\sqrt{2}\omega \exp(-\sqrt{2}\omega x)t'x', \\ z'' = 0. \end{cases}\tag{4}$$

Первый интеграл этой системы уравнений геодезических линий имеет вид:

$$(t')^2 + 2\exp(\sqrt{2}\omega x)t'y' - (x')^2 + \frac{1}{2}\exp(2\sqrt{2}\omega x)(y')^2 - (z')^2 = k = const.\tag{5}$$

Частным решением системы (4) является следующая система:

$$\begin{cases} t = \gamma_1 u + \gamma_2 \\ x = \gamma_1 u + \gamma_3 \\ y = \frac{\sqrt{2}}{\omega} e^{-\sqrt{2}\omega(\gamma_1 u + \gamma_3)} + \gamma_4 \\ z = \gamma_5 u + \gamma_6 \end{cases}\tag{6}$$

В этом семействе решений константа k отрицательна. Система (4) имеет следующие первые интегралы:

$$\begin{aligned} t' + e^{\sqrt{2}\omega x} y' &= \frac{m}{2}, \\ (x')^2 + \frac{1}{2} v^2 &= \alpha, \\ e^{\sqrt{2}\omega x} y' &= m + c e^{-\sqrt{2}\omega x}, \end{aligned} \quad (7)$$

где m , α , c – константы.

Псевдорасстояние между точками A и B вычисляется по формуле:

$$S = \pm \int_{AB} |ds| = \int_{AB} \sqrt{|ds|^2}, \quad (8)$$

где ds^2 – метрика Вселенной Гёделя, а интегрирование производится по единственной геодезической линии, соединяющей точки A и B .

Между некоторыми различными точками пространства Гёделя псевдорасстояние может быть равно нулю. Это указывает на возможность мгновенной телепортации из одной точки в другую. Некоторые пары точек неравноправны, поскольку псевдометрика между ними может быть больше, равна или меньше нуля. Это является следствием знакопеременности квадратичной формы метрики (1). Таким образом, мы видим, что геометрические свойства модели пространства Вселенной Гёделя лежат в основе таких явлений как квантовая телепортация и исследование таких свойств является актуальной задачей нашего времени. К этой задаче относится, в частности, вычисление в явном виде формул, описывающих геодезические линии как временеподобных (псевдометрика <0), изотропных (псевдометрика $=0$) и пространственноподобных (псевдометрика >0). Что и позволяет подвести основу для обоснования телепортации из одной точки в другую.

Сложной проблемой является решение вариационной задачи, то есть нахождение единственной геодезической линии, проходящей через две заданные точки. Из общей теории пространства аффинной связности известно, что такая геодезическая линия всегда существует и единственная, если точки достаточно близки друг к другу [2].

Частный случай проблемы, а именно задача Коши, решается с помощью численных методов. По начальным данным и заданной угловой скорости строится аппроксимация геодезических линий вблизи гиперплоскости $x=0$. Полагая $x=0$ в уравнении геодезических линий можно получить уравнения с постоянными коэффициентами, которые могут быть проинтегрированы. И таким образом поведение геодезических линий вблизи $x=0$ приобретает приближенное описание.

Пространство Гёделя с геометрической точки зрения довольно сложное. Оно не является симметрическим пространством, то есть имеет непостоянную кривизну, поскольку есть ненулевые компоненты первой ковариантной производной тензора кривизны, хотя скалярная кривизна постоянна, что наблюдается у пространств постоянной кривизны, в частности гиперболических и эллиптических пространств. Посчитаны компоненты тензора Вейля, среди которых оказались ненулевые компоненты. Это указывает на то, что пространство Гёделя не допускает отображение, сохраняющее геоде-

зические линии на плоское пространство - времени Минковского. Поскольку среди первых ковариантных производных тензора кривизны очень много нулевых значений, то можно считать, что пространство Гёделя относится к классу пространств близких к симметрическим [4], [5].

Одной из проблем телепортации световых сигналов по геодезическим линиям является тот, факт, что из заданной точки в заданную попасть трудно. Есть два способа решения этой проблемы: во-первых, изменять начальные условия, во-вторых, «телепортироваться», так сказать, в два захода, то есть сначала в одну точку, а затем от нее в ту, которую хотели изначально.

ЛИТЕРАТУРА

1. Холево А.С. Квантовые системы, каналы, информация. – М.: МЦНМО, 2010. 128с.
2. Синг Дж. Л. Общая теория относительности. -М.: ИЛ, 1963.-432 с.
3. Шикин Г.Н., Ющенко Л.П. Энергетический спектр заряженных скалярных частиц во вселенной Гёделя.// Вестник РУДН, №3, 2011 С. 112-118.
4. Матвеев О.А., Нестеренко Е.Л. Алгебраическая теория пространств, близких к симметрическим. Монография.– Germany: LAP Lambert Academic Publishing, 2012.-125 с.
5. Матвеев О.А., Нестеренко Е.Л. Универсальные алгебры в теории пространств аффинной связности, близких к симметрическим. Монография. -М.: Издательство МГОУ, 2012. -132 с.

QUANTUM - INFORMATION APPROACH TO THE DISSEMINATION SIGNALS IN GODEL UNIVERSE

E. Matveyeva

*Stankin Moscow State Technological University
1, Vadkovsky lane, Moscow, 105005, Russia*

Abstract. In the paper geometric grounds for instant dissemination of signals in space using Gödel Universe quantum information theory are discussed. the tensor characteristics of space are explored, a system of ordinary differential equations to describe geodesics lines is obtained.

Keywords: general relativity, the metric in Gödel's Universe, teleportation, quantum information theory.

УДК 533.72

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ТЕЧЕНИИ КУЭТТА ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗОВ

В.Н. Попов, Д.А. Рудный, А.А. Юшканов*

*Северный (Арктический) федеральный университет (Архангельск)
163002, Архангельск, Набережная Северной Двины, 17*

**Московский государственный областной университет (Москва)
107005, Москва, ул. Радио 10 а*

Аннотация. В рамках кинетического подхода построено аналитическое решение задачи о течении Куэтта для молекулярного газа. Построены профили массовой скорости газа и вектора потока тепла в канале, вычислены приходящиеся на единицу ширины канала величины потоков массы газа и тепла и отличная от нуля компонента тензора вязких напряжений. Проведено сравнение с аналогичными результатами, относящимися к бесструктурным одноатомным газам.

Ключевые слова: течение Куэтта, молекулярные газы, аналитические решения.

Введение

Для описания течений газа в каналах, расстояние между стенками которых соизмеримо со средней длиной свободного пробега молекул газа, необходимо использование кинетического подхода, основанного на решении кинетического уравнения Больцмана с соответствующими микроскопическими граничными условиями, которым должна удовлетворять функция распределения молекул газа на стенках канала [1]. В представленной работе в рамках кинетического подхода рассматривается задача о течении Куэтта – задача о течении газа в канале между двумя параллельными стенками, которые движутся, оставаясь параллельными самим себе, с равными по модулю, но противоположными по направлению скоростями. К настоящему времени в рамках кинетического подхода данная задача неоднократно рассматривалась, как с использованием точных аналитических, так и численных методов [2]-[11]. Однако полученные в указанных работах результаты относятся к газам, число Прандтля которых близко к $2/3$, в то время как для многих реальных газов это значение существенно отличается от приведенного выше. Так при $t = 20^\circ\text{C}$ для воздуха, кислорода и аммиака число Прандтля равно соответственно 0.71, 0.85 и 0.93, для водяных паров при $t = 100^\circ\text{C}$ число Прандтля равно 1.01 [12]. Учитывая сказанное, представляет интерес рассмотрение задач, связанных с исследованием зависимости макропараметров газа в канале от значения числа Прандтля. Анализ такого рода зависимости для молекулярных газов и составляет цель представленной работы. В качестве основного уравнения, описывающего кинетику процесса, в работе используется обобщение на случай молекулярных газов ЭС (эллипсоидально-статистической) модели кинетического уравнения Больцмана, предложенное в [13], а в качестве граничного условия на стенках канала – модель диффузного отражения.

Постановка задачи. Построение функции распределения молекул газа

Рассмотрим плоский канал толщиной D' , стенки которого расположены в плоскостях $x' = \pm d'$ прямоугольной декартовой системы координат ($d' = D'/2$), ось Oz' которой параллельна стенкам канала. В выбранной системе координат обобщение ЭС модели кинетического уравнения Больцмана на случай молекулярных газов записывается в виде:

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x'} + v_z \frac{\partial f}{\partial z'} = \frac{p}{\mu(1 - \nu + \theta\nu)} (G[f] - f), \quad (1)$$

где $p = nk_B T_{tr}$ и n – давление газа и концентрация молекул, k_B – постоянная Больцмана, T_{tr} – температура поступательных степеней свободы молекул газа, ν и θ – параметры релаксации, $\theta = 1/Z$, где $Z = \tau_R / \tau$, τ_R – время релаксации внутренних и поступательных степеней свободы молекул газа, τ – промежуток времени между двумя столкновениями молекул, а параметр ν связан со значением числа Прандтля газа Pr соотношением $Pr^{-1} = 1 - \nu + \theta\nu$,

$$G[f] = \frac{\rho \Lambda_\delta}{\sqrt{\det(2\pi F)}} \frac{1}{RT_{rel}^{\delta/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u}_g)F^{-1}(\mathbf{v} - \mathbf{u}_g) - \frac{I^{2/\delta}}{RT_{rel}}\right),$$

$\Lambda_\delta^{-1} = \int \exp(-I^{2/\delta}) dI$, I – энергия внутренних степеней свободы молекул газа, $\rho = mn$ – плотность газа, m – масса молекулы газа, δ – число внутренних степеней свободы молекул газа, $\mathbf{u}_g$ – массовая скорость газа, $F = (1 - \theta)[(1 - \nu)RT_{tr}\mathbf{I} + \nu\Theta] + \theta RT_{eq}\mathbf{I}$, T_{rel} – температура релаксации, связанная с равновесной температурой T_{eq} и температурой, отвечающей внутренним степеням свободы молекул газа T_{int} , равенством $T_{rel} = \theta T_{eq} + (1 - \theta)T_{int}$, $R = k_B / m$, $\mathbf{I}$ – единичный тензор, а тензор Θ связан с тензором вязких напряжений равенством $\mathbf{P} = \rho\Theta$.

Предположим, что стенки канала движутся в своих плоскостях в противоположных направлениях со скоростями $\mathbf{u}$ и $-\mathbf{u}$. Будем считать, что течение носит стационарный характер, а скорость движения стенок канала много меньше скорости звука в газе. Тогда рассматриваемая задача допускает линеаризацию. Учитывая, что в задачах скольжения функция распределения пропорциональна касательной к обтекаемой поверхности компоненте массовой скорости газа, функцию распределения молекул газа по координатам и скоростям представим в виде:

$$f(\mathbf{r}', \mathbf{v}, I) = M[f][1 + C_z Z(x, C_x)], \quad (2)$$

где $M[f]$ – локально-равновесный максвеллиан, $\mathbf{r}'$ – размерный радиус-вектор; $\mathbf{C} = \beta^{1/2} \mathbf{v}$ – безразмерная скорость молекул газа; $\beta = m/2k_B T_{eq}$; $x = x'/l_g$ – безразмер-

ная координата; $l_g = \eta_g \beta^{-1/2}/p$ – средняя длина свободного пробега молекул газа, η_g – коэффициент динамической вязкости газа,

$$M[f] = \frac{\rho \Lambda_\delta}{(2\pi RT_{eq})^{3/2}} \frac{1}{(RT_{rel})^{\delta/2}} \exp\left(-\frac{1}{2RT_{eq}} |\mathbf{v} - \mathbf{u}_g|^2 - \frac{I^{2/\delta}}{RT_{eq}}\right).$$

Подставляя (2) в (1), после линейаризации приходим к уравнению для нахождения $Z(x, \mu)$ ($\mu = C_x$)

$$\mu \frac{\partial Z}{\partial x} + Z(x, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\tau^2) [1 + 2(1 - \text{Pr}^{-1})\mu\tau] Z(x, \tau) d\tau. \quad (3)$$

Общее решение (3) имеет вид [6]

$$Z(x, \mu) = A_0 + A_1(x - \gamma\mu) + \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\frac{x}{\eta}) F(\eta, \mu) a(\eta) d\eta \quad (4)$$

Здесь A_0 , A_1 и $a(\eta)$ – неизвестные параметры и функция, подлежащие дальнейшему определению,

$$F(\eta, \mu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \eta P \frac{1}{\eta - \mu} + \exp(\eta^2) \lambda(\eta) \delta(\eta - \mu),$$

$$\lambda(z) = 1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}} z \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-\mu^2) d\mu}{\mu - z},$$

$P(1/z)$ – распределение в смысле главного значения при вычислении интеграла от $1/z$, $\delta(z)$ – дельта-функция Дирака, $\gamma = \text{Pr}^{-1}$. В случае использования модели диффузного отражения граничные условия на стенках канала запишутся в виде:

$$Z(\pm d; \mp \mu) = \pm 2U, \quad \mu > 0. \quad (5)$$

Здесь $U = \beta^{1/2} u$ – модуль безразмерной скорости движения стенок канала. Учитывая симметрию задачи, $Z(-d; -\mu) = -Z(d; \mu)$. В силу этого, в (4) необходимо положить $A_0 = 0$, $a(-\eta) = -a(\eta)$. Учитывая сказанное и подставляя (4) в (5), приходим к интегральному уравнению:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, -d) d\eta}{\eta - \mu} + \exp(\mu^2) b(\mu, -d) \lambda(\mu) = f(\mu), \quad \mu > 0, \quad (6)$$

$$f(\mu) = -2U + A_1(d + \gamma\mu) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\tau b(\tau, d) d\tau}{\tau + \mu}, \quad b(\eta, x) = \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) a(\eta). \quad (7)$$

Решение (6) ищем с использованием теории краевых задач функции комплексного переменного. С этой целью введем вспомогательную функцию, заданную интегралом типа Коши:

$$N(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\eta b(\eta, -d) d\eta}{\eta - z}. \quad (8)$$

С учетом граничных условий на верхнем и нижнем берегах разрезов для функций $N(z)$ и $\lambda(z)$, сведем интегральное уравнение (6) к краевой задаче Римана на действительной положительной полуоси:

$$N^+(\mu)\lambda^+(\mu) - N^-(\mu)\lambda^-(\mu) = 2\sqrt{\pi}i\mu f(\mu) \exp(-\mu^2), \quad \mu > 0. \quad (9)$$

Особенность краевой задачи (9) состоит в том, что функции $N(z)$ и $\lambda(z)$ имеют различные разрезы. Чтобы устранить эту особенность воспользуемся решением однородной краевой задачи:

$$\frac{X^+(\mu)}{X^-(\mu)} = \frac{\lambda^+(\mu)}{\lambda^-(\mu)}, \quad \mu > 0, \quad (10)$$

решение которой имеет вид [6]

$$X(z) = \frac{1}{z} \exp\left[\frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{[\theta(\tau) - \pi] d\tau}{\tau - z}\right], \quad \theta(\tau) = \frac{\pi}{2} - \operatorname{arcctg} \frac{\lambda(\tau)}{\sqrt{\pi}\tau \exp(-\tau^2)}.$$

С учетом решения однородной краевой задачи (10) перепишем (9):

$$N^+(\mu)X^+(\mu) - N^-(\mu)X^-(\mu) = \frac{X^-(\mu)}{\lambda^-(\mu)} 2\sqrt{\pi}i\mu f(\mu) \exp(-\mu^2), \quad \mu > 0. \quad (11)$$

Линии скачков функций $N(z)$ и $X(z)$ совпадают с контуром краевого условия. Тогда, учитывая поведение входящих в (11) функций, по формулам Сохоцкого получаем ее общее решение:

$$N(z) = \frac{1}{X(z)} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{X^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} \eta f(\eta) \exp(-\eta^2) \frac{d\eta}{\eta - z}. \quad (12)$$

Раскладывая (12) в окрестности бесконечно удаленной точки, приходим к условию разрешимости краевой задачи (11)

$$-2U + A_1(d - \gamma Q_1) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \eta X(-\eta) a(\eta) \exp\left(-\frac{d}{\eta}\right) d\eta = 0. \quad (13)$$

Здесь $Q_1 = -1.01619$ – интеграл Лойалки. Учитывая, что согласно (7), (8)

$$N^+(\mu) - N^-(\mu) = 2\sqrt{\pi}i\mu a(\mu) \exp\left(-\frac{d}{\mu}\right),$$

для нахождения $a(\mu)$ приходим к интегральному уравнению Фредгольма второго рода

$$\begin{aligned} a(\mu) = & \frac{h(\mu)}{\gamma^{-1}d - Q_1} \left[2U + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \eta X(-\eta) a(\eta) \exp\left(-\frac{d}{\eta}\right) d\eta + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\gamma^{-1}d - Q_1) \int_0^{+\infty} \eta X(-\eta) a(\eta) \exp\left(-\frac{d}{\eta}\right) \frac{d\eta}{\eta + \mu} \right], \\ h(\mu) = & \frac{X(-\mu)}{2|\lambda^+(\mu)|^2} \exp\left(-\mu^2 - \frac{d}{\mu}\right). \end{aligned} \quad (14)$$

Решение (14) ищем в виде степенного ряда

$$a(\mu) = \sum_{k=0}^{+\infty} \lambda^k a_k(\mu), \quad \lambda = \frac{1}{\sqrt{\pi}}. \quad (15)$$

Подставляя (15) в (14) и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях λ , приходим к системе рекуррентных соотношений, из которых находим:

$$\begin{aligned} a_0(\mu) &= \frac{2Uh(\mu)}{\gamma^{-1}d - Q_1}, \\ a_1(\mu) &= a_0(\mu) \int_0^{+\infty} g(\eta) \left[1 + \frac{\gamma^{-1}d - Q_1}{\eta + \mu} \right] d\eta, \\ a_2(\mu) &= a_0(\mu) \int_0^{+\infty} g(\eta) \left[1 + \frac{\gamma^{-1}d - Q_1}{\eta + \mu} \right] d\eta \int_0^{+\infty} g(\tau) \left[1 + \frac{\gamma^{-1}d - Q_1}{\tau + \eta} \right] d\tau, \\ &\dots, \\ g(\eta) &= \frac{\eta X^2(-\eta)}{2|\lambda^+(\eta)|^2 (\gamma^{-1}d - Q_1)} \exp\left(-\eta^2 - \frac{d}{\eta}\right). \end{aligned}$$

Коэффициент A_1 находим из (13). Подставляя (15) в (13) и вычисля входящие в полученное выражение интегралы, находим

$$A_1 = \frac{2U}{\gamma^{-1}d - Q_1} \left[1 + \frac{1}{\gamma^{-1}d - Q_1} \sum_{k=0}^{+\infty} I_k \right]. \quad (16)$$

Здесь

$$I_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g_1(\mu) d\mu, \quad (17)$$

$$I_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g_1(\mu) d\mu \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g(\eta) \left[1 + \frac{\gamma^{-1}d - Q_1}{\eta + \mu} \right] d\eta, \quad (18)$$

$$I_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g_1(\mu) d\mu \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g(\eta) \left[1 + \frac{\gamma^{-1}d - Q_1}{\eta + \mu} \right] d\eta \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} g(\tau) \left[1 + \frac{\gamma^{-1}d - Q_1}{\tau + \eta} \right] d\tau, \quad g_1(\mu) = g(\mu). \quad (19)$$

...

Таким образом, неизвестные параметры A_0 , A_1 и функция $a(\eta)$, входящие в (4) найдены и функция распределения молекул газа по координатам и скоростям построена.

Вычисление макропараметров газа в канале

С учетом построенной функции распределения вычислим безразмерную массовую скорость газа с канале $U_z(x)$, z -компоненту безразмерного вектора плотности потока тепла $q_z(x)$, приходящиеся на единицу ширины канала безразмерные потоки массы газа и тепла через верхнюю половину канала J_M и J_Q и значение безразмерной компоненты тензора вязких напряжений p_{xz} .

Исходя из статистического смысла функции распределения, находим

$$U_z(x) = \frac{U}{\gamma^{-1}d - Q_1} \left[1 + \frac{1}{\gamma^{-1}d - Q_1} \sum_{k=0}^{+\infty} I_k + \sum_{k=0}^{+\infty} J_k(x) \right], \quad (20)$$

$$q_z(x) = -\frac{U}{4(\gamma^{-1}d - Q_1)} \sum_{k=0}^{+\infty} J_k(x). \quad (21)$$

Здесь интегралы I_k ($k = 0, 1, 2, \dots$) определены выражениями (17)-(19), $d = D/2$, а интегралы $J_k(x)$ имеют тот же самый вид, что и введенные ранее I_k , с той лишь разницей, что в них вместо $g_1(\mu)$ входит функция

$$\gamma(x, \mu) = \frac{X(-\mu)}{2|\lambda^+(\mu)|^2} \exp(-\mu^2) \left[\exp\left(-\frac{d+x}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{d-x}{\mu}\right) \right].$$

Интегрируя (20) и (21) по x от 0 до d , находим

$$\begin{aligned} J_M &= \frac{1}{2d^2} \int_0^d U_z(x) dx = \\ &= \frac{U}{2d^2(\gamma^{-1}d - Q_1)} \left[\left(1 + \frac{1}{\gamma^{-1}d - Q_1} \sum_{k=0}^{+\infty} I_k \right) \frac{d^2}{2} + \sum_{k=0}^{+\infty} K_k \right], \end{aligned} \quad (22)$$

$$J_Q = \frac{1}{2d^2} \int_0^d q_z(x) dx = \frac{U}{8d^2(\gamma^{-1}d - Q_1)} \sum_{k=0}^{+\infty} K_k. \quad (23)$$

Здесь интегралы K_k отличаются от I_k тем, что в них вместо $g_1(\mu)$ входит функция

$$\zeta(\mu) = -\frac{\mu X(-\mu)}{2|\lambda^+(\mu)|^2} \exp(-\mu^2) \left[1 - \exp\left(-\frac{d}{\mu}\right) \right]^2.$$

Аналогичным образом находим выражение для компоненты тензора вязких напряжений

$$p_{xz} = -\frac{U}{2(\gamma^{-1}d - Q_1)} \left[1 + \frac{1}{\gamma^{-1}d - Q_1} \sum_{k=0}^{+\infty} I_k \right]. \quad (24)$$

Значения интегралов I_k и K_k , входящих в (21) – (23), вычислены с использованием пакета прикладных программ Maple 9.5 путем интерполяции подынтегральных функций линейными сплайнами. Учитывая то, что подынтегральные выражения содержат множитель $\exp(-\mu^2)$, эти интегралы достаточно быстро сходятся и вместо бесконечного верхнего предела интегрирования принималось значение, равное 5. Число учитываемых членов ряда существенно зависело от толщины канала. Так для канала толщиной $D' = 0,1 l_g$ для достижения точности 10^{-4} учитывалось шесть членов ряда, а для $D' = 10 l_g$ – только один (нулевой) член ряда. Значения J_M , J_Q и p_{xz} , рассчитанные для различных значений толщины канала на основании (22) – (24) приведены в таблице 1. Там же приведены соответствующие значения для одноатомного газа. Как следует из приведенной таблицы учет внутренних степеней свободы молекул газа практически не влияет на значение p_{xz} . Влияние на J_M имеет место только для каналов, толщиной $D' \leq l_g$. В то же время имеет место существенная зависимость влияния внутренних степеней свободы на значение J_Q . Данные результаты согласуются с вы-

водом, приведенным в [14], согласно которому наличие внутренних степеней свободы молекул газа в большей степени сказывается на тех свойствах газа, которые связаны с переносом молекулами энергии, и в меньшей степени на других характеристиках.

Таблица 1.

$\frac{D'}{l_g}$	NH_3 Pr = 0.93	O_2 Pr = 0.85	Воздух Pr = 0.71	Cl_2 Pr = 0.64	Pr = $\frac{2}{3}$
J_M					
0.1	7.0063(-1)	7.1953(-1)	7.5811(-1)	7.8081(-1)	7.7185(-1)
1.0	2.3674(-1)	2.4264(-1)	2.5533(-1)	2.6319(-1)	2.5992(-1)
10	4.2306(-2)	4.2455(-2)	4.2847(-2)	4.3147(-2)	4.3022(-2)
$-J_Q$					
0.1	1.0979(-1)	1.1441(-1)	1.2388(-1)	1.2947(-1)	1.2730(-1)
1.0	1.6720(-2)	1.8101(-2)	2.1082(-2)	2.2935(-2)	2.2190(-2)
10	2.0538(-4)	2.4094(-4)	3.2840(-4)	3.9013(-4)	3.6479(-4)
$-p_{xz}$					
0.1	5.2297(-1)	5.2374(-1)	5.2514(-1)	5.2588(-1)	5.2533(-1)
1.0	3.3953(-1)	3.4029(-1)	3.4183(-1)	3.4272(-1)	3.4228(-1)
10	8.3113(-2)	8.3115(-2)	8.3122(-2)	8.3127(-2)	8.3125(-2)

Заключение

Итак, в работе с учетом внутренних степеней свободы молекул построено аналитическое решение задачи о течении Куэтта. Для различной толщины канала вычислены приходящиеся на единицу ширины канала потоки массы газа и тепла, построены профили массовой скорости газа и вектора потока тепла, вычислены значения отличной от нуля компоненты тензора вязких напряжений. Проведенные численные расчеты показали существенное влияние внутренних степеней свободы молекул газа на значение потока тепла в канале.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. – М.: Наука, 1979. – 528 с.
2. Черчиньяни К. Математические методы в кинетической теории газов. – М.: Мир, 1973. – 245 с.
3. Латышев А.В., Юшканов А.А. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 1999. – № 10. – С. 35-41.
4. Siewert C.E. Poiseuille, Thermal Creep and Couette Flow: Results Based on the CES Model Linearized Boltzmann Equation // European Journal of Mechanics B / Fluids. 2002. – Vol. 21. P. – 579-597.
5. Siewert C.E. The linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions to Basic Flow Problems // Zeitschrift fur Angewandte Mathematic und Physik. 2003. – Vol. 54. P. – 273-303.

6. Латышев А.В., Юшканов А.А. Аналитическое решение граничных задач кинетической теории: Монография. – М.: МГОУ, 2004. – 286 с.
7. Garcia R.D.M., Siewert C.E. The Linearized Boltzmann Equation with Cercignani-Lampis Boundary Conditions: Basic Flow Problems in a Plane Channel. // *European Journal of Mechanics B / Fluids*. 2009. – Vol. 28. P. – 387-396.
8. Попов В.Н., Тестова И.В., Юшканов А.А. Аналитическое решение задачи о течении Куэтта в плоском канале с бесконечными параллельными стенками // *Журнал технической физики*. 2011. – Т. 81, № 1. – С. 53-58.
9. Попов В.Н., Тестова И.В., Юшканов А.А. Математическое моделирование течений газа в каналах. Монография. LAP LAMBERT Academic publishing. 2012. – 116 с.
10. Лукашев В.В., Попов В.Н., Юшканов А.А. Вычисление потока тепла в задаче о течении Куэтта с использованием зеркально-диффузной модели граничного условия на стенках канала // *Вестник Северного (Арктического) федерального университета. Серия «Естественные науки»*. 2012. – № 2. – С. 80–85.
11. Лукашев В.В., Попов В.Н., Юшканов А.А. Моделирование процессов переноса в задаче о течении Куэтта при неполной аккомодации тангенциального импульса молекул газа стенками канала // *Математическое моделирование*. 2013. – Т. 25, № 2. – С. 111–124.
12. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М.: Наука, 1972. – 720 с.
13. Andries P., Tallec P. Jr., Perlat J., Perthame B. The Gaussian-BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl numbers // *European Journal of Mechanics B Fluids*. 2000. – Vol. 19, No 6. P. – 813-830.
14. Ферziger Дж., Канер Г. Математическая теория переноса в газах. – М.: Мир, 1976. – 556 с.

ANALYTICAL SOLUTION OF THE COUETTE FLOW PROBLEM FOR MOLECULAR GASES

V. Popov, D. Rydny, A. Yushkanov*

*Northern (Arctic) Federal University (Arkhangelsk)
17, Severnaya Dvina Emb. Arkhangelsk, 163002, Russia*

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

Abstract. An analytic solution to the problem of the Couette flow for molecular gases is constructed using the kinetic approach in the isothermal approximation. Structures of mass speed of gas and vector of a stream of heat in the channel are constructed. The mass and heat fluxes falling to the unit of channel width as well as the nonzero component of the viscous stress tensor are calculated. The results are compared with analogous data obtained for unstructured one-nuclear gases.

Keywords: Couette flow, molecular gases, analytic solution.

УДК: 538.93

ПОВЕРХНОСТНАЯ ДИФФУЗИЯ ПРИ СУБКРИТИЧЕСКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

И. Медведь*, А. Трник**

**Кафедра физики, Университет Константина Философа, Нитра, Словакия*

***Кафедра материалов и химии, Строительный факультет, Чешский технический университет
Прага, Чешская республика*

Аннотация. Представлен статистическо-механический подход к изучению поверхностной диффузии с помощью модели газовой решётки. Обсуждаются общие формулы для функции покрытия химических и скачковых диффузионных коэффициентов при низких температурах и в локальном равновесном пределе. Также обсуждается использование специфической двухмерной модели.

Ключевые слова: зависимость покрытия, низкие температуры, фазовые переходы, коэффициент поверхностной диффузии

SURFACE DIFFUSION AT SUBCRITICAL TEMPERATURES: SELECTED RIGOROUS RESULTS

I. Medved*, A. Trník**

*Department of Physics, Constantine the Philosopher University
94974 Nitra, Slovakia*

*Department of Materials Engineering and Chemistry,
Faculty of Civil Engineering, Czech Technical University
16629 Prague, Czech Republic*

Abstract. A statistical mechanical approach to study surface diffusion by lattice-gas models is presented. General formulas for the coverage dependences of chemical and jump diffusion coefficients are discussed at low temperatures and in the local equilibrium limit. An application to a specific two-dimensional model is considered.

Keywords: Coverage dependence, low temperatures, phase transition, surface diffusion coefficient

1. Introduction

Migration of adsorbates on solid surfaces is essential in many physical-chemical processes, for example, adsorption and desorption, crystal and film growth, melting, or roughening. Good understanding of the migration, and surface diffusion in particular, is important if one should be able to control these processes.

A relevant parameter that describes surface mass transport for a many-particle system is the chemical surface diffusion coefficient, D_c . It is defined via the Fick's first law, $\mathbf{J} = -D_c \nabla \theta$, where $\mathbf{J}$ is the surface diffusion flux and θ is the surface coverage. Due to the Kubo-Green equation [1-3],

$$D_c = \Phi D_j, \quad \Phi = \frac{1}{k_B T} \frac{\theta}{\chi}, \quad (1)$$

one may separate thermodynamic and kinetic properties of D_c : the former are represented by the thermodynamic factor Φ , while the latter by the jump surface diffusion coefficient D_j . Here k_B is the Boltzmann constant, T is the temperature, and χ is the isothermal susceptibility.

Lattice-gas models are conveniently used to simulate surface diffusion. In these models, the migration of adparticles is given by the potential relief of the substrate surface: most of the time the particles are at the positions (sites) where the relief has minima, but occasionally they make random jumps to neighboring vacant sites. If the jumps are considered to be instant, the microstates of a system can be represented by occupation numbers (one number for each site), exactly as in a lattice-gas model. Although this description is rather simplifying, it is expected that it contains the principal features of the diffusion. Moreover, there are several statistical mechanical methods (the mean-field, real-space renormalization group, or computer simulation techniques) that can be applied to study lattice-gas models [3, 4].

To determine the diffusion coefficient D_c , it is necessary to solve a set of balance equations for a system of particles strongly interacting among themselves as well as with the substrate surface. An approximation is usually considered to treat such a complex kinetic problem. One of them is the local equilibrium limit in which the surface coverage θ is supposed to vary very slowly with time and space. Then the coefficient D_c can be expressed via thermodynamic quantities, i.e., via the free energy, f , of the system [1, 5-7]. This approach is rather safe for lattice gases: the obtained analytical results were shown to be in good agreement with the numerical (Monte Carlo) results [8].

An intriguing problem is a sudden deposition of an adsorbate (a sudden change in θ) during surface diffusion, i.e., the presence of a first-order phase transition. Lattice gases can be used to model also such phase changes. Thus, they also provide a suitable framework to investigate the effects of these transitions on surface diffusion [2, 9-19]. In this paper, we briefly outline our recent rigorous results concerning this problem at low (sufficiently subcritical) temperatures. We will illustrate application of our general formulas, using a one-component lattice-gas model of surface diffusion.

2 General results

2.1 Two starting points

Our approach is based on two main points as follows. First, we assume that the local equilibrium approximation is applicable so that the free energy f is sufficient to obtain the diffusion coefficient D_c . Namely, if the jumps of particles are uncorrelated and restricted to the nearest neighbors and if an activated particle interacts only with the adjacent adparticles, then the chemical diffusion coefficient can be approximated as [5, 11, 12]

$$D_c \approx D_0 \frac{e^{\mu/k_B T} P}{k_B T \chi}, \quad (2)$$

where D_0 is the diffusion coefficient of non-interacting particles and μ is the chemical potential. The correlation factor P is a sum of the probabilities that certain clusters of

adjacent sites are vacant [8, 11, 20], which can be expressed via derivatives of f with respect to suitable (fictitious) parameters, u_i , as

$$P = C_0 + \sum_i C_i \frac{\partial f}{\partial u_i}. \quad (3)$$

Note that the factor P is a thermodynamic quantity, as are the coverage θ and susceptibility χ . Thus, the evaluation of f is sufficient to yield D_c from Eq. (2). The same is true for the jump diffusion coefficient because

$$D_J \approx D_0 e^{\mu/k_B T} \frac{P}{\theta} \quad (4)$$

due to Eqs. (1) and (4).

Second, we assume that a first-order phase transition between two phases, denoted as p_1 and p_2 , occurs in the system at a transition point $\mu = \mu_t$. At low temperatures, the finite-size specific free energy f of a system with a large number, N , of adparticles can be evaluated near such a transition from the Borgs-Kotecký theory [21, 22]. The theory is rather general, as it is applicable to a large class of lattice-gas models with periodic boundary conditions, including those with a translation invariant finite range m -potential and a finite number of ground states.

2.2 The Coverage Dependences

Using Eqs. (2) – (4), it is possible to obtain the diffusion coefficients D_c and D_J and the thermodynamic factor Φ near a low-temperature phase transition of first order. Namely, we showed that [23]

$$D_c(\theta) \approx \frac{D_0 e^{\mu_t/k_B T}}{\Delta\theta^* N} \left(\frac{P_1^*}{\theta - \theta_1^*} + \frac{P_2^*}{\theta_2^* - \theta} \right) \quad (5)$$

and

$$D_J(\theta) \approx \frac{D_0 e^{\mu_t/k_B T}}{\Delta\theta^*} \left(P_1^* \frac{\theta_2^* - \theta}{\theta} + P_2^* \frac{\theta - \theta_1^*}{\theta} \right), \quad (6)$$

as well as [24]

$$\Phi(\theta) \approx \frac{\theta}{(\theta_2^* - \theta)(\theta - \theta_1^*)N}. \quad (7)$$

Here θ_k^* are the single-phase coverages evaluated at the transition, $\Delta\theta^* = \theta_2^* - \theta_1^*$ is the coverage jump at the transition, and P_k^* are the single-phase values of the correlation factor P at the transition. It is clear that the coverage dependences of D_c , D_J , and Φ in the two-phase regime behave as hyperbolas. The coefficient D_J is essentially independent of the

system size N , while D_c and Φ are inversely proportional to N . Thus, there is an enormous drop of order $1/N$ in D_c due to a first-order phase transition.

Remark. Formulas (5) – (7) are valid for coverages in the range $\theta_1^* < \theta < \theta_2^*$. Here both phases coexist in the system. However, as soon as only one of the two phases is stable in the system, these formulas are not applicable any more. In this case we were able to obtain only model-dependent formulas [21, 23]. Nevertheless, in two tiny crossover regions (lying between the two single-phase regions and the two-phase region), the coverage dependences of D_c , D_j , and Φ can still be obtained in a general fashion, but the resulting formulas are rather complex [24, 23].

3 Application to a specific model

Let us now illustrate the above general results for a simple lattice-gas model that was used previously to simulate surface diffusion on a triangular lattice [10-12]. In the model each lattice site is either vacant or occupied by a particle, and its Hamiltonian is given as

$$H = \varepsilon N_b - \mu N_s. \quad (8)$$

Here N_b and N_s are the number of occupied pairs of nearest-neighbor sites and sites in a given microstate, respectively, and $\varepsilon < 0$ is an attractive interaction energy between two nearest-neighbor particles. The model is equivalent to the standard Ising model and exhibits a first-order transition at $\mu_t = 3\varepsilon$ between the fully occupied and the fully vacant phases at sufficiently low temperatures (for $k_B T < |\varepsilon| / \ln 3$) [25]. The phase diagram of this model is very simple: the fully vacant phase is stable for $\mu \leq \mu_t$, while the fully occupied phase is stable for $\mu \geq \mu_t$. Both the phases coexist at the point μ_t that is independent of the temperature.

Let the occupied and vacant phase correspond to phase p_1 (p_2). The single-phase free energies of the model from Eq. (8) can be easily calculated near the transition point μ_t . Taking into account only one-site thermal perturbations (they are the dominant contributions at low temperatures), we have [24]

$$f_1 \approx -k_B T \eta e^{(\mu - \mu_t)/k_B T}, \quad f_2 \approx 3\varepsilon - \mu - k_B T \eta e^{-(\mu - \mu_t)/k_B T} \quad (9)$$

with the shorthand $\eta \equiv \exp(\mu_t/k_B T) = \exp(-3|\varepsilon|/k_B T) = 1$. Consequently,

$$\theta_1 = -\frac{\partial f_1}{\partial \mu} \approx \eta e^{(\mu - \mu_t)/k_B T}, \quad \theta_2 = -\frac{\partial f_2}{\partial \mu} \approx 1 - \eta e^{-(\mu - \mu_t)/k_B T}, \quad (10)$$

$$\chi_1 = \frac{\partial \theta_1}{\partial \mu} \approx \frac{1}{k_B T} \eta e^{(\mu - \mu_t)/k_B T}, \quad \chi_2 = \frac{\partial \theta_2}{\partial \mu} \approx \frac{1}{k_B T} \eta e^{-(\mu - \mu_t)/k_B T}. \quad (11)$$

In addition, using the correlation factor P equal to the probability that a lattice bond is vacant (this corresponds to the simplest case when a particle in an activated state interacts

with no adsorbed particles), we have $P = 1 - 2\theta + \xi/3$ for the triangular lattice, where $\xi \equiv \partial f / \partial \varepsilon$ is the statistical average number of occupied bonds. Its single-phase values are

$$P_1 = 1 - 2\theta_1 + \frac{\xi_1}{3} \approx 1 - 2\eta e^{(\mu - \mu_t)/k_B T}, \quad P_2 = 1 - 2\theta_2 + \frac{\xi_2}{3} \approx 0. \quad (12)$$

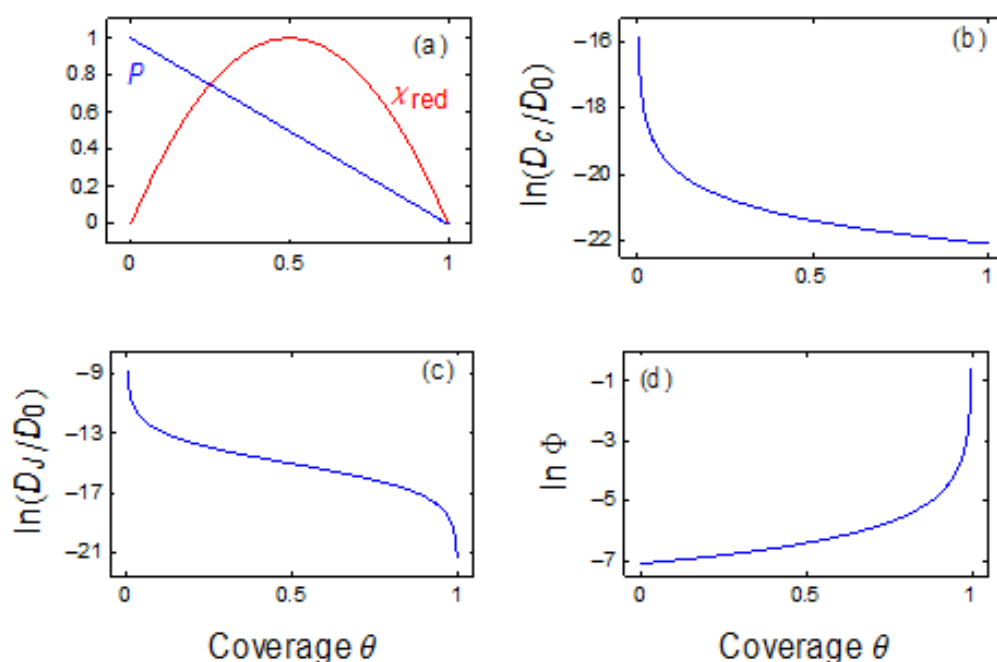


Fig. 1. The coverage dependence of (a) the correlation factor P and reduced susceptibility $\chi_{red} \equiv 4k_B T \chi / N$; (b) the chemical diffusion coefficient; (c) the jump diffusion coefficient; (d) the thermodynamic factor for model (8) as given by Eq. (11). The interaction energy is chosen as $\varepsilon/k_B T = -5$ and the system size $N = 30 \times 40$.

Evaluating the single-phase quantities at the transition point μ_t , we get $\theta_1^* \approx \eta$, $\theta_2^* \approx 1 - \eta$, $\Delta\theta^* \approx 1 - 2\eta$, $P_1^* \approx 1 - 2\eta$, and $P_2^* \approx 0$. Plugging these expressions into Eqs. (5) – (7), we obtain

$$P(\theta) \approx 1 - \theta, \quad \chi(\theta) \approx \frac{1}{k_B T} N(1 - \theta)\theta, \quad \Phi(\theta) \approx \frac{1}{(1 - \theta)N}, \quad (13)$$

$$D_c(\theta) \approx \frac{D_0 e^{-3|\varepsilon|/k_B T}}{N} \frac{1}{\theta}, \quad D_j(\theta) \approx D_0 e^{-3|\varepsilon|/k_B T} \frac{1 - \theta}{\theta}. \quad (14)$$

These coverage dependences are depicted in Fig. 1.

Acknowledgements. This research was supported by the Czech Science Foundation, Project No. P105/12/G059.

References

1. *Reed D.A., Ehrlich G.* Surface diffusion, atomic jump rates and thermodynamics. // *Surface Science*, 1981 V.102, p. 588
2. *Myshlyavtsev A.V., Stepanov A.A., Uebing C., Zhdanov V.P.* Surface diffusion and continuous phase transitions in adsorbed overlayers. // *Phys. Rev.*, 1995, V. B 52, p. 5977
3. *Ala-Nissila T., Ferrando R., Ying S.C.* Collective and single particle diffusion on surfaces. // *Adv. Phys.* 2002, V.51, p. 949
4. *Naumovets A.G.* Collective surface diffusion: An experimentalist's view. // *Physica*, 2005, V. A 357, p. 189
5. *Chumak A.A., Tarasenko A.A.* Diffusion and density fluctuations of atoms adsorbed on solid surfaces. // *Surf. Sci.*, 1980 V 91, p. 694
6. *Reed D.A., Ehrlich G.* Surface diffusivity and the time correlation of concentration fluctuations. // *Surf. Sci.*, 1981, V.105, p. 603
7. *Zhdanov V.P.* Elementary physicochemical processes on solid surfaces. New York : Plenum Press, 1991
8. *Tarasenko A.A., Jastrabik L., Müller T.* Modeling diffusion on heterogeneous lattices: Derivation of general analytical expressions and verification for a two-dimensional square lattice. // *Phys. Rev.*, 2007, V. B75, p. 085401
9. *Uebing C., Gomer R.* A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate- adsorbate interactions. I. Repulsive interactions. // *J. Chem. Phys.*, 1991, V.95, p. 7626
10. *Uebing C., Gomer R.* Surface diffusion in the presence of phase transitions: Monte Carlo studies of a simple lattice gas model. // *Surf. Sci.*, 1995, V.331-333, p. 930
11. *Tarasenko A.A., Nieto F., Jastrabik L., Uebing C.* Collective surface diffusion of repulsively interacting particles on a triangular lattice: Comparison of real-space renormalization group and Monte Carlo approaches. // *Phys. Rev.*, 2001, V. B 64, p. 075413
12. *Tarasenko A.A., Nieto F., Jastrabik L., Uebing C.* Diffusion of particles adsorbed on a triangular lattice: pairwise and three-particle interactions. // *Surf. Sci.*, 2003, V 536, p. 1
13. *Zaluska-Kotur M.A., Lusakowski A., Krukowski S., Turski L.A.* Collective diffusion of O/W(110) at high coverages: Monte Carlo simulations. // *Surf. Sci.*, V. 566--568, p. 210
14. *Chvoj Z., Mašín M., Ala-Nissila T.* Theoretical approaches to collective diffusion on stepped surfaces. // *J. Stat. Mech.*, 2006, P10003
15. *Yakes M., Hupalo M., Zaluska-Kotur M.A., Gortel Z.W., Tringides M.C.* Low-temperature ultrafast mobility in systems with long-range repulsive interactions: Pb/Si(111). // *Phys. Rev. Lett.*, 2007, V. 98, p. 135504
16. *Mašín M., Vattulainen I., Ala-Nissila T., Chvoj Z.* Interplay between steps and nonequilibrium effects in surface diffusion for a lattice-gas model of O/W(110). // *J. Chem. Phys.*, 2007, V. 126, p. 114705
17. *Chvoj Z.* The surface collective diffusion coefficient and diffuse phase transformations. // *J. Stat. Mech.*, 2008, p. P08002

18. Tarasenko A.A., Jastrabík L. Diffusion of particles on an inhomogeneous disordered square lattice with two non-equivalent sites. // *Surf. Sci.*, 2008, V. 602, p. 2975
19. Badowski L., Zahuska-Kotur M.A., Gortel Z.W. Collective diffusion in a non-homogeneous interacting lattice gas. // *J. Stat. Mech.*, 2010, p. P03008
20. Tarasenko A.A., Jastrabík L. Diffusion of particles over triangular inhomogeneous lattice with two non-equivalent sites. // *Physica*, 2009, V. A 388, p. 2109
21. Medved' I., Trník A. Surface diffusion near first-order phase transitions for a model on a triangular lattice. // *J. Stat. Mech.*, 2012, p. P01025
22. Borgs C., Kotecký R. A rigorous theory of finite-size scaling at first-order phase transitions. // *J. Stat. Phys.*, 1990, V. 61, p. 79
23. Medved' I., Trník A. Many-particle surface diffusion coefficients near first-order phase transitions at low temperatures. // *Phys. Rev.*, 2012, V. E 86, p. 011601
24. Medved' I., Trník A. Collective surface diffusion near a first-order phase transition. // *Phys. Rev.*, 2011, V. B 83, p. 233406
25. Huckaby D.A., Medved' I. Shapes of voltammogram spikes explained as resulting from the effects of finite electrode crystal sizes. // *J. Chem. Phys.*, 2002, V 117, p. 2914

SURFACE DIFFUSION AT SUBCRITICAL TEMPERATURES: SELECTED RIGOROUS RESULTS

I. Medved*, A. Trník**

*Department of Physics, Constantine the Philosopher University
94974 Nitra, Slovakia*

*Department of Materials Engineering and Chemistry,
Faculty of Civil Engineering, Czech Technical University
16629 Prague, Czech Republic*

Abstract. A statistical mechanical approach to study surface diffusion by lattice-gas models is presented. General formulas for the coverage dependences of chemical and jump diffusion coefficients are discussed at low temperatures and in the local equilibrium limit. An application to a specific two-dimensional model is considered.

Keywords: Coverage dependence, low temperatures, phase transition, surface diffusion coefficient

УДК: 534-16:549.6

СКОРОСТЬ ЗВУКА И МОДУЛЬ УПРУГОСТИ ЮНГА СМЕСЕЙ ИЛЛИТА И ЛЕТУЧЕЙ ЗОЛЫ

Т. Гулан¹, Ян Ондрушка^{1,2}, Р. Подоба^{1,3}, А. Трник^{1,2}, И. Медведь^{1,2}

¹ *Кафедра физики, Университет Константина Философа
Нитра, Словакия*

² *Кафедра материалов и химии, Строительный факультет, Чешский технический университет
Прага, Чешская республика*

³ *Кафедра физики, Строительный факультет, Словацкий технический университет
Братислава, Словакия*

Аннотация. Образцы из иллита с различным содержанием летучей золы были исследованы при комнатной температуре после обжигов при температурах в интервале 20°C - 1100°C. Измерение скорости звука (СЗ) и модуля упругости (МУ) осуществлялись методом импульсного возбуждения свободных поперечных колебаний. Для определения СЗ и МУ необходимо знать плотность и размеры образца и резонансную частоту. Потеря массы возрастает с ростом температуры обжига и достигает 8% в зависимости от содержания летучей золы. Изменения объема образцов до 500°C были незначительными и увеличились до 5 % при температурах обжига свыше 900°C. Значительный рост СЗ и МУ наблюдались свыше 900°C, что связано со спеканием.

Ключевые слова: скорость звука, модуль упругости, керамика, иллит, летучая зола

SOUND VELOCITY AND YOUNG MODULUS OF ILLITE – FLY-ASH MIXTURES

T. Húlan¹, J. Ondruška^{1,2}, R. Podoba^{1,3}, A. Trník^{1,2}

¹ *Department of physics, Constantine the Philosopher University
Nitra, Slovakia*

² *Department of material engineering and chemistry, Czech Technical University
Prague, Czech Republic*

³ *Department of physics, Slovak University of Technology
Bratislava, Slovakia*

Abstract: Illite samples with different content of fly-ash were investigated at room temperature after firing at temperatures from an interval of 25 – 1100 °C. The measurement of sound velocity (SV) and Young modulus (YM) were performed by the impulse excitation method based on the free flexural vibration. To determine SV and YM is necessarily to know the bulk density and dimensions of the sample as well as resonance frequency. It was found out that mass loss increases with the firing temperature and reaches up to 8 % depending on the fly-ash content. The volume changes of the samples were negligible up to 500 °C. The significant changes of the volume up to 5 % were observed for temperatures higher than 900 °C. Significant changes of SV and YM were observed for temperatures over 900 °C, which is connected with sintering of the sample.

Keywords: sound velocity, Young modulus, ceramics, illite, fly-ash

1. Introduction

Illite is one of clays used for the production of traditional ceramics. Illite structure is considered by the repetition of tetrahedron – octahedron – tetrahedron (TOT) layers [1]. Two outer layers are constituent of tetrahedron SiO₄ and the inner layer is constituent of hydroxyl groups. The interlayer space is mainly occupied by poorly hydrated potassium cations responsible for van der Waals binding. Structurally, illite is quite similar to muscovite with slightly more silicon, magnesium, and iron.

Power plant fly-ash is a by-product of lignite or the subbituminous coal combustion process. Its release into the atmosphere would have an adverse impact on the environment, so it must be separated from the flue gas by electrostatic or mechanical separating. It has been classified as a hazardous waste so the long-term storage is a significant environmental burden due to the increase of heavy metals (Hg, Pb, Cd, Zn) [2]. A million tons of fly-ash is produced

annually all around the world. Fly-ash, featuring a high content of SiO_2 , Al_2O_3 and CaO [3], can replace part clay as one kind of the raw material of ceramics. There are some works which studied adding the fly-ash into bricks and tiles [4 – 9].

Adding fly-ash to building ceramics indicates some changes of the material properties. In this work we study the influence of fly-ash on the sound velocity (SV) and Young modulus (YM) of ceramic mixtures. For technical practice is necessary to know the material parameters as YM and SV. The elastic constant can tell, how a material will respond to pressure, strain, torsion or bend. In fact the YM and SV are temperature dependent; therefore they are not true constants. The changes in elastic constants also reflect the phase changes [10, 11] induced by heat. Furthermore, elastic constants are very closely dependent on microstructure of the material, so through their measure we can find useful information about material structure [12 – 16].

One of many methods is the impulse excitation method based on free flexural vibrations of the sample after a mechanical pulse [17, 18]. The free vibrations are registered by the sensor, stored and then analyzed using the fast Fourier transformation (FFT). The result of FFT is a frequency spectrum where the frequency of the fundamental mode of the free vibrations can be identified. The mechanical pulse can be realized by the steel or ceramic projectiles which fall down on the sample, or by an electromagnetic pulse tool. This method exploits the formula derived from frequency equations that are derived from a partial differential equation that describes the vibrating motion of the sample. The measurement quantities, which are necessary for calculation of YM, are dimensions and mass of the sample and the resonant frequency [17, 19 – 22].

Most measurements of Young's modulus at elevated temperatures exploit the flexural vibration because of its simple excitation, large amplitude of deflection, and reliability. A goal of the paper is to study the influence of power plant fly-ash on sound velocity and Young modulus in illite – fly-ash mixtures samples.

2 Experimental

2.1 Samples

In this work we used illite clay from the Tokaj region of Hungary. The first step to prepare the samples was to grind and mill the illite agglomerates in a laboratory mill. The milling process guarantees the homogenization of the illite powder. For sample preparation illite powder with particles lower than 100 μm were used.

Table1. Chemical composition of the fly-ash Nováky, Slovakia

Compound	SiO_2	Al_2O_3	CaO	Fe_2O_3	MgO	Na_2O	K_2O	other
Mass (%)	35.50	12.20	29.20	6.10	2.90	0.69	1.20	12.21

The other compound of the samples was fly-ash from a power plant in Nováky, Slovakia. The fly-ash is by-product of lignite combustion. Usually it is formed as fine powder with spherical particles. The major compounds are SiO_2 and Al_2O_3 see Table 1.

The samples were prepared from illite, grog and fly-ash. Before adding fly-ash into the mixture it needed to be hydrated to change free CaO to CaCO_3 . After the hydration process the fly-ash was dried. For sample production powder with particles lower than 200 μm were used.

The last compound of the final mixture was illite fired at 1100 $^\circ\text{C}$. After this modification we obtained an opening material that is not affected by water and increased the rate of drying

and reduced shrinkage of the samples. For sample production was used sieved opening material to separate particles lower than 100 μm . The mineral composition of all compounds illite, fired illite and fly-ash is presented in Table 2.

Table2. Mineral composition of materials for sample preparation (%)

Minerál	Material		
	Illite	Fired illite	Fly-ash
Illite	52.9	-	-
Quartz	17.5	42.5	37.4
Muscovite	23.5	-	5.7
Potassium-Feldspar	5.8	-	5.7
Calcite	-	-	4.2
Anhydrite	-	-	17.5
Plagioclase	-	-	11.1
Portlandite	-	-	9.5
Hematite	-	4.2	7.9
Periclase	-	1.1	1.1
Spinel	-	18.9	-
Mullite	-	18.0	-
Sanidine	-	10.5	-
Diopside	-	2.6	-

We prepared 4 kinds of illite – fly-ash mixtures with different content of fly-ash. The initial compound of samples and the samples names are presented in Table 3. The cylindrical samples were made by a laboratory extruder and their dimensions were $\varnothing 12 \times 150$ mm. After the samples were dried, they were subjected to testing. Young modulus were measured at room temperature. The tested samples were preheated at temperatures from 100 – 1100 $^{\circ}\text{C}$ with 100 $^{\circ}\text{C}$ intervals.

Table3 Sample composition (wt. %)

	Sample name			
	Illite	H1	HU10	HU20
Illite	100	60	60	60
Fly-ash	0	0	10	20
Firedillite (grog)	0	40	30	20

2.2. Methods

The resonant frequency was measured by the impulse excitation technique (IET) [17, 18]. This method is based on natural flexural vibrations of a sample with free ends after a mechanical pulse. Free vibrations are registered by sensor. The results were analyzed using the fast Fourier transformation (FFT).

Young's modulus was calculated for a cylindrical sample by formula [20]

$$E = 1.6067 \frac{L^3 f^2 m}{d^4} T, \quad (1)$$

where L is sample length, f is a resonant frequency of the fundamental mode of the flexural vibration, m is sample mass, d is the diameter of the sample and T is a correction coefficient for $L/d > 20$ (2) calculated by a formula

$$T = 1 + 4.939(1 + 0.0752\mu + 0.8109\mu^2)\left(\frac{d}{L}\right)^2 - 0.4883\left(\frac{d}{L}\right)^4 - \left[\frac{4.691(1 + 0.2023\mu + 2.173\mu^2)\left(\frac{d}{L}\right)^4}{1 + 4.754(1 + 0.1408\mu + 1.536\mu^2)\left(\frac{d}{L}\right)^2} \right] \quad (2)$$

Poisson's ratio $\mu = 0.2$ is typical for ceramics materials [19].

The sound velocity v can be calculated by equation

$$v = \sqrt{\frac{E}{\rho}}, \quad (3)$$

Where E is Young's modulus and ρ is sample volume mass.

2.3 Apparatus for IET measurement

The apparatus for IET measurements basically consist of three parts: a sample support system, a piezoelectric sensor that converts mechanical vibration into electric signal, a signal amplifier and the computer for recording this signal. The frequency decomposition using of FFT was provided in program environment Matlab[®] R2009a. The diagram of the apparatus is shown on Fig. 1.

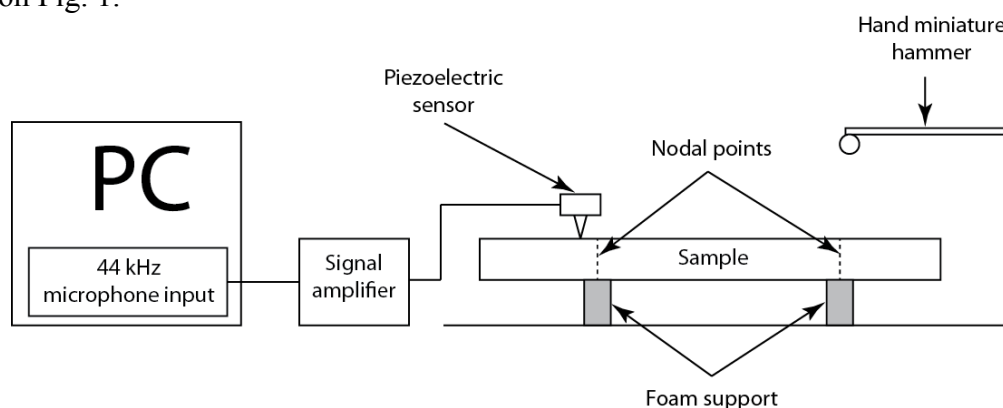


Fig. 1 Block diagram of the used test apparatus.

The sample was supported at its nodal points of the first mode of flexural vibration in distance $0.224 \cdot L$ from both sides of the sample. The piezoelectric sensor was placed near nodal points in order to minimize its effect on natural vibration. Vibration was excited by mechanical impulse and free vibration was recorded.

3 Results and discussion

During firing the samples manifest structural changes that appear as bulk density change (Fig. 2), mass change (Fig. 3) or volume change (Fig. 4). We can observe that grog (fired illite) and fly-ash addition increase the sample porosity which can be registered as a decrease of bulk density (Fig. 2). The lowest values of bulk densities can be observed for samples HU10 and HU20 with 10 wt. % and 20wt. % of fly-ash addition. A small decrease of bulk density (Fig. 2) at interval 25 – 200 °C for all samples is connected with liberation of physically bonded water in samples pores. This process is also connected with mass loss (Fig. 3). On the other hand, volume changes observed in Fig. 4 were neglected. The other significant reaction in illite ceramics that occurs at interval 500 – 700 °C is well known as dehydroxylation. During this reaction illite structure decomposes contributing to an increase in the porosity [23]. The dehydroxylation can be observed as a bulk density decrease (Fig. 2) connecting with mass loss (Fig. 3). In Fig. 4 this reaction is recorded as 1 % increase of volume. At temperatures over 900 °C a high temperature processes like sintering occurs [24]. The rapid increase of bulk density (Fig. 2) and significant changes of volume, up to 5 wt. % (Fig. 4) were observed.

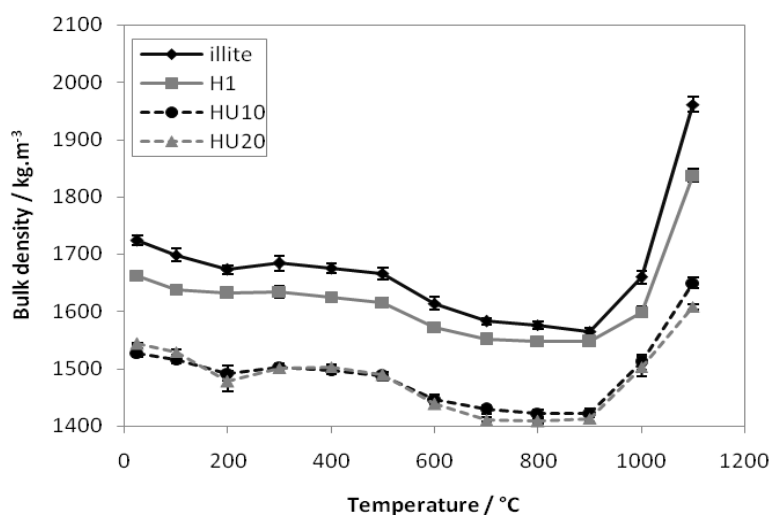


Fig. 2. Bulk densities of samples in dependence on temperature

The influence of fly-ash addition in the illite samples on sound velocity and Young modulus are depicted in Fig. 5 and Fig. 6. In both cases, a small decrease of SV and YM of H1, HU10 and HU20 curves can be observed compared to the illite curve. This is due to higher porosity of samples with grog and fly-ash addition. The liberation of physically bond water is connected with an increase of SV and YM in the temperature interval 25 – 200 °C. The small increase continues up to 400 °C. Dehydroxylation of illite has an influence on decrease of SV and YM. The significant changes of SV and YM can be observed over the temperature 900 °C due to a sample sintering.

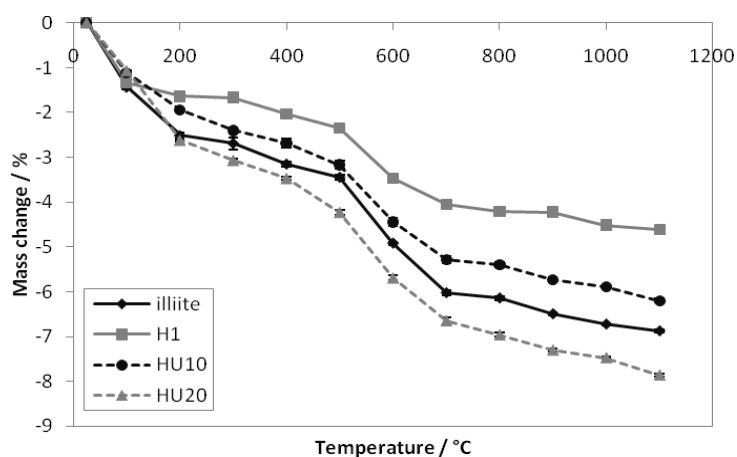


Fig. 3. Mass change of samples in dependence on temperature.

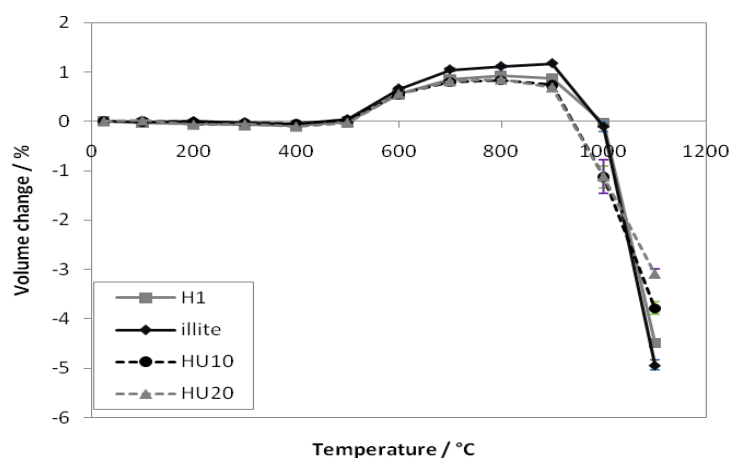


Fig. 4. Volume change of samples in dependence on temperature.

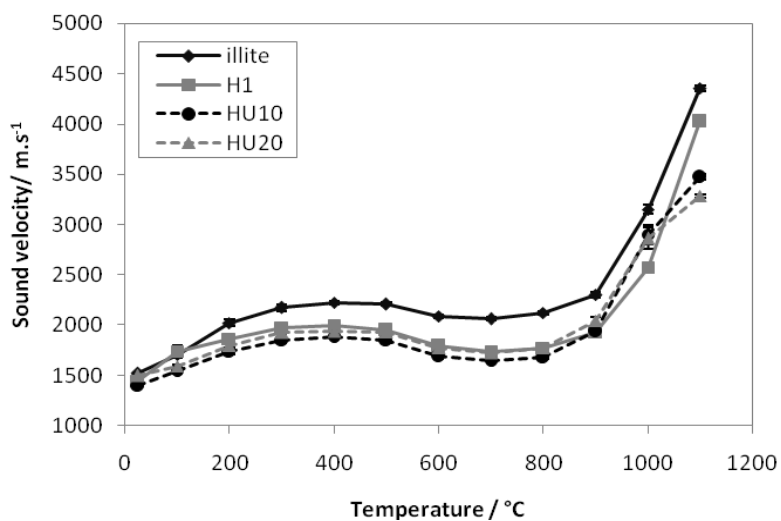


Fig. 5. Sound velocity of samples in dependence on temperature.

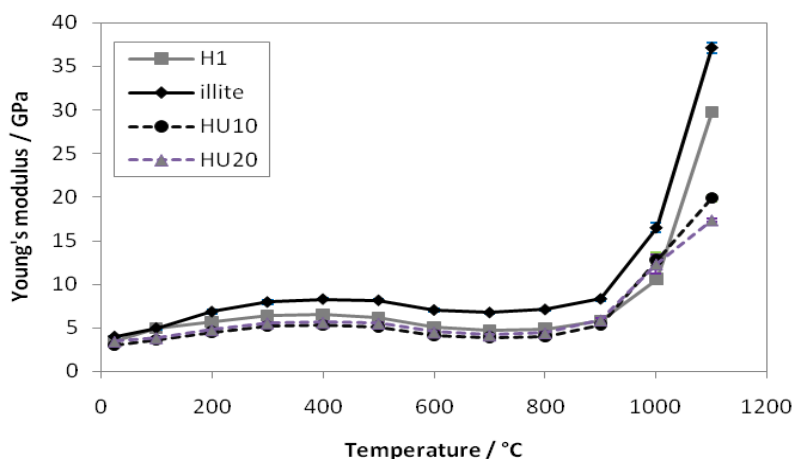


Fig. 6 Young's modulus of samples in dependence on temperature.

4 Conclusions

The impulse excitation technique (IET) was used to measure the sound velocity and Young's modulus at room temperature. Results obtained by the IET reveal two sources of increasing SV and YM. The first one is connected to the liberation of physically bounded water and occurs at the temperature interval 25 – 200 °C. The second source is connected to densification of the sample over the temperature 900 °C. The replacement of grog by fly-ash doesn't have a significant influence on SV and YM up to the temperature 800°C. Over this temperature the SV and YM significantly increase due to sintering. Addition of fly-ash decreases SV and YM of the ceramic samples fired at the temperature above 800 °C.

5 Acknowledgements

This work was supported by the grant VEGA 1/0646/12. Authors gratefully acknowledge to laboratory BEL/NOVAMANN International in Nové Zámky, Slovakia, for chemical analysis of fly-ash.

6 References

1. A laboratory manual for X-Ray Powder Diffraction, Illite Group. Available online: <http://pubs.usgs.gov/of/2001/of01-041/html/docs/clays/illite.htm>, (2013/04/15)
2. Haiying Z., Youcai Z., Jingyu Q. Study on use of MSWI fly ash in ceramic tile. // Journal of Hazardous Materials, 2007, V. 141 pp. 106-114
3. ASTM C 618. Fly ash for use as mineral admixture in Portland cement concrete. (published in 2001. Standard Documents. Philadelphia USA)
4. Xu L., Guo W., Wang G T., Yang N. Study on fired bricks with replacing clay by fly ash in high volume ratio. // Construction and Building Materials, 2005 V.19 pp. 243–247
5. Dondi M., Ercolani G., Guarini G., Raimondo M. Orimulsion fly ash in clay bricks - part 1: Composition and thermal behavior of ash. // Journal of the European Ceramic Society, 2002, V.22, pp. 1729–1735

6. *Dondi M., Guarini G., Raimondo M., Venturi I.* Orimulsion fly ash in clay bricks - part 2: Technological behavior of clay-ash mixtures. // *Journal of the European Ceramic Society*, 2002, V.22, pp. 1737–1747
7. *Haiyng Z., Youcai Z., Jingyu Q.* Utilization of municipal solid waste incineration (MSWI) fly ash in ceramic brick: product characterization and environmental toxicity. // *Waste Management*, 2011, V.31, pp. 331–341
8. *Takegawa T.* Manufacture of bricks from fly ashes. // *Fuel and Energy Abstracts*, 1996, 37-3, Chapter 96/03074
9. *Cultrone G., Sebastian E.* Fly ash addition in clayey materials to improve the quality of solid bricks. // *Construction and Building Materials*, 2009, V.23, pp. 1178–1184
10. *Štubňa I., Trník A., Vozár L.* Thermomechanical analysis of quartz porcelain in temperature cycles. // *Ceramics International*, 2007, V.33, pp. 1287–1291
11. *Vlach V., Bureš J.* Determination of the changes of physicomaterial properties of ceramics during the firing. // *Proc. Conf. Firing of Ceramics. Karlovy Vary 1976*. 94–102 (in Czech)
12. *Гаршин А.П., Гропянов В.М., Зайцев Г.П., Семёнов С.С.* Керамика для машиностроения. Москва : Научтехлитиздат 2003, 380 с.
13. *Pabst W., Gregorová E.* Derivation of the simplest exponential and power-law relations for the effective tensile modulus of porous ceramics via functional equations. // *J. Materials Science Letters*, 2003 V.22, pp. 1673–1675
14. *Churchman G.J., Forster P.K.* Factors affecting thermal shock resistance during fast firing of ceramics. // *New Zealand J. of Science*, 1974, V.17, pp. 59–70
15. *Marlowe M.O., Wilder D.R.* Sensitive resonant frequency technique for the study of sintering kinetics. // *J. Amer. Ceram. Soc.*, 1967, V.50, pp. 145–149
16. *Marlowe M.O., Wilder D.R.* Sintering kinetics study using reduced variables. // *J. Amer. Ceram. Soc.*, 1967, V.50, pp. 509–512
17. ASTM C 1259-01: Standard test method for dynamic Young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio for advanced ceramics by impulse excitation of vibration. (published in 2001. Standard Documents. Philadelphia USA)
18. *Bosomworth P.* An exciting technique for quality analysis. // *Ceramic Industry*. February 2005, pp. 20–24
19. *Schreiber E., Anderson O., Soga N.* Elastic constants and their measurement. New York : McGraw-Hill Book Co. 1973
20. ASTM C 1198-01: Standard test method for dynamic Young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio for advanced ceramics by sonic resonance. (published in 2001. Standard Documents. Philadelphia USA)
21. *Martinček G.* Nedeštruktívne dynamické metódy skúšania stavebných materiálov. Bratislava : Vydavateľstvo SAV. 1962 (in Slovakian)
22. *Bosomworth P.* Improved frequency equations for calculating the Young's modulus of bars of rectangular or circular cross section from their flexural resonant frequencies. // *J. ASTM International*, 2011, V.7, pp. 1–14
23. *Gualtieri A.F., Ferrari S.* Kinetics of illite dehydroxylation. // *Phys. Chem. Minerals*, 2006, V.33, pp. 409 – 501
24. *Pranckėbičiene J., Balvkevičius V., Špokauskas A.A.* Investigations on properties of sintered ceramics out of low-melting illite clay and additive of fine-dispersed nepheline syenite. // *Materials Science (Medžiagotyra)*, 2010, V.16, pp. 231–235

**SOUND VELOCITY AND YOUNG MODULUS
OF ILLITE – FLY-ASH MIXTURES**

T. Húlan¹, J. Ondruška^{1,2}, R. Podoba^{1,3}, A. Trník^{1,2}

¹ *Department of physics, Constantine the Philosopher University
Nitra, Slovakia*

² *Department of material engineering and chemistry, Czech Technical University
Prague, Czech Republic*

³ *Department of physics, Slovak University of Technology
Bratislava, Slovakia*

Abstract: Illite samples with different content of fly-ash were investigated at room temperature after firing at temperatures from an interval of 25 – 1100 °C. The measurement of sound velocity (SV) and Young modulus (YM) were performed by the impulse excitation method based on the free flexural vibration. To determine SV and YM is necessarily to know the bulk density and dimensions of the sample as well as resonance frequency. It was found out that mass loss increases with the firing temperature and reaches up to 8 % depending on the fly-ash content. The volume changes of the samples were negligible up to 500 °C. The significant changes of the volume up to 5 % were observed for temperatures higher than 900 °C. Significant changes of SV and YM were observed for temperatures over 900 °C, which is connected with sintering of the sample.

Keywords: sound velocity, Young modulus, ceramics, illite, fly-ash

ТЕХНОЛОГИИ И МЕТОДИКИ ОБУЧЕНИЯ

ПРОЕКТ FATİH – ВНЕДРЕНИЕ ИНТЕРАКТИВНОГО ОБУЧЕНИЯ В ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ШКОЛАХ ТУРЦИИ

Ашкын Суат

Университет Адьяман (Турция)

Аннотация. Рассматривается современный этап информатизации образования в Турции. Представлены цели и требования к результатам проекта FATİH. Проанализированы особенности аппаратного программного и методического обеспечения процесса обучения в рамках проекта.

Ключевые слова: Информатизация образования, информационные технологии, проект FATİH.

Быстро развивающиеся информационные технологии используются во всех областях нашей жизни. В наши дни применение современных технологий стало неизбежным и в области образования и обучения. Развитие и преобразования в области образования в Турции перешли в новую фазу после объявления в ноябре 2010 года о проекте активного использования информационных технологий в национальных программах образования.

Этот проект является продуктом сотрудничества Министерства образования и Министерства путей сообщения и называется «Движение за расширение возможностей и улучшение технологий» (первые буквы этих пяти слов на турецком языке и образуют аббревиатуру FATİH).



“yarınımızı bugünden fethetmeye”

Fırsatları Artırma Teknolojiyi
İyileştirme Hareketi

Стоимость этого проекта составляет приблизительно 500 миллионов долларов. В рамках проекта до 2013 года во всех общеобразовательных школах Турции должна быть введена система обучения на базе компьютеров.

В стратегическом плане министерства на 2010-2014 годы ставится целью устранение до конца 2014 года в школах и организациях, принадлежащих министерству, региональных различий в области информационных технологий.

Новшества, изменения и преобразования в области информационных технологий и технологий передачи информации, набирая скорость вместе с явлением глобализации, серьезным образом влияют на экономическую и социальную жизнь общества. В стратегическом документе «Организация государственного планирования Турции» об информационном

обществе сказано: «Стать государством с высоким уровнем развития науки и технологии, в котором наука и технология используются как эффективный инструмент и при принятии решений используются научные методы, государством с высоким уровнем благосостояния и конкурентоспособным в условиях глобальной конкуренции».

Это является приоритетной целью проекта FАTІН в области образования. Эффективное использование компьютеров в повседневной жизни и на работе выпускниками школ, в которых внедрен проект FАTІН, преобразование общества в информационное общество являются целями проекта. Этот проект, по сути, является всеобъемлющим и включает изменения в социальных и культурных областях.

Пилотная реализация:

Во втором полугодии 2011-2012 учебного года были выбраны 52 школы в 17 городах Турции, включая Анкару, Эрзурум, Стамбул, Балыкесир, Кайсери, Йозгат, Самсун, Ушак, Караман, Мерсин, Эрзурум, Ризе, Измир, Хатай, Коджаэли. Ученикам пятых классов были выданы 12 тысяч 500 планшетов, которые образуют сеть вместе с интерактивной доской. Если в течение 20 дней планшет не сможет установить связь с интерактивной доской, то планшет сам отключится и больше не включится.

Исследование технологического оборудования в школах Турции показывает, что почти во всех из них есть компьютерные классы и 96% из них имеют выход в интернет. В 1500 школах есть научные лаборатории на базе компьютеров. В 18500 школах используются офисные программы.

В рамках программы FАTІН для более чем 500 тысяч классов в 40 тысячах школах будут выданы более 614 тысяч ноутбуков и проекторов, более 38 тысяч multifunctional копировальных аппаратов, более 38 тысяч интерактивных досок.

В соответствии с этим проектом с помощью планшетов школьники получают быстрый доступ к интересующей их информации как в школах, так и у себя дома. Доступ к сайтам находится под строгим контролем, а вне школы и дома доступ к любым сайтам невозможен.

В классах будут трехступенчатые доски. Первый уровень – обычная доска, на котором пишут мелом. Второй уровень – магнитная белая доска, на котором пишут маркером. Третий уровень – интерактивная доска. В зависимости от содержания материала и уровня школьников может быть использована любая из них.

Планируется раздать школам планшеты, изготовленные по новейшим технологиям. Будут использованы марки GeneralMobileE-tab и Samsung Galaxy Tab. В эти планшеты будут уже загружены электронные версии учебников и в таком виде они будут выданы школьникам. В планшеты также загружены: Flash Player, Adobe Reader, Breeze 9, EBA Market, Galeri, GM Muzik, GM Video, Калькулятор, MEB (сайт Министерства образования, на котором имеется информация для родителей и информация о преподаваемых дисциплинах), Метод, Музыка, Часы, Календарь, Юношеская библиотека, Z-книга (книга, оснащенная мультимедийными средствами).

Проект FАTІН состоит из пяти основных компонентов:

1. Предоставление оборудования и программного обеспечения.
2. Предоставление образовательной информации в электронном виде и управление ею.

3. Эффективное использование информационных технологий в образовательных программах.
4. Обеспечение сознательного, безопасного и взвешенного использования информационных технологий.
5. Повышение квалификации преподавателей.

В рамках проекта FАTІН запланированы очные и дистанционные формы занятий для повышения квалификации преподавателей школ Турции, целями которых являются эффективное использование предоставленного для классов программного обеспечения, электронных версий учебников и инструкций для преподавателей.

Курсы повышения квалификации преподавателей:

1. Основы информационных технологий (75 часов)
2. Курсы по использованию информационных технологий в образовании (30 часов)
3. Форум «Технология и лидерство» (24 часа)

Предусмотрены и дистанционные формы обучения для инструкторов и преподавателей школ пилотной реализации проекта FАTІН.

В проекте FАTІН большое значение придается содержанию материала, для изучения которого и используются технологические возможности. Этот запланированный для школьников материал должен быть на высоком уровне и пригоден для использования в планшетах. Советом по образованию и воспитанию представлены учебники в PDF формате с мультимедийным содержанием.

Электронное содержание является ключевым местом в проекте FАTІН. Нельзя думать, что электронное содержание, доступное через планшеты, раздаваемые в рамках проекта FАTІН, является простым переводом учебной программы в цифровую форму. В электронном содержании отведено место и для материалов, находящихся вне рамок учебной программы, но полезных для образования и обучения, а также для материалов, создаваемых самими школьниками. Благодаря этому проект FАTІН в Турции положит начало интерактивному методу обучения между школьниками и преподавателями. Переход же этого нового для Турции интерактивного образования на международный уровень ещё больше повысит качество образования, а проект FАTІН можно будет рассматривать как вклад в науку.

Электронное содержание – это гораздо больше, чем простой перевод учебной программы в цифровую форму. Дело в том, что учебная программа после перевода в цифровую форму станет умнее, научится говорить и слышать. Другими словами, учебные материалы из одномерного книжного формата перейдут в реальный трехмерный мир. Описание такого революционного преобразования электронного содержания, в особенности, процессы его создания, определения его рамок, а также вклада в мир образования, связано с понятием интерактивности.

Возможность обмена электронным содержанием не только внутри одной школы, но и по всей Турции, расширяет границы, заложенные в понятие интерактивного образования. Если раньше ученик узнавал у учителя самое большее два решения одной и той же задачи, то теперь, благодаря интерактивному образованию, он получит возможность узнать гораздо больше решений. Интерактивность в образовании является одним самых важных факторов, которые предотвращают превращение ученика в робота и развитие у преподавателя бездушия при применении цифровых технологий в образовании.

Переход к интерактивным методам обучения с помощью проекта FАTІH приведет к следующим изменениям:

1. Школьник не сможет сказать, что он не смог найти книгу.
2. В процессе обучения будут задействованы несколько органов чувств.
3. Мгновенный доступ к нужной информации обеспечит качественное образование.
4. Не надо будет таскать тяжелые сумки.
5. Преподаватель и ученики не будут вдыхать мел.
6. В школу достаточно брать один планшет и одну тетрадь.
7. Благодаря предоставленным возможностям некоторые темы могут быть объяснены за короткое время и наилучшим образом.

Тот факт, что TUBITAK (Центр научных и технологических исследований Турции) выделит для проекта FАTІH 1,5 миллиона долларов в качестве поддержки разработчиков проекта Ar-Ge (Исследование-развитие), показывает степень важности интерактивных моделей образования.

Ниже приведены вопросы к ученикам седьмого класса из школ « Sincan İl Genel Meclisi» Турции, в которой был реализован проект FАTІH, и ответы учеников к ним:

Вопрос: Довольны ли вы тем, что в классе установлено компьютерное оборудование?

Все ответили «да».

Вопрос: Хотите ли вы, чтобы компьютерное оборудование было в классе все время?

Все ответили «да».

Вопрос: Умеете ли пользоваться компьютером?

Все ответили «да».

Вопрос: Какую пользу вам дает использование компьютерного оборудования в классе?

Ямур Туркеш: Когда вижу объект лучше усваиваю тему

Сема Вурал: Вначале я почти не умел пользоваться компьютером. Сейчас я хорошо знаю компьютер. Решаю задачи с помощью компьютера.

Онур Болукбаши: Уроки стали увлекательными.

Мерве Шенер: Стал легче усваивать уроки.

Вели Джан Каялы: Задачи решаем быстро. Несколько вариантов решения можем рассмотреть, не теряя при этом много времени.

Дарья Каракая: Если тема непонятна, то можно воспользоваться интернетом.

Мервэ Валкоджа: На уроках работаем успешнее.

Рамазан Кая: В случае болезни или отсутствия по уважительной причине можем учиться через Интернет.

Реджеп Дурмуш: Не хотим носить книги. Пусть вместо книг будут CD.

Имея свойства, присущие интерактивным методам образования, проект FАTІH является полезным со многих точек зрения. Возможность мгновенного доступа к информации как бы убирает понятие «место нахождения». В случае болезни ученик получает возможность слушать и видеть урок. Благодаря интерактивным методам образования ученик может дистанционно участвовать на уроке. Для реализации проекта FАTІH в будущем одновременно по всей Турции нужна поддержка в этой работе не только преподавателей общеобразовательных школ, но и преподавателей

высших учебных заведений, методистов, педагогов и психологов, специалистов по информационным технологиям. Опыт, знания и идеи зарубежных специалистов только ускорит процесс реализации проекта FATİH.

ЛІТЕРАТУРА

1. Akgün, E., Yılmaz, E. O. ve Seferoğlu, S. S. (2011). *Vizyon 2023 strateji belgesi ve fırsatları artırma ve teknolojiyi iyileştirme hareketi (FATİH) projesi: Karşılaştırmalı bir inceleme. XIII. Akademik Bilişim Konferansı (AB11)*, 2-4 Şubat 2011, İnönü Üniversitesi, Malatya.
2. Akıncı, A., Kurtuluş, M. ve Seferoğlu, S. S. (2012). *Bir teknoloji politikası olarak FATİH Projesinin başarılı olması için yapılması gerekenler: Bir durum analizi çalışması. XIV. Akademik Bilişim Konferansı (AB12)*, 1-3 Şubat 2012, Uşak Üniversitesi, Uşak.
3. Classroom Disruptor: the proprietary tablet PC that's changing Russian schools (By James Silver, 24 February 12):
<http://www.wired.co.uk/magazine/archive/2012/03/features/classroom-disruptor?page=all>
4. FATİH Projesi Etkileşimli Tahta Kullanımı:
<http://www.tutaysalgir.com/2011/11/fatih-projesi-akilli-tahta-kullanimi/>
5. FATİH Projesi-Donanım ve Yazılım Altyapısı Bileşeni:
<http://fatihprojesi.meb.gov.tr/tr/icerikincele.php?id=1>
6. Fırsatları Artırma ve Teknolojiyi İyileştirme Hareketi <http://fatihprojesi.meb.gov.tr/>
7. Koçak-Usluel, Y., Kalaycı, E., Bilgiç, H. G. ve Uslu, N. (2011). Öğrenme-öğretme süreçlerine BİT entegrasyonu ve mesleki gelişim: FATİH projesi örneği. *Proceedings of 11th International Educational Technology Conference (IETC2011)*, Volume II, 1852-1857. İstanbul University, İstanbul-TURKEY. [Çevrim-içi: <http://www.ietc.net/publications/ietc2011-2.pdf>], Erişim tarihi: 2 Temmuz 2011.

THE PROJECT FATİH - INTRODUCTION OF INTERACTIVE TEACHING IN SECONDARY SCHOOLS OF TURKEY

Ashkin Suat

Adiyaman Üniversitesi (Turkey)

Abstract. Is considered the modern stage of informatization of education in Turkey. Describes the purpose and requirements to the results of the project FATİH. Analyzed the characteristics of the hardware, the software and methodical provision of the training process in the framework of the project.

Keywords: Informatization of education, computer technology, project FATİH.

НАШИ АВТОРЫ

Ашкын Суат – Университет Адьяман (Турция); e-mail: dr.suataskin@hotmail.com

Барабанова Наталья Николаевна – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры общей физики Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-obfiz@mgou.ru

Беляев Виктор Васильевич – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник, заведующий кафедрой теоретической физики Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: vv.belyaev@mgou.ru

Богданов Дмитрий Леонидович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-obfiz@mgou.ru

Бугримов Анатолий Львович – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой вычислительной математики и методики преподавания информатики, декан физико-математического факультета Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д.10 а; e-mail: al.bugrimov@mgou.ru

Голов Александр Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-obfiz@mgou.ru

Гулан Томаш – докторант Университета Константина Философа в Нитре (Словакия); e-mail: tomas.hulan@ukf.sk

Дадиванян Артем Константинович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Зудина Марина Николаевна – Московский государственный областной университет, кафедра теоретической физики, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Коновалов Александр Михайлович – ФГУП «ИРЕА». 107076, Москва, Богородский Вал, д.3., аспирант. e-mail: ireon@mail.ru

Крысин Евгений Петрович – кандидат химических наук, заведующий лабораторией ФГУП «ИРЕА», 107076, Москва, Богородский Вал, д.3; e-mail: ireon@mail.ru

Кузнецов Михаил Михайлович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Литвин Олег Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой высшей и прикладной математики Украинской инженерно-

педагогической академии (г. Харьков), лауреат государственной премии Украины в области науки и техники; e-mail: academ_mail@ukr.net

Матвеева Екатерина Олеговна – Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»; e-mail: ya.kmatveyeva@yandex.ru

Медведь Игорь – доцент в Университете Константина Философа в Нитре (Словакия); научный сотрудник кафедры материалов и химии строительного факультета Чешского технического университета в Праге; e-mail: imedved@ukf.sk

Нечуйвистер Олеся Петровна – кандидат физико-математических наук, доцент, докторант кафедры высшей и прикладной математики Украинской инженерно-педагогической академии (г. Харьков); e-mail: olesia_nechuiviter@mail.ru

Ондрушка Ян – младший преподаватель кафедры физики Университета Константина Философа в Нитре (Словакия); e-mail: jondruska@ukf.sk

Перов Александр Алексеевич – Московский государственный областной университет, кафедра теоретической физики, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Подоба Рудольф – младший преподаватель кафедры физики строительного факультета Словацкого технического университета в Братиславе, докторант в Университете Константина Философа в Нитре (Словакия); rudolf.podoba@ukf.sk

Попов В.Н. – Северный (Арктический) федеральный университет (Архангельск), 163002, Архангельск, Набережная Северной Двины, 17; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Рудный Д.А. – Северный (Арктический) федеральный университет (Архангельск), 163002, Архангельск, Набережная Северной Двины, 17; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Рябцева Марина Викторовна – ведущий научный сотрудник ФГУП «ИРЕА», 107076, Москва, Богородский Вал, д.3; e-mail: ireon@mail.ru

Смотрова Лилия Владимировна – аспирант кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Трник Антон – старший преподаватель кафедры физики Университета Константина Философа в Нитре (Словакия); e-mail: atrnik@ukf.sk

Чигринов Владимир Григорьевич – доктор физико-математических наук, профессор Гонконгского университета науки и технологии (Китай); e-mail: vv.belyaev@mgou.ru

Шутов Александр Игоревич – Московский государственный областной университет, кафедра теоретической физики, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

Юшканов Александр Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10 а; e-mail: kaf-tfiz@mgou.ru

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА	3
Литвин О.Н., Нечуйвистер О.П. Приближенное вычисление осциллирующих интегралов трех переменных с использованием интерфлерации функций	3
ФИЗИКА	10
Голов А.Н., Зудина М.Н., Перов А.А., Шутов А.И. Кинетическая теория вихревых движений газоподобного облака, движущегося в потенциальном поле с начальной скоростью, ортогональной полю	11
Голов А.Н., Смотрова Л.В., Кузнецов М.М. Кинетика изменения показателей преломления фотоанизотропных пленок при воздействии переменного электрического поля	17
Крысин Е.П., Коновалов А.Н., Рябцева М.В. Ионнообменные процессы для получения высокочистых растворов гидроокисей тетраалкиламмония и их моделирование ..	22
Барabanова Н.Н., Беляев В.В., Богданов Д.Л., Бугримов А.Л., Дадиванян А.К., Чигринов В.Г. Распределение ориентации молекул красителя в фотоориентирующем слое в зависимости от угла падения поляризованного пучка	28
Матвеева Е.О. Квантово-информационный подход к распространению сигналов во вселенной Гёделя	34
Попов В.Н., Рудный Д.А., Юшканов А.А. Аналитическое решение задачи о течении Куэтта для молекулярных газов	39
Медведь И., Трник А. Поверхностная диффузия при субкритических температурах	48
Гулан Т., Ондрушка Ян, Подоба Р., Трник А., Медведь И. Скорость звука и модуль упругости Юнга смесей иллита и летучей золы	54
ТЕХНОЛОГИИ И МЕТОДИКИ ОБУЧЕНИЯ	64
Ашкын Суат. Проект FАTІN – внедрение интерактивного обучения в общеобразовательных школах Турции	64
НАШИ АВТОРЫ	69

CONTENTS

MATHEMATICS	3
Lytvyn O., Nechuiviter O. The calculation of triple integrals of highly oscillatory functions with using interflatation	3
PHYSICS	10
Golov A., Zudina M., Perov A., Shutov A. The kinetic theory of the vortex motions of the gas-liked clouds with a initial velocity orthogonal a field	11
Golov A., Smotrova L., Kuznetsov M. Kinetics of changes in refractive index in photo-anisotropyc films at the alternating electric field	17
Krysin E., Konovalov A., Ryabtseva M. Ion-exchange processes to obtain high pure solutions of tetraalkylammonium hydrooxides and their modeling	22
Barabanova N., Belyaev V., Bogdanov D., Bugrimov A., Dadivanyan A. Chigrinov V. Distribution of dye molecules orientation in photoaligning layervs. incidence angle of polarized light beam	28
Matveyeva E. Quantum - information approach to the disseminations signals in Godel universe	34
Popov V., Rydny D., Yushkanov A. Analytical solution of the Couette flow problem for molecular gases	39
Medved I., Trník A. Surface diffusion at subcritical temperatures: selected rigorous results	48
Húlan T., Ondruška J., Podoba R., Trník A. Sound velocity and Young modulus of illite – fly-ash mixtures	54
TECHNOLOGIES AND TECHNIQUES OF TRAINING	64
Ashkin Suat The project fatih - introduction of interactive teaching in secondary schools of Turkey	64
OUR AUTHORS	69

УДК 519.6

Приближенное вычисление осциллирующих интегралов трех переменных с использованием интерфлетации функций / Литвин О.Н., Нечуйвистер О.П. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.3-9.

При решении задач трехмерной компьютерной томографии, цифровой обработки сигналов и многих других необходимо рассматривать математические модели, где в качестве данных используются не только значения функции в узловых точках, но и следы функции на системе линий или плоскостей. В статье рассматривается и исследуется кубатурная формула вычисления осциллирующего интеграла функции трех переменных с использованием операторов сплайн-интерфлетации. Информация о функции задана её следами на взаимно-перпендикулярных плоскостях. На классе Гельдера получена оценка погрешности кубатурной формулы. Доказано, что эту оценку также можно получить через оценки погрешностей соответствующих квадратурных формул.

Табл.2. Библиогр.7.

УДК.533.72.

Кинетическая теория вихревых движений газоподобного облака, движущегося в потенциальном поле с начальной скоростью, ортогональной полю / А.Н. Голов, М.Н. Зудина, А.А. Перов, А.И. Шутов // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.11-17.

Рассмотрено выражение плотности потока вещества в нестационарной газоподобной системе многих частиц с учётом непотенциального слагаемого. Получены аналитические выражения компонент вихря плотности потока вещества. Дан анализ и графическое представление полученных формул.

Ил.3. Библиогр.15.

УДК 533

Кинетика изменения показателей преломления фотоанизотропных пленок при воздействии переменного электрического поля / А.Н. Голов, Л.В. Смотров, М.М. Кузнецов // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.17-22.

Рассмотрена статистическая модель нестационарной поляризации диэлектрика, развивающая представления теории Ланжевена – Дебая и работ Майера – Мейера на нестационарные состояния. На её основе получены формулы для поляризации вещества, выражения диэлектрической проницаемости и показателя преломления. С использованием релаксационного приближения найдены кинетические кривые, описывающие изменение показателя преломления со временем при длительном воздействии на образец периодического электрического поля. Рассмотрен вариант модели с ограничением вращательной подвижности дипольных кинетических единиц среды и найдена модификация указанных формул для этого случая.

Ил.1. Библиогр.3.

УДК 53.044

Ионообменные процессы для получения высокочистых растворов гидроокисей тетраалкиламмония и их моделирование / Е.П. Крысин, А.Н. Коновалов, М.В. Рябцева // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.22-28.

Рассмотрена возможность получения растворов тетраметиламмоний гидроксида и тетрабутил аммоний гидроксида на ионообменных смолах. Рассмотрена оптимизация соотношений между количеством смол и степенью конверсии исходного тетраметиламмоний галогенида для получения высокочистых растворов гидроксидов.

УДК 533

Распределение ориентации молекул красителя в фотоориентирующем слое в зависимости от угла падения поляризованного пучка / Н.Н. Барабанова, В.В. Беляев, Д.Л. Богданов, А.Л. Бугримов, А.К. Дадиванян, В.Г. Чигринов // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.28-34.

Предложен механизм ориентации красителей лазерным излучением, основанный на учете анизотропии оптической поляризуемости молекул. Найдена зависимость энергии кластера молекул красителя от анизотропии оптической поляризуемости молекул, параметра порядка и числа молекул в кластере. Построена функция распределения кластера по углам.

Ил.1. Табл.2. Библиогр.7.

УДК 621.378+514.76

Квантово-информационный подход к распространению сигналов во вселенной Гёделя / Е.О. Матвеева // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.34-38.

Рассматриваются геометрические основания для мгновенного распространения световых сигналов в пространстве Вселенной Гёделя с использованием квантовой теории информации. Исследуются тензорные характеристики пространства, получена система обыкновенных дифференциальных уравнений для описания геодезических линий.

Библиогр.5.

УДК 533.72

Аналитическое решение задачи о течении Куэтта для молекулярных газов / В.Н. Попов, Д.А. Рудный, А.А. Юшканов // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.39-47.

В рамках кинетического подхода построено аналитическое решение задачи о течении Куэтта для молекулярного газа. Построены профили массовой скорости газа и вектора потока тепла в канале, вычислены приходящиеся на единицу ширины канала величины потоков массы газа и тепла и отличная от нуля компонента тензора вязких напряжений. Проведено сравнение с аналогичными результатами, относящимися к бесструктурным одноатомным газам.

Табл.1. Библиогр.14.

УДК: 538.93

Поверхностная диффузия при субкритических температурах / И. Медведь, А. Трник // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.48-54.

Представлен статистическо-механический подход к изучению поверхностной диффузии с помощью модели газовой решётки. Обсуждаются общие формулы для функции покрытия химических и скачковых диффузионных коэффициентов при низких температурах и в локальном равновесном пределе. Также обсуждается использование специфической двухмерной модели.

Ил.1. Библиогр.5.

УДК: 534-16:549.6

Скорость звука и модуль упругости Юнга смесей иллита и летучей золы / Т. Гулан, Ян Ондрушка, Р. Подоба, А. Трник, И. Медведь // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.54-63.

Образцы из иллита с различным содержанием летучей золы были исследованы при комнатной температуре после обжигов при температурах в интервале 20°C - 1100°C. Измерение скорости звука (СЗ) и модуля упругости (МУ) осуществлялись методом импульсного возбуждения свободных поперечных колебаний. Для определения СЗ и МУ необходимо знать плотность и размеры образца и резонансную частоту. Потеря массы возрастает с ростом температуры обжига и достигает 8% в зависимости от содержания летучей золы. Изменения объема образцов до 500°C были незначительными и увеличились до 5 % при температурах обжига свыше 900°C. Значительный рост СЗ и МУ наблюдались свыше 900°C, что связано со спеканием.

Ил.6. Табл.3. Библиогр.24.

Проект FАTІН – внедрение интерактивного обучения в общеобразовательных школах Турции / Ашкын Суат // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2013. №2. С.64-68.

Рассматривается современный этап информатизации образования в Турции. Представлены цели и требования к результатам проекта FАTІН. Проанализированы особенности аппаратного программного и методического обеспечения процесса обучения в рамках проекта.

Ил.1. Библиогр.7.

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 ttf;

Файл должен содержать построчно:

На русском языке	УДК (в верхнем левом углу первого листа рукописи) НАЗВАНИЕ СТАТЬИ – прописными буквами Фамилия, имя, отчество Полное наименование организации (в скобках – сокращенное), почтовый адрес Должность (другие сведения, например, E-mail, телефон) Аннотация (1 абзац до 400 символов) под заголовком «АННОТАЦИЯ» Ключевые слова
На английском языке	НАЗВАНИЕ СТАТЬИ – прописными буквами Фамилия, инициалы Полное наименование организации, почтовый адрес Аннотация (1 абзац до 400 символов) под заголовком «Abstract» Ключевые слова (Key words)
На русском языке	Объем статьи ограничен темя уровнями: а) 12 страниц с числом иллюстраций до пяти (к этим статьям предъявляются повышенные требования); б) 6 страниц с числом иллюстраций 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 и встраиваемые коды: уплотнение интервалов, использование цветowych заливок, «красные строки», центрирование, табуляция, отступы, переносы в словах (делаемые автором), ссылки, гиперссылки, 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 рисунки, схемы, графики, таблицы должны иметь названия.

Все формулы должны быть созданы с использованием компонента Microsoft Equation, (MathType 4.0). Размер шрифта также 12 пикселей. Формула создается однократным запуском компонента Microsoft Equation (MathType 4.0). Запрещается создавать составные формулы! Небольшие строчные фрагменты типа ΔU_{ij} или $C^{(m)} = (c_{1m}, c_{1m}, \dots)^T$ следует набирать обычным способом в латинице, используя средства панели инструментов: изменение шрифта на курсив, написание верхних и нижних индексов, а также вставку символов. При этом следует обратить внимание на написание цифр, скобок, операторов и наименований функций (Δ , $\sin$, $\cos, \dots$) прямым шрифтом. Хорошее представление об оформлении математических текстов дает чтение научных журналов Российской академии наук физико-математического направления, классических учебников по физике и математике для высших учебных заведений.

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 по алфавиту, вначале следует приводить отечественные публикации, затем – иностранные. Список литературы приводится на отдельном листе с обязательным указанием следующих данных: для книг (монография, сборник и т.д.) – фамилия (после фамилии ставится запятая), инициалы автора, название книги, место издания (город), издательство, год издания; для журнальных статей – фамилия и инициалы автора, название статьи, название журнала, год издания, том, номер, выпуск, страницы (первая и последняя). **Обращаем Ваше внимание!** С 01.07.2004 введен новый стандарт ГОСТ 7.1-2003 «Библиографическая запись. Библиографическое описание. Общие требования и правила составления». Наиболее распространенные примеры:

1. Иванов, И.И. Название книги / И.И. Иванов. - М.: Наука, 2009. – 205 с.
2. Иванов, И.И. Название книги / И.И. Иванов, П.М. Петров, К.Л. Данилов. - М.: Наука, 2009. – 205 с.
3. Иванов, И.И. Название книги / И.И. Иванов [и др. (если 4 автора и более)]. - М.: Наука, 2009. – 205 с.
4. Название книги / И.И. Иванов [и др.], под ред. И.И. Иванова. - М.: Наука, 2009. – 205 с.
5. Иванов, И.И. Название статьи / И.И. Иванов, П.М. Петров, К.Л. Данилов // Название сборника. - М.: Механика, 2009. – С.51-59.
6. Иванов, И.И. Название статьи / И.И. Иванов, П.М. Петров, К.Л. Данилов // Название журнала. – 2009. - №2. - С.51-59.

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, Москва, ул. Радио, д.10-а, комн. 36. Тел. (495) 261-09-48