ISSN 2072-8387



МОСКОВСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
ОБЛАСТНОГО
УНИВЕРСИТЕТА

Серия

**Ф**изикаматематика

ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОДНОМЕРНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С ЧАСТОТОЙ СТОЛКНОВЕНИЙ, ПРОПОРЦИОНАЛЬНОЙ МОДУЛЮ СКОРОСТИ МОЛЕКУЛ

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ТЕЧЕНИЯ ПУАЗЕЙЛЯ

ПОСТУПАТЕЛЬНО НЕРАВНОВЕСНЫЙ ПИРОЛИЗ В СИЛЬНО ДИСПЕРГИРОВАННЫХ СМЕСЯХ ГАЗОВ

2014/ № 4

## РАЗДЕЛ I. МАТЕМАТИКА

УДК 517.9/98+533.72

#### А.В. Латышев

Московский государственный областной университет (МГОУ),

### ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОДНОМЕРНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С ЧАСТОТОЙ СТОЛКНОВЕНИЙ, ПРОПОРЦИОНАЛЬНОЙ МОДУЛЮ СКОРОСТИ МОЛЕКУЛ

Аннотаиия. Для одномерного линеаризованного кинетического уравнения с частотой столкновений молекул, пропорциональной модулю молекул, получены аналитические решения задач температурном скачке И слабом испарении (конденсации). Рассматриваются диффузные граничные условия. Найдены величины скачков температуры и концентрации. Построены распределения концентрации, массовой скорости температуры. Проделаны И необходимые численные расчеты и графические исследования. Ключевые слова: кинетическое уравнение, частота столкновений,

*Ключевые слова*: кинетическое уравнение, частота столкновений, граничные задачи, скачок температуры, скачок числовой плотности, аналитическое решение, распределение макропараметров..

#### A. Latyshev

Moscow State Regional University

# BOUNDARY PROBLEMS FOR THE ONE-DIMENSIONAL KINETIC EQUATION WITH THE FREQUENCY OF COLLISIONS PROPORTIONAL TO THE MODULE OF VELOCITY OF MOLECULES

Abstract. For the one-dimensional linear kinetic equation with collision frequency proportional to the module of molecular velocity, analytical solutions of problems on temperature jump and weak evaporation (condensation) are received. Diffusively boundary conditions are considered. Quantities of jumps of temperature and concentration are found. Distributions of concentration, mass velocity and temperature are constructed. Necessary numerical calculations and graphic researches are done.

*Keywords*: kinetic equation, frequency of collisions, boundary problems, temperature jump, jump of numerical density, analytical solution, distribution of macroparameters.

#### Введение

Настоящая работа является продолжением работ [1-3], посвященным исследованию граничных задач для одномерного кинетического уравнения с частотой столкновений молекул, аффинно зависящей от модуля их скорости.

В работе [1] было введено линейное одномерное кинетическое уравнение с интегралом столкновений БГК (Бхатнагар, Гросс и Крук) и частотой столкновений, аффинно зависящей от модуля скорости молекул. При этом были использованы законы сохраения числовой плотности (концентрации) молекул, импульса молекул и энергии.

В [1] была доказана теорема о структуре общего решения введенного уравнения.

В работе [2], являющейся продолжением [1], получены точные решения задачи о температурном скачке и слабом испарении (конденсации) в разреженном газе. Эти две задачи следуя [4] будем называть обобщенной задачей Смолуховского.

В работе [3] была решена обобщенная задача Смолуховского для частного случая аффинной зависимости частоты столкновений от модуля скорости молекул. А именно, был рассмотрен случай, когда частота столкновений постоянная.

В настоящей работе рассматривается другой предельный случай аффинной зависимости, когда частота столкновений пропорциональна модулю скорости молекул. На основе аналитического решения граничной задачи Смолуховского построена функция распределения газовых молекул. Найдены числовые значения коэффициентов скачка температуры и слабого испарения (конденсации). Построены распределения концентрации, массовой скорости и температуры в «полупространстве».

Остановимся на истории исключительно аналитических решений обобщенной задачи Смолуховского.

Для простого (одноатомного) разреженного газа с постоянной частотой столкновений молекул аналитическое решение обобщенной задачи Смолуховского получено в [5].

В [6] обобщенная задача Смолуховского была аналитически решена для простого разреженного газа с частотой столкновений молекул, линейно зависящей от модуля скорости молекул.

В [7] была аналитически решена задача о сильном испарении (конденсации) с постоянной частотой столкновений.

Отметим, что впервые задача о температурном скачке с частотой столкновений молекул, линейно зависящей от модуля скорости молекул, была аналитически решена Кесселем и Вильямсом в работе [8] в 1972 году.

Затем в работах [9, 10, 11] задача Смолуховского была обобщена на случай многоатомных (молекулярных) газов и получено аналитическое решение.

В работах [12, 13, 14] рассмотрена проблема, близкая к задаче о температурном скачке для электронов, о поведении квантового боза-газа при низких температурах. При этом было использовано кинетическое уравнение с возбуждением фононов согласно Н.Н. Боголюбову.

В работах [15, 16] была решена задача о температурном скачке для электронной вырожденной плазмы в металле.

В работе [17] аналитическое решение задачи Смолуховского было получено и для квантовых газов.

В работах Черчиньяни и Фрезотти [18] задача Смолуховского рассматривалась с использованием одномерного кинетического уравнения. Полное аналитическое решение задачи Смолуховского с использованием уравнения Черчиньяни—Фрезотти было получено в работе [19].

#### 1. Постановка задачи и основные уравнения

Приступим к постановке задачи Смолуховского для одномерного кинетического уравнения с частотой столкновений, аффинно зависящей от модуля скорости молекул.

Начнем с общей постановки. Пусть газ занимает полупространство x>0. Задана температура поверхности  $T_s$  и концентрация насыщенного пара поверхности  $n_s$ . Вдали от поверхности газ движется с некоторой скоростью u, являющейся скоростью испарения (или конденсации), и имеет градиент температуры

$$g_T = (\frac{d \ln T}{dx})_{x = +\infty}.$$

Необходимо определить скачки температуры и концентрации в зависимости от скорости и градиента температуры.

В задаче о слабом испарении требуется определить скачки температуры и концентрации в зависимости от скорости, считая градиент температуры равным нулю, а скорость испарения (конденсации) достаточно малой. Последнее означает, что  $u \ll v_T$ ,  $v_T$  — тепловая скорость молекул, имеющая порядок скорости звука,

$$v_T = \frac{\hat{1}}{\sqrt{\beta_s}}, \qquad \beta_s = \frac{m}{2k_B T_s},$$

m – масса молекулы,  $k_B$  – постоянная Больцмана.

В задаче о скачке температуры требуется определить скачки температуры и концентрации в зависимости от градиента температуры,

при этом скорость испарения (конденсации) считается равной нулю, а градиент температуры считается малым. Это означает, что

$$lg_{\mathrm{T}}\ll 1, \qquad l=\tau v_{T}, \qquad au=rac{1}{v_{0}},$$

где l – средняя длина свободного пробега газовых молекул,  $\tau$  – среднее время релаксации, т.е. время между двумя последовательными столкновениями молекул.

Объединим обе задачи – о слабом испарении (конденсации) и скачке температуры – в одну. Будем предполагать малость градиента температуры (т.е. малость относительного перепада температуры на длине свободного пробега) и малость скорости газа по сравнению со скоростью звука. В этом случае задача допускает линеаризацию и функцию распределения можно искать в виде

$$f(x, v) = f_0(v)(1 + h(x, v)),$$

где

$$f_0(v) = n_s (\frac{m}{2\pi k_B T_s})^{1/2} \exp[-\frac{mv^2}{2k_B T_s}]$$

есть абсолютный максвеллиан.

Перейдем к безразмерной скорости  $\mu = \sqrt{\beta} v = v/v_T$  и безразмерной координате

$$x' = v_0 \sqrt{\frac{m}{2k_B T_S}} x = \frac{x}{l}$$

Переменную x' будем снова обозначать через x. Возьмем кинетическое уравнение [1]

$$\mu \frac{\partial h}{\partial x} + (1 + \sqrt{\pi} a |\mu|) h(x, \mu) =$$

$$= (1 + \sqrt{\pi} a |\mu|) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu r^{2}} (1 + \sqrt{\pi} a |\mu'|) q(\mu, \mu', a) h(x, \mu') d\mu'.$$
(1.1)

Здесь  $q(\mu, \mu', a)$  – ядро уравнения,

$$q(\mu, \mu', a) = r_0(a) + r_1(a)\mu\mu' + r_2(a)(\mu^2 - \beta(a))(\mu'^2 - \beta(a)),$$

$$r_0(a) = \frac{1}{a+1}, \qquad r_1(a) = \frac{2}{2a+1}, \qquad r_2(a) = \frac{4(a+1)}{4a^2 + 7a + 2},$$

$$\beta = \beta(a) = \frac{2a+1}{2(a+1)}.$$

Выведем кинетическое уравнение в предельном случае, когда частота столкновений пропорциональна модулю молекулярной скорости. Вернемся к выражению частоты столкновений и перепишем его в виде:

$$\nu(\mu) = \nu_0 (1 + \sqrt{\pi} a |\mu|) = \nu_0 + \nu_1 |\mu|,$$

где  $v_1 = \sqrt{\pi}v_0 a$ . Устремим  $v_0$  к нулю. В этом пределе величина a стремится к  $+\infty$ , ибо  $a = v_1/\sqrt{\pi}v_0$ . Нетрудно видеть, что в этом пределе

$$\lim_{a\to+\infty}(1+\sqrt{\pi}a|\mu'|)q(\mu,\mu',a)=\sqrt{\pi}|\mu'|q_1(\mu,\mu'),$$

где

$$q_1(\mu, \mu') = 1 + \mu \mu' + (\mu^2 - 1)(\mu'^2 - 1).$$

Уравнение (1.1) при этом перепишется в виде:

$$\frac{\mu}{|\mu|} \frac{\partial h}{\partial x_1} + h(x_1, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu r^2} |\mu'| q_1(\mu, \mu') h(x_1, \mu) d\mu'. \tag{1.2}$$

В этом уравнении

$$x_1 = v_1 \sqrt{\beta_s} x = \frac{x}{l_1}, \qquad l_1 = v_T \tau_1, \qquad \tau_1 = \frac{1}{v_1}.$$

Это уравнение является одномерным кинетическим уравнением с частотой столкновений, пропорциональной модулю молекулярной скорости.

Далее будем решать обобщенную задачу Смолуховского для уравнения (1.2). Сначала требуется корректно сформулировать обобщенную задачу Смолуховского как граничную задачу математической физики.

## 2. Кинетическое уравнение с частотой столкновений, пропорциональной модулю скорости молекул, и постановка задачи

Прямолинейной подстановкой можно проверить, что кинетическое уравнение (1.2) имеет следующие четыре частных решения:

$$h_0(x,\mu) = 1$$
,  $h_1(x,\mu) = \mu$ ,  $h_2(x,\mu) = \mu^2$ ,  $h_3(x,\mu)$   
=  $(\mu^2 - \frac{3}{2})(x - sign \mu)$ .

Будем считать, что молекулы отражаются от стенки чисто диффузно, т.е. отражаются от стенки с максвелловским распределением по скоростям, т.е.

$$f(x,v) = f_0(v), \qquad v_x > 0.$$

Отсюда для функции  $h(x, \mu)$  получаем:

$$h(0,\mu) = 0, \quad \mu > 0.$$
 (2.1)

Условие (2.1) — это первое граничное условие к уравнению (1.2).

Асимптотическое распределение Чепмена—Энскога будем искать в виде линейной комбинации ее частных решений с неизвестными коэффициентами:

$$h_{as}(x,\mu) = A_0 + A_1\mu + A_2\left(\mu^2 - \frac{1}{2}\right) + A_3[(\mu^2 - \frac{3}{2})(x - sign \ \mu) - \frac{1}{\sqrt{\pi}}\mu].$$
(2.2)

Заметим, что в (2.2) скоростная мода ортогональна тепловой моде, т.е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} \mu [(\mu^2 - \frac{3}{2})(x - \text{sign } \mu) - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \mu] d\mu = 0.$$

Кроме того, постоянная мода ортогональна температурной моде:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} (\mu^2 - \frac{1}{2}) d\mu = 0.$$

Для определения четырех постоянных  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  воспользуемся определениями макропараметров газа: концентрации, массовой скорости, температуры и скачков температуры и концентрации (числовой плотности).

Рассмотрим распределение числовой плотности:

$$n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x,v)dv = \int_{-\infty}^{\infty} f_0(v)(1+h(x,v))dv = n_0 + \delta n(x).$$

Здесь

$$n_0 = \int_{-\infty}^{\infty} f_0(v) dv, \quad \delta n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_0(v) h(x, v) dv.$$

Отсюда находим, что

$$\frac{\delta n(x)}{n_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} h(x,\mu) d\mu.$$

Обозначим:

$$n_e = n_0 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} (1 + h_{as}(x = 0, \mu)) d\mu.$$

Отсюда получаем, что

$$\varepsilon_n \equiv \frac{n_e - n_0}{n_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} h_{as}(x = 0, \mu) d\mu.$$
(2.3)

Величина  $\varepsilon_n$  – есть искомая величина скачка концентрации.

Подставляя (2.2) в (2.3), находим, что

$$\varepsilon_n = A_0. \tag{2.4}$$

Из определения размерной скорости газа:

$$u(x) = \frac{1}{n(x)} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, v) v dv$$

получаем, что в линейном приближении безразмерная массовая скорость равна:

$$U(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} h(x, \mu) \mu d\mu.$$

Задавая «вдали от стенки» скорость испарения (конденсации), напишем

$$U = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} h_{as}(x,\mu) \mu d\mu.$$
 (2.5)

Подставляя в (2.5) распределение (2.2), получаем, что

$$U = \frac{\sqrt{\pi}}{2} A_1. \tag{2.6}$$

Рассмотрим распределение температуры:

$$T(x) = \frac{2}{kn(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{m}{2} (v - u_0(x))^2 f(x, v) dv.$$

Отсюда находим, что

$$\frac{\delta T(x)}{T_0} = -\frac{\delta n(x)}{n_0} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} h(x,\mu) \mu^2 d\mu =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} h(x,\mu) (\mu^2 - \frac{1}{2}) d\mu.$$

Отсюда следует, что при  $x \to +\infty$  асимптотическое распределение равно:

$$\frac{\delta T_{as}(x)}{T_0} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} h_{as}(x,\mu) (\mu^2 - \frac{1}{2}) d\mu.$$
 (2.7)

Задание градиента температуры вдали от стенки означает, что распределение температуры имеет вид:

$$T(x) = T_e + \left(\frac{dT}{dx}\right)_{x=+\infty} \cdot x = T_e + G_T x,$$

$$G_T = \left(\frac{dT}{dx}\right)_{+\infty}.$$

где

Это распределение представим в виде:

$$T(x) = T_s(\frac{T_e}{T_c} + g_T x) = T_s(1 + \frac{T_e - T_s}{T_c} + g_T x), \quad x \to +\infty,$$

где

$$g_T = (\frac{d\ln T}{dx})_{x=+\infty},$$

или

$$T(x) = T_s(1 + \varepsilon_T + g_T x), \qquad x \to +\infty, \tag{2.8}$$

где

$$\varepsilon_T = \frac{T_e - T_s}{T_s}$$

- искомая величина скачка температуры.

Из выражения (2.8) видно, что относительное изменение температуры вдали от стенки описывается линейной функцией

$$\frac{\delta T_{as}(x)}{T_s} = \frac{T(x) - T_s}{T_s} = \varepsilon_T + g_T x, \quad x \to +\infty.$$
 (2.9)

Подставляя (2.2) в (2.7), получаем, что

$$\frac{\delta T_{as}(x)}{T_s} = A_2 + A_3 x. {(2.10)}$$

Сравнивая (2.9) и (2.10), находим:

$$A_2 = \varepsilon_T$$
,  $A_3 = g_T$ .

Итак, асимптотическая функция распределения Чепмена—Энскога построена:

$$h_{as}(x,\mu) = \varepsilon_n + (2U - g_T) \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} + \\ + \varepsilon_T (\mu^2 - \frac{1}{2}) + g_T (\mu^2 - \frac{3}{2})(x - \text{sign } \mu).$$
 (2.11)

Теперь сформулируем второе граничное условие к уравнению (1.2):

$$h(x, \mu) = h_{as}(x, \mu) + o(1), \quad x \to +\infty.$$
 (2.12)

Теперь сформулируем основную граничную задачу — обобщенную задачу Смолуховского. Эта задача состоит в нахождении такого решениия кинетического уравнения (1.2), которое удовлетворяет граничным условиям (2.1) и (2.12), причем в (2.12) асимптотическая функция распределения Чепмена—Энскога  $h_{as}(x,\mu)$  определяется равенством (2.11).

#### 3. Общее решение одномерного кинетического уравнения

Заметим, что непрерывный спектр характеристического уравнения, отвечающего исходному уравнению (1.2), представляет собой пустое множество (см. [2] и [4]). Этот факт объясняется тем, что исходное уравнение (1.2) не содержит конвективной производной.

Поэтому решение исходного уравнения (1.2) будем искать в виде, полиномиальном по скоростной переменной. Мы ищем решение в виде линейной комбинации его инвариантов столкновений с неизвестными коэффициентами, зависящими от «пространственной» переменной:

$$h(x,\mu) = a_0(x) + a_1(x)\mu + a_2(x)(\mu^2 - 1) +$$

$$+ sign \ \mu[b_0(x) + b_1(x)\mu + b_2(x)(\mu^2 - 1)].$$
(3.1)

Подставим (3.1) в уравнение (1.2). Получим систему, состоящую из шести уравнений:

$$a_{0}, + b_{0}, + b_{0} = \frac{\sqrt{\pi}}{4}b_{1},$$

$$a_{0}, -b_{0}, + b_{0} = -\frac{\sqrt{\pi}}{4}b_{1},$$

$$a_{1}, +b_{1}, +b_{1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}b_{0} + \frac{\sqrt{\pi}}{4}b_{2},$$

$$-a_{1}, +b_{1}, -b_{1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}b_{0} + \frac{\sqrt{\pi}}{4}b_{2},$$

$$a_{2}, +b_{2}, +b_{2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4}b_{1},$$

$$-a_{2}, +b_{2}, -b_{2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4}b_{1}.$$

Складывая первое уравнение со вторым, третье с четвертым, пятое с шестым, а затем вычитая, упростим эту систему:

$$a_0(x) + b_0(x) = 0,$$
 (3.2)

$$b_{0}(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}b_1(x), \tag{3.3}$$

$$b_{1}(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}b_0(x) + \frac{\sqrt{\pi}}{4}b_2(x), \tag{3.4}$$

$$a_{1}(x) + b_{1}(x) = 0,$$
 (3.5)

$$b_{2}(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{4}b_{1}(x), \tag{3.6}$$

$$a_{2}(x) + b_{2}(x) = 0. (3.7)$$

Продифференцируем уравнение (3.4) и воспользуемся уравнениями (3.3) и (3.6). Получаем уравнение

$$b_{1\prime\prime}(x) = \frac{5\pi}{16}b_1(x),$$

откуда находим:

$$b_1(x) = B_1 e^{-\gamma_0 x}, (3.8)$$

где  $B_1$  – произвольная постоянная, и

$$\gamma_0 = \frac{\sqrt{5\pi}}{4} \approx 0.9908.$$

Из уравнений (3.6) и (3.3) с помощью (3.8) получаем:

$$b_2(x) = -\frac{2}{\sqrt{5}}B_1e^{-\gamma_0 x} + B_2, (3.9)$$

$$b_0(x) = -\frac{2}{\sqrt{5}}B_1e^{-\gamma_0 x} + B_0, (3.10)$$

где  $B_0$  и  $B_2$  – произвольные постоянные.

Из уравнения (3.5) с помощью (3.8) находим:

$$a_1(x) = -\frac{1}{\gamma_0} B_1 e^{-\gamma_0 x} + A_1, \tag{3.11}$$

где  $A_1$  — произвольная постоянная.

Из уравнения (3.2) с помощью (3.11) находим:

$$a_0(x) = -\frac{8}{5\sqrt{\pi}}B_1e^{-\gamma_0x} - B_0x + A_0, (3.12)$$

где  $A_0$  — произвольная постоянная.

Наконец, из уравнения (3.7) с помощью (3.9) находим:

$$a_2(x) = -\frac{8}{5\sqrt{\pi}}B_1e^{-\gamma_0x} - B_2x + A_2,$$
(3.13)

где  $A_2$  — произвольная постоянная.

Выпишем на основании равенств (3.8)–(3.13) общее решение уравнения (1.2) в явном виде:

$$\begin{split} h(x,\mu) &= -\frac{2}{\sqrt{5}} B_1 e^{-\gamma_0 x} - B_0 x + A_0 + \mu [-\frac{1}{\gamma_0} B_1 e^{-\gamma_0 x} + A_1] + \\ &+ (\mu^2 - 1) [-\frac{8}{5\sqrt{\pi}} B_1 e^{-\gamma_0 x} - B_2 x + A_2] + sign \ \mu \{-\frac{2}{\sqrt{5}} B_1 e^{-\gamma_0 x} \\ &+ B_0 + \\ &+ \mu B_1 e^{-\gamma_0 x} + (\mu^2 - 1) [-\frac{2}{\sqrt{5}} B_1 e^{-\gamma_0 x} + B_2] \}. \end{split} \tag{3.14}$$

Выделим в этом решении (3.14) экспоненциально убывающее и полиномиальное решения:

$$h(x,\mu) = B_1 e^{-\gamma_0 x} \left(\mu - \frac{\sqrt{\pi}}{2\gamma_0} \mu^2\right) \left(\frac{1}{\gamma_0} + sign \ \mu\right) + A_0 + A_1 \mu + A_2 (\mu^2 - 1) + (sign \ \mu - x) [B_0 + B_2 (\mu^2 - 1)].$$
(3.15)

#### 4. Решение обобщенной задачи Смолуховского

В этом п. докажем теорему об аналитическом решении основной граничной задачи (1.2), (2.1) и (2.11).

**TEOPEMA.** Граничная задача (1.2), (2.1) и (2.11) имеет единственное решение, представимое в виде суммы экспоненциально убывающего и полиномиального решений

$$h(x,\mu) = -(2U - g_T) \frac{e^{-\gamma_0 x}}{\sqrt{\pi}} \frac{1 + \gamma_0 \operatorname{sign} \mu}{1 + \gamma_0} (\mu - \frac{\sqrt{\pi}}{2\gamma_0} \mu^2) + \\ + \varepsilon_n + \varepsilon_T + (2U - g_T) \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} + (\mu^2 - \frac{3}{2}) [\varepsilon_T + g_T (x - \operatorname{sign} \mu)],$$
(4.1)

причем величины скачка температуры  $\varepsilon_T$  и скачка концентрации  $\varepsilon_n$  даются равенствами:

$$\varepsilon_T = (1 + \frac{1}{2\gamma_0})g_T - \frac{1}{2\gamma_0}(2U),$$
 (4.2)

и

$$\varepsilon_n = -(1 - \frac{1}{4\gamma_0})g_T - \frac{1}{4\gamma_0}(2U). \tag{4.3}$$

Решение (4.1) содержит решения двух задач — задачи о температурном скачке (когда U=0) (см. рис. 1)

$$\frac{h^{T}(x,\mu)}{g_{T}} = \frac{e^{-\gamma_{0}x}}{\sqrt{\pi}} \frac{1 + \gamma_{0} sign \ \mu}{1 + \gamma_{0}} (\mu - \frac{2\mu^{2}}{\sqrt{5}}) - (1 - \frac{1}{4\gamma_{0}}) - \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} + (1 + \frac{1}{\gamma_{0}})(\mu^{2} - \frac{1}{2}) + (x - sign \ \mu)(\mu^{2} - \frac{3}{2}),$$

и задачи о слабом испарении (когда  $g_T = 0$ ) (см. рис. 2)

$$\frac{h^{U}(x,\mu)}{2U} = -\frac{e^{-\gamma_0 x}}{\sqrt{\pi}} \frac{1 + \gamma_0 sign \ \mu}{1 + \gamma_0} (\mu - \frac{2\mu^2}{\sqrt{5}}) + \frac{1}{4\gamma_0} + \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} - \frac{\mu^2}{2\gamma_0}.$$

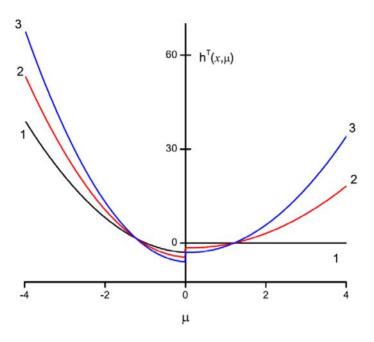


Рис.1. Функция распределния в задаче о температурном скачке. Кривые 1, 2, 3, отвечают значениям x=0,1,2.

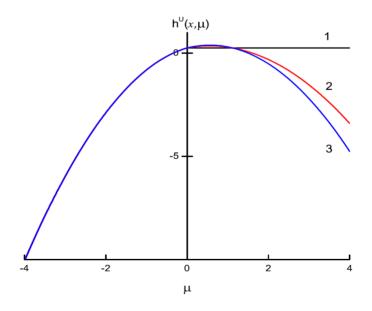


Рис. 2. Функция распределения в задаче о слабом испарении. Кривые 1,2,3 отвечают значениям x =0, 1, 2.

**ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.** Воспользуемся граничным условием «вдали от стенки» (2.12). Подставим в условие (2.12) разложение (3.15). Получаем следующее уравнение

$$A_0 + A_1 \mu + A_2 (\mu^2 - 1) - (x - sign \ \mu) [B_0 + B_2 (\mu^2 - 1)] =$$

$$= \varepsilon_n + (2U - g_T) \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} + \varepsilon_T (\mu^2 - \frac{1}{2}) + g_T (\mu^2 - \frac{3}{2}) (x - sign \ \mu).$$

Отсюда сразу находим:

$$A_1 = \frac{2U}{\sqrt{\pi}} - \frac{g_T}{\sqrt{\pi}}, \quad B_2 = -g_T, \quad B_0 = \frac{g_T}{2}, \quad A_2 = \varepsilon_T, \quad A_0 = \varepsilon_n + \frac{\varepsilon_T}{2}.$$

Воспользуемся граничным условием отражением молекул от стенки. Подставим разложение (3.15) в граничное условие (2.1). Получаем алгебраическое уравнение

$$\begin{split} B_1(\mu - \frac{2}{\sqrt{5}}\mu^2)(\frac{1}{\gamma_0} + 1) + \varepsilon_n + \\ + \frac{2U - g_T}{\sqrt{\pi}}\mu + \varepsilon_T(\mu^2 - \frac{1}{2}) - g_T(\mu^2 - \frac{3}{2}) = 0. \end{split}$$

Отсюда получаем систему из трех уравнений

$$\varepsilon_n - \frac{\varepsilon_T}{2} + \frac{3}{2}g_T = 0,$$

$$B_1(1 + \frac{1}{\gamma_0}) + (2U - g_T)\frac{1}{\sqrt{\pi}} = 0,$$

$$-B_1\frac{2}{\sqrt{5}}(1 + \frac{1}{\gamma_0}) + \varepsilon_T - g_T = 0.$$

Из этих уравнений находим постоянную 
$$B_1$$
 
$$B_1 = -\frac{2U - g_T}{\sqrt{\pi}(1+1/\gamma_0)},$$

а также величины скачков температуры и концентрации:

$$\varepsilon_T = (1 + \frac{1}{2\gamma_0})g_T - \frac{1}{2\gamma_0}(2U),$$
 (4.4)

$$\varepsilon_n = -(1 - \frac{1}{4\gamma_0})g_T - \frac{1}{4\gamma_0}(2U). \tag{4.5}$$

Формулы (4.4) и (4.5) в точности совпадают с формулами скачков температуры и концентрации (4.2) и (4.3).

Таким образом, решение граничной задачи построено и имеет следующий вид:

$$h(x,\mu) = -\frac{(2U - g_T)e^{-\gamma_0 x}}{\sqrt{\pi}(1 + \frac{1}{\gamma_0})} (\mu - \frac{2\mu^2}{\sqrt{5}})(sign \ \mu + \frac{1}{\gamma_0}) + \\ +\varepsilon_n + (2U - g_T)\frac{\mu}{\sqrt{\pi}} + \varepsilon_T(\mu^2 - \frac{1}{2}) + (x - sign \ \mu)(\mu^2 - \frac{3}{2})g_T.$$
(4.6)

Разложение (4.6) в точности совпадает с разложением (4.1), если учесть выражения (4.2) и (4.3) для величины скачков температуры и концентрации. Теорема доказана.

Заметим, что полиномиальный «хвост» решения (4.1) является асимптотическим разложением Чепмена—Энскога. Это значит, что решение (4.1) можно представить в виде:

$$h(x,\mu) = -\frac{(2U - g_T)e^{-\gamma_0 x}}{\sqrt{\pi}(1 + \frac{1}{\gamma_0})}h^*(\mu) + h_{as}(x,\mu),$$

где

$$h^*(\mu) = (\mu - \frac{2\mu^2}{\sqrt{5}})(sign \ \mu + \frac{1}{\gamma_0}).$$

Преобразуем разложение Чепмена—Энскога:

$$h_{as}(x,\mu) = \varepsilon_n + (2U - g_T)\frac{\mu}{\sqrt{\pi}} + \varepsilon_T(\mu^2 - \frac{1}{2}) + g_T(\mu^2 - \frac{3}{2})(x - \text{sign } \mu)$$

с помощью равенств для скачка температуры и скачка концентрации. В результате получаем, что

$$h_{as}(x,\mu) = g_T \left[ -\left(1 - \frac{1}{4\gamma_0}\right) - \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} + \left(1 + \frac{1}{2\gamma_0}\right) \left(\mu^2 - \frac{1}{2}\right) + (x - sign \ \mu) \left(\mu^2 - \frac{3}{2}\right) \right] + (2U) \left[\frac{1}{4\gamma_0} + \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} - \frac{\mu^2}{2\gamma_0}\right]$$

$$(4.7)$$

Таким образом, окончательно функция распределения в обобщенной задаче Смолуховского равна:

$$h(x,\mu) = -\frac{e^{-\gamma_0 x}}{\sqrt{\pi}} (2U - g_T)(\mu - \frac{2\mu^2}{\sqrt{5}}) \frac{1 + \gamma_0 sign \ \mu}{1 + \gamma_0} + h_{as}(x,\mu), \tag{4.8}$$

причем разложение Чемпен—Энскога  $h_{as}(x,\mu)$  определяется равенством (4.7). Разложение (4.8) в точности совпадает с разложением (4.1).

**ЗАМЕЧАНИЕ 4.1.** Выражение (4.8) содержит функцию распределения отраженных от стенки молекул:

$$\begin{split} h^{+}(x,\mu) &= -\frac{e^{-\gamma_{0}x}}{\sqrt{\pi}}(2U - g_{T})(\mu - \frac{2\mu^{2}}{\sqrt{5}}) + \\ &+ \varepsilon_{n} + \varepsilon_{T} + \frac{2U - g_{T}}{\sqrt{\pi}}\mu + (\mu^{2} - \frac{3}{2})[\varepsilon_{T} + g_{T}(x - 1)], \end{split}$$

а также функцию распределения летящих к стенке молекул, которая выражается распределением Чепмена—Энскога:

$$h^{-}(x,\mu) = -\frac{e^{-\gamma_0 x}}{\sqrt{\pi}} (2U - g_T) \frac{1 - \gamma_0}{1 + \gamma_0} (\mu - \frac{2\mu^2}{\sqrt{5}}) + \\ + \varepsilon_n + \varepsilon_T + \frac{2U - g_T}{\sqrt{\pi}} \mu + (\mu^2 - \frac{3}{2}) [\varepsilon_T + g_T(x+1)].$$

**ЗАМЕЧАНИЕ 4.2.** Разложение (4.1) содержит решения двух задач — задачи о температурном скачке

$$\frac{h^{T}(x,\mu)}{g_T} = e^{-\gamma_0 x} h^*(\mu) + h_{as}^T(x,\mu)$$

и решение задачи о слабом испарении

$$\frac{h^{U}(x,\mu)}{g_{T}} = -e^{-\gamma_{0}x}h^{*}(\mu) + h_{as}^{U}(x,\mu).$$

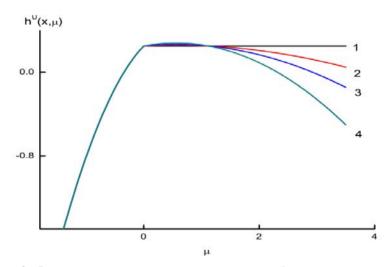


Рис.3. Функция распределения в задаче о слабом испарении. Кривые 1, 2, 3, 4 отвечают значениям x = 0; 0,05; 0,1; 0,2.

В этих равенствах введены обозначения

$$h^*(\mu) = (\mu - \frac{2\mu^2}{\sqrt{5}}) \frac{1 + \gamma_0 sign \ \mu}{\sqrt{\pi} (1 + \gamma_0)},$$

$$h^T_{as}(x, \mu) = -(1 - \frac{1}{4\gamma_0}) - \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} + (1 + \frac{1}{2\gamma_0})(\mu^2 - \frac{1}{2}) + (x - sign \ \mu)(\mu^2 - \frac{3}{2}),$$

$$h^U_{as}(x, \mu) = \frac{1}{4\gamma_0} + \frac{\mu}{\sqrt{\pi}} - \frac{\mu^2}{2\gamma_0}.$$

**ЗАМЕЧАНИЕ 4.3.** Из приведенных выше равенств видно, что функция распределения в задаче о температурном скачке является разрывной в точке  $\mu=0$ , а функция распределения в задаче о слабом испарении является непрерывной на всей действительной оси, в том числе и в точке  $\mu=0$ .

Величина скачка функции распределения отраженных от стенки и летящих к стенке молекул в точке  $\mu = 0$  равна:

$$h_{+}^{T}(x,+0) - h_{-}^{T}(x,-0) = 3g_{T}.$$

**ЗАМЕЧАНИЕ 4.4.** Заметим, что в задаче о слабом испарении функцию распределения можно преобразовать к следующему виду:

$$\frac{h^{U}(x,\mu)}{2U} = \frac{1}{4\gamma_0} + \frac{1}{\sqrt{\pi}}(\mu - \frac{2\mu^2}{\sqrt{5}})\left[1 - \frac{1 + \gamma_0 \operatorname{sign} \mu}{1 + \gamma_0}e^{-\gamma_0 x}\right].$$

Из этой формулы, в частности, вытекает, что на границе x = 0 функция распределения отраженных молекул постоянна (см. рис. 2):

$$\frac{h_+^U(0,\mu)}{2U} = \frac{1}{4\gamma_0}, \qquad \mu > 0.$$

### 5. Температурный скачок и слабое испарение (конденсация). Распределение макропараметров газа

Численные расчеты коэффициентов скачка температуры и концентрации приводят к следующим результатам:

$$\varepsilon_T = 1.5046g_T - 0.5046(2U), \quad \varepsilon_n = -0.7477g_T - 0.2523(2U).$$

Для сравнения приведем коэффициенты скачка температуры и скачка концентрации, найденные с помощью одномерного кинетического уравнения с постоянной частотой столкновений [4]:

$$\varepsilon_T = 1.3068g_T - 0.4443(2U), \quad \varepsilon_n = -3.3207g_T - 0.8958(2U).$$

Рассмотрим распределение концентрации, массовой скорости и температуры в зависимости от координаты x.

Начнем с распределения концентрации (числовой плотности). По определению получаем:

$$\frac{\delta n(x)}{n_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} h(x,\mu) d\mu = -g_T N_T(x) - (2U) N_U(x),$$

где

$$N_T(x) = 0.7477 + x - 0.0317e^{-\gamma_0 x}, \quad N_U(x) = 0.2523 + 0.0317e^{-\gamma_0 x}.$$

Распределение массовой скорости при x > 0 тривиально:  $U(x) \equiv U$ . В самом деле, воспользовавшись решением (4.1), нетрудно проверить, что

$$U(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} \mu h(x, \mu) d\mu \equiv U.$$

Рассмотрим распределение температуры. По определению получаем:

$$\frac{\delta T(x)}{T_0} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mu^2} (\mu^2 - \frac{1}{2}) h(x, \mu) d\mu = T_T(x) g_T - T_U(x) (2U),$$

где

$$T_T(x) = 1.5046 + x + 0.0639e^{-\gamma_0 x}, T_{II}(x) = 0.5046 + 0.0639e^{-\gamma_0 x}.$$

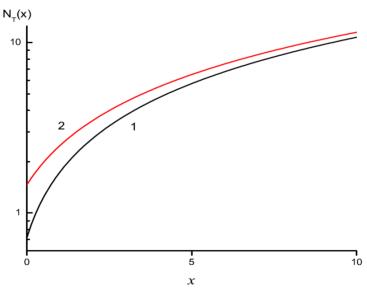


Рис.4. Поведение кинетического коэффициента  $N_T(x)$  (кривая 1), кривая 2 - это асимптоттика  $N_{Tas}(x) = 0,7477 + x$ .

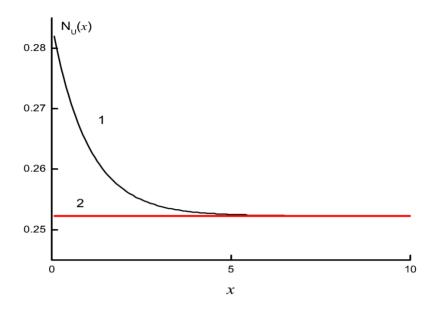


Рис. 5. Поведение кинетического коэффициента  $N_U(x)$  (кривая 1), кривая 2 - это асимптоттика  $N_{Uas}(x)=0,2523$ .

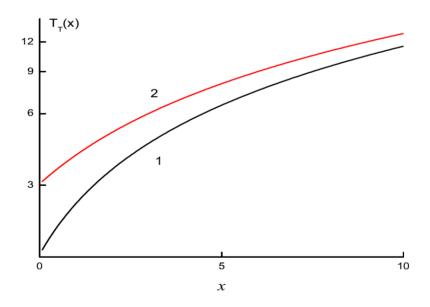


Рис. 6. Поведение кинетического коэффициента  $T_T(x)$  (кривая 1), кривая 2 - это асимптоттика  $T_{Tas}(x) = 1,5046 + x$ .

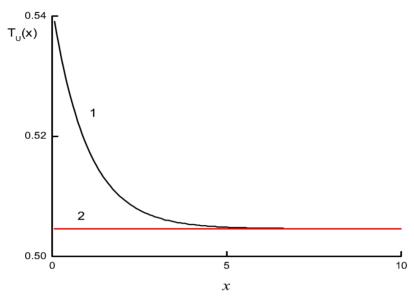


Рис. 7. Поведение кинетического коэффициента  $T_U(x)$  (кривая 1), кривая 2 - это асимптоттика  $T_{Uas}(x) = 0,5046$ .

#### 6. Заключение

В настоящей работе рассматривается аналитическое решение граничных задач для одномерного кинетического уравнения с частотой столкновений молекул, пропорциональной модулю скорости молекул. Это уравнение является предельным случаем аффинной зависимости частоты столкновений молекул от модуля их скорости.

Рассматривается решение обобщенной задачи Смолуховского – задачи о температурном скачке и слабом испарении (конденсации).

Выведены формулы для вычисления скачка температуры и скачка концентрации. В явном виде получена функция распределения газовых молекул, а также распределения концентрации и температуры в полупространстве x>0.

Оказалось, что функция распределения в задаче о слабом испарении является непрерывной при всех скоростях молекул. Проделаны все необходимые численные расчеты. Проведено графическое исследование функции распределения отраженных и летящих к стенке молекул, а также всех кинетических коэффициентов.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. ЛатышевА.В., Бугримов А.Л., ЮшкановА.А. Кинетическое одномерноеуравнение счастотойстолкновений, аффинно зависящейот модуля скорости молекул//Вестник Московского государственного областного университета. Серия «Физикаматематика». 2014. № 1, с. 3-15.
- 2. БугримовА.Л., ЛатышевА.В., Юшканов А.А. Граничные задачи дляодномерного уравнения с частотой столкновений, аффиннозависящейот модуля скорости молекул// Вестник Московского государственного областного университета. Серия «Физика- математика». 2014. № 2, с. 3-20.
- 3. Латышев А.В., Юшканов А.А. Граничные задачи для одномерного кинетическог о уравнения с постоянной частотой столкновений// Вестник Московского государственного областного университета. Серия «Физика-математика». 2014. № 3, с. 3-22.
- 4. LatyshevA.V., Yushkanov A.A. Kinetic equations type Williams and their exact solutions. Monograph. M.: MGOU (MoscowState Regional University), 2004, 271 p.[russian].
- 5. Latyshev A.V. Application of case' method to the solution of linear kinetic BGK equation in a problem about temperature jump// Appl. math. and mech. 1990. V. 54. Is. 4. P. 581–586. [russian].
- 6. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Boundary problems for model Boltzmann equation with frequency proportional to velocity of moleculs// Izvestiya Russian Academy of Science. Ser. Mechanika, Fluid and Gas (Russian "Fluids Dynamics"). 1996. № 3. 140-153 pp. [russian].
- 7. Dolgosheina E.B, Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Analytical solution of the problem about strong evaporation (condensation)// Izvestiya Russian Academy of Science. Ser. Mechanika, Fluid and Gas (Russian "Fluids Dynamics"). 1993. № 6. 143-155 pp. [russian].
- 8. Cassell J.S., Williams M.M.R. An exact solution of the temperature slip problem in rarefied gases// Transport Theory and Statist. Physics, 2(1), 81–90 (1972).
- 9. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Temperature jump and weak evaporatuion in molecular gases// J. of experim. and theor. physics. 1998. V. 114. Issue. 3(9). P. 956–971. [russian].
- 10. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. The Smoluchowski problem in polyatomic gases// Letters in J. of Tech. Phys. 1998. V. 24. 17. P. 85–90. [russian].
- 11. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Analytic solutions of boundary value problem for model kinetic equatins// Math. Models of Non-Linear Excitations, Transfer, Dynamics, and control in condensed Systems and Other Media. Edited by L.A. Uvarova and A.V. Latyshev. Kluwer Academic. New York–Moscow. 2001. P. 17–24.

- 12. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Smolukhowski problem for degenerate Bose gases// Theoretical and Mathematical Physics. Springer New York. Vol. 155, 3,June, 2008, pp. 936 948.
- 13. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Temperature jump in degenerate quantum gases in the presence of the Bose–Einstein condensate // Theor. Math. Phys. 2010. V. 162(1). P. 95–105 [russian].
- 14. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Temperature jump in degenerate quantum gases with the Bogoliubov excitation energy and in the presence of the Bose–Einstein condensate, Theor. Math. Phys., 165:1 (2010), 1358–1370
- 15. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Smoluchowski problem for electrons in metal// Theor. Math. Phys. 2005, january, V. 142. 1. C. 93–111. [russian].
- 16. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Smoluchowski problem for metals with mirror-diffusive boundary conditions //Theor. and Math. Phys. October 2009, Volume 161, Is. 1, pp. 1403-1414.
- 17. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Boundary value problems for quantum gases. Monograph M.: MGOU, 2012, 266 p.[russian].
- 18. Cercignani C., Frezzoti A. Linearized analysis of a one-speed B.G.K. model in the case of strong condensation// Bulgarian Academy of sci. theor. appl. mech. Sofia. 1988. V.XIX. 3. 19-23 P.
- 19. Latyshev A.V., Yushkanov A.A. Analytical solution of one-dimensional problem about moderate strong evaporation (and condensation) in half-space// Appl. mech. and tech. physics. 1993. 1. 102-109 p. [russian].

## РАЗДЕЛ II. ФИЗИКА

УДК: 572.33+519.634

#### Е.А. Бедрикова, А.В. Латышев

Московский государственный областной университет

#### ЗАДАЧА КУЭТТА ДЛЯ БОЗЕ-ГАЗА

Аннотация. Построено решение задачи Куэтта в плоском канале. В качестве основного уравнения используется модель Бхатнагара—Гросса—Крука (БГК) с почти зеркальными граничными условиями. Найдена функция распределения молекул газа и вычислены макропараметры газа. Сделан предельный переход к классическим газам, показывающий полное совпадение полученных результатов с известными результатами для классических газов. Проведен анализ макропараметров газа.

*Ключевые слова:* бозе-газ, задача Куэтта, течение Куэтта, течение газа в канале.

#### E. Bedrikova, A. Latyshev Moscow State Regional University

COUETTE PROBLEM FOR BOSE GAS

Abstract. The solution of Couette problem in the flat channel is constructed. As the main equation the model of Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) with almost specular boundary conditions is used. Function of distribution of molecules of gas is found and gas macroparameters are calculated. Limit transition to classical gases is made which shows full coincidence of the received results to known results for classical gases. Gas macroparameters are analysed.

*Keywords:* Bose gas, Couette problem, Couette flowing, flowing of gas in the channel.

#### **ВВЕДЕНИЕ**

В настоящее время течение Куэтта в плоском канале с бесконечными параллельными стенками достаточно подробно исследовано при помощи численных методов [1-5]. Задача Куэтта аналитическими методами исследована в работах [6-7]. Данные работы посвящены классическим газам. При описании движения газа в канале рассматриваются как правило чисто диффузные граничные условия, поскольку техника нахождения

аналитического решения, применимая для полупространственных задач, в данном случае не может быть применена. Целью настоящей работы является продолжение работ [6-7] и построение математической модели течения Куэтта на основе БГК (Бхатнагар–Гросс–Крук) модели кинетического уравнения Больцмана для квантовых газов, а именно для бозегаза. В качестве граничных условий рассматривается почти зеркальные граничные условия при малых коэффициентов аккомодации.

#### 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим бозе-газ, который движется в плоском канале с бесконечными параллельными стенками. Толщина канала 2d (|x| < d), стенки канала движутся в своих плоскостях в противоположных направлениях со скоростями U и -U. Введем декартову систему координат с центром в середине канала. Ось x проведем перпендикулярно плоскостям стенок канала. Ось z направим вдоль направления движения стенок канала.

Рассмотрим обобщение кинетического уравнения квантового бозе-газа:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla f) = \mathbf{v}(f_{eq} - f), \qquad (1.1)$$

функция  $f_{\it eq}$  - локально – равновесная функция Бозе,

$$f_{eq} = \frac{1}{-1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_* - \mu}{kT}\right)}, \quad \varepsilon_* = \frac{m}{2}(v - u)^2, \quad -\infty < \mu < 0.$$

3десь  $\mu$  – химический потенциал молекул.

Будем считать, что движение носит стационарный характер. Рассмотрим случай, когда скорость движения стенок канала много меньше скорости звука в газе. В этих условиях задача допускает линеаризацию. Линеаризуем задачу относительно равновесной функции распределения бозе-газа  $f_{\it B}$ 

$$f_B = \frac{1}{-1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right)}, \quad \varepsilon = \frac{m \, v^2}{2}, \quad -\infty < \mu < 0.$$

Получаем следующее выражение:

$$f_{eq} = f_B(\mathbf{v}) + g_B(\mathbf{v}) \frac{m v_z}{kT} u_z, \tag{1.2}$$

где 
$$f_B(\mathbf{v}) = \frac{1}{-1 + \exp\left(\frac{m\,\mathbf{v}^2}{2kT} - \frac{\mu}{kT}\right)}, \quad g_B(\mathbf{v}) = \frac{\exp\left(\frac{m\,\mathbf{v}^2}{2kT} - \frac{\mu}{kT}\right)}{\left[-1 + \exp\left(\frac{m\,\mathbf{v}^2}{2kT} - \frac{\mu}{kT}\right)\right]^2}.$$

Введем безразмерную скорость  $\tilde{N}=\sqrt{\beta}$  v ,  $\beta=\frac{m}{2kT}$  , безразмерный химический потенциал  $\alpha=\frac{\mu}{kT}$  и безразмерную координату  $x_1=xv\sqrt{\beta}$  . В этих переменных выражение (1.2) записывается так:

$$f_{eq} = f_B(C) + 2g_B(C)C_zU_z(x),$$
 (1.3)

при этом  $U_z(x) = \sqrt{\beta u_z}$  – безразмерная массовая скорость,

$$f_B(C) = \frac{1}{-1 + \exp(\tilde{N}^2 - \alpha)}, \quad g_B(C) = \frac{\exp(\tilde{N}^2 - \alpha)}{\left[-1 + \exp(\tilde{N}^2 - \alpha)\right]^2}$$

Согласно формуле (1.3) функцию распределения будем искать в ви-де:

$$f = f(x,C) = f_B(C) + g_B(C)C_z h(x,C_x).$$
 (1.4)

С помощью (1.3) и (1.4) и учитывая переход к безразмерной координате уравнение (1.1) записывается в виде:

$$C_x \frac{\partial h}{\partial x_1} = 2U_z(x_1) - h(x_1, C_x). \tag{1.5}$$

Массовая скорость газа находится из закона сохранения импульса и проводя соответствующие преобразования [8], получаем следующую формулу:

$$U_z(x_1) = \frac{1}{4l_0(\alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} \ln|1 - \exp(\alpha - C_x^2)| h(x_1, C_x) dC_x, \qquad (1.6)$$

где 
$$l_0(\alpha) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left| 1 - \exp(\alpha - C^2) \right| dC$$
.

С учетом (1.6) уравнение (1.5) принимает вид:

$$\mu \frac{\partial h}{\partial x_1} + h(x_1, \mu) = \frac{1}{2l_0(\alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} \ln|\exp(\alpha - \mu'^2) - 1| h(x_1, \mu') d\mu', \quad \mu = C_x$$
 (1.7)

Введем функцию  $K_B(\mu, \alpha)$ , которая является ядром уравнения (1.7) и имеет вид:

$$K_{B}(\mu,\alpha) = \frac{\ln(1 - \exp(\alpha - \mu^{2}))}{2l_{0}(\alpha)} = \frac{\ln(1 - \exp(\alpha - \mu^{2}))}{\int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 - \exp(\alpha - \tau^{2}))d\tau}, \ \mu = C_{x}$$
(1.8)

Эта функция обладает свойством:

$$\int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu, \alpha) \equiv 1, \ \forall \alpha \in (-\infty, +\infty).$$

Массовая скорость согласно (1.8) и (1.7) равна:

$$U_z(x_1) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu', \alpha) h(x_1, \mu') d\mu'.$$
 (1.9)

Таким образом, согласно (1.9) уравнение (1.7) можно представить в стандартном виде:

$$\mu \frac{\partial h}{\partial x_1} + h(x_1, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu', \alpha) h(x_1, \mu') d\mu'. \tag{1.10}$$

Рассмотрим почти зеркальные граничные условия на поверхности канала с коэффициентами зеркальности  $q_1$  и  $q_2$   $(0 \le q_i \le 1, i = 1,2)$ 

$$h(-d, \mu) = (1 - q_1)h(-d, -\mu) - 2q_1U_z(x), \quad \mu > 0,$$
 (1.11)

$$h(d, \mu) = (1 - q_2)h(d, -\mu) + 2q_2U_z(x), \quad \mu < 0.$$
 (1.12)

#### 2. РЕШЕНИЕ ЗАЛАЧИ

Решение уравнения (1.10) будем искать в виде:

$$h_{\eta}(x,\mu) = \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) \Phi(\eta,\mu)$$

где  $\eta$  - спектральный параметр, или параметр разделения.

Разделение переменных сводит уравнение (1.10) к характеристическому уравнению:

$$\Phi(\eta, \mu)(\eta - \mu) = \eta n(\eta). \tag{2.1}$$

с нормировочным условием:

$$n(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu, \alpha) \Phi(\eta, \mu) d\mu \equiv 1.$$

Будем решать уравнение (2.1) в классе обобщенных функций, тогда:

$$\Phi(\eta, \mu) = \eta P \frac{1}{\eta - \mu} + \frac{\lambda(\eta, \alpha)}{K_B(\eta, \alpha)} \delta(\eta - \mu). \tag{2.2}$$

Решение задачи (1.10), (1.11) и (1.12) будем искать в виде разложения по собственным функциям характеристического уравнения

$$h(x,\mu) = a_0 + a_1(x-\mu) + \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) \Phi(\eta,\mu) A(\eta) d\eta, \qquad (2.3)$$

где  $A(\eta)$ - неизвестная функция (коэффициент непрерывного спектра), а  $a_0, a_1$ - неизвестные коэффициенты дискретного спектра.

Обозначим  $h_0(x,\mu) = a_0 + a_1(x-\mu)$  - часть решения, которая отвеча-

ет дискретному спектру, 
$$h_c(x,\mu)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\biggl(-\frac{x}{\eta}\biggr)\Phi(\eta,\mu)A(\eta)d\eta$$
 - часть ре-

шения отвечающая, непрерывному спектру.

Найдем коэффициенты дискретного и непрерывного спектров. Для этого подставим общее решение (2.3) взятое в виде:

$$h(x, \mu) = h_0(x, \mu) + h_c(x, \mu) \tag{2.4}$$

в граничные условия (1.11) и (1.12). Будем иметь:

$$h_0(-d,\mu) + h_c(-d,\mu) = (1-q_1)[h_0(-d,-\mu) + h_c(-d,-\mu)] - 2q_1U_z, \quad (2.5)$$

$$h_0(d,\mu) + h_c(d,\mu) = (1-q_2)[h_0(d,-\mu) + h_c(d,-\mu)] + 2q_2U_z$$
. (2.6)

Заметим, что

$$h_0(x,\mu) - h_0(x,-\mu) = a_0 + a_1(x-\mu) - a_0 - a_1(x+\mu) = -2a_1\mu$$
,

где 
$$b(\eta, x) = \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) A(\eta) - \exp\left(\frac{x}{\eta}\right) A(-\eta)$$
.

Следовательно, граничные условия (2.5) и (2.6) приводятся к системе интегральных уравнений:

$$\int_{-\infty}^{\infty} b(\eta, -d) \Phi(\eta, \mu) d\eta - q_1 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{d}{\eta}\right) \Phi(\eta, \mu) A(-\eta) d\eta = 
= a_1 \mu (2 - q_1) - q_1 (a_0 - a_1 d + 2U_z), \ \mu > 0, 
\int_{-\infty}^{\infty} b(\eta, d) \Phi(\eta, \mu) d\eta - q_2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{d}{\eta}\right) \Phi(\eta, \mu) A(-\eta) d\eta = 
= a_1 \mu (2 - q_2) - q_2 (a_0 + a_1 d - 2U_z), \ \mu < 0.$$
(2.8)

Предположим, что величины  $q_1$  и  $q_2$  малы, т.е.  $q_1 <<1$  и  $q_2 <<1$ . Тогда вторыми интегралами в уравнениях (2.7) и (2.8) можно пренебречь

$$\int_{-\infty}^{\infty} b(\eta, -d) \Phi(\eta, \mu) d\eta = a_1 \mu (2 - q_1) - q_1 (a_0 - a_1 d + 2U_z), \ \mu > 0$$
(2.9)

$$\int_{-\infty}^{\infty} b(\eta, d) \Phi(\eta, \mu) d\eta = a_1 \mu (2 - q_2) - q_2 (a_0 + a_1 d - 2U_z), \ \mu < 0$$
 (2.10)

Подставив собственные функции (2.2) в уравнения (2.9) и (2.10) получаем сингулярные интегральные уравнения с ядром Коши:

$$\int_{-\pi}^{\infty} b(\eta, -d) \eta \frac{d\eta}{\eta - \mu} + b(\mu, -d) \frac{\lambda(\mu, \alpha)}{K_{R}(\mu, \alpha)} = a_{1}\mu(2 - q_{1}) - q_{1}(a_{0} - a_{1}d + 2U_{z}), \quad \mu > 0,$$
(2.11)

$$\int_{-\infty}^{\infty} b(\eta, d) \eta \frac{d\eta}{\eta - \mu} + b(\mu, d) \frac{\lambda(\mu, \alpha)}{K_B(\mu, \alpha)} = a_1 \mu (2 - q_2) - q_2 (a_0 + a_1 d - 2U_z), \quad \mu < 0.$$
 (2.12)

Введем две вспомогательные функции:

$$M(z,\pm d) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta b(\eta,\pm d)}{\eta - z} d\eta, \qquad (2.13)$$

граничные значения, которых на положительной полуоси сверху и снизу связаны формулами Сохоцкого:

$$M^{+}(\mu,\pm d) - M^{-}(\mu,\pm d) = 2\pi i \mu b(\mu,\pm d), \qquad (2.14)$$

$$\frac{M^{+}(\mu,\pm d) + M^{-}(\mu,\pm d)}{2} = M(\mu,\pm d), \quad M(z,\pm d) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta b(\eta,\pm d)}{\eta - z} d\eta,$$

где  $M(\mu,\pm d)$  - особый интеграл в смысле главного значения по Коши.

С помощью равенств (2.13) и (2.14) и граничных значений дисперсионной функции и функции  $M(z,\pm d)$  сведем сингулярные уравнения (2.11) и (2.12) к краевым задачам Римана:

$$\lambda^{+}(\mu,\alpha)[M^{+}(\mu,-d)-a_{1}\mu(2-q_{1})]-\lambda^{-}(\mu,\alpha)][M^{-}(\mu,-d)-a_{1}\mu(2-q_{1})]=$$

$$=-2\pi i\mu K_{R}(\mu,\alpha)q_{1}(a_{0}-a_{1}d+2U_{z}),$$
(2.15)

$$\lambda^{+}(\mu,\alpha)[M^{+}(\mu,d)-a_{1}\mu(2-q_{2})]-\lambda^{-}(\mu,\alpha)][M^{-}(\mu,d)-a_{1}\mu(2-q_{2})]=$$

$$=-2\pi i\mu K_{R}(\mu,\alpha)q_{2}(a_{0}+a_{1}d-2U_{z}).$$
(2.16)

Краевые условия (2.15) и (2.16) не являются краевыми задачами Римана, ибо линии скачков функций, входящих в эти условия, не совпадают с контуром, на котором они заданы. Сведем (2.15) и (2.16) к краевым задачам Римана. Для этого, учитывая, что левые части (2.15) и (2.16) — суть четные функции, распространим их на всю действительную ось, продолжая правые части «четным» образом:

$$\lambda^{+}(\mu,\alpha)[M^{+}(\mu,-d)-a_{1}\mu(2-q_{1})]-\lambda^{-}(\mu,\alpha)][M^{-}(\mu,-d)-a_{1}\mu(2-q_{1})]=$$

$$=-2\pi i|\mu|K_{P}(\mu,\alpha)g_{1}(a_{0}-a_{1}d+2U_{z}), \quad -\infty < \mu < \infty,$$
(2.17)

$$\lambda^{+}(\mu,\alpha)[M^{+}(\mu,d) - a_{1}\mu(2 - q_{2})] - \lambda^{-}(\mu,\alpha)][M^{-}(\mu,d) - a_{1}\mu(2 - q_{2})] =$$

$$= 2\pi i |\mu| K_{B}(\mu,\alpha) q_{2}(a_{0} + a_{1}d - 2U_{z}), \quad -\infty < \mu < \infty.$$
(2.18)

Учитывая поведение функций, входящих в краевые условия (2.17) и (2.18), получим следующее общее решение:

$$M(z,-d) = a_1 z(2-q_1) - q_1(a_0 - a_1 d + 2U_z) \frac{f_1(z,\alpha)}{\lambda(z,\alpha)},$$
 (2.19)

$$M(z,d) = a_1 z(2 - q_2) + q_2(a_0 + a_1 d - 2U_z) \frac{f_1(z,\alpha)}{\lambda(z,\alpha)},$$
 (2.20)

где 
$$f_1(z,\alpha) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{|\mu| K_B(\mu,\alpha) d\mu}{\mu-z}$$
,  $t_1(z,\alpha) = \int\limits_{0}^{\infty} \frac{\mu K_B(\mu,\alpha) d\mu}{\mu-z}$ .

Заметим, что при  $z \rightarrow \infty$ 

$$\frac{f_1(z,\alpha)}{\lambda(z,\alpha)} = z \frac{l_1(\alpha)}{l_2(\alpha)}, \quad \text{где} \quad l_n(\alpha) = \int\limits_0^\infty \mu^n \, \ln(1-\exp(\alpha-\mu^2)) d\mu \,, \quad n = 0,1,2 \,.$$

Учитывая что,  $M(\mu,\pm d)=0$  при  $\mu\to\infty$  получим следующие уравнения:

$$\begin{split} a_1 l_2(\alpha)(2-q_1) - q_1 l_1(\alpha)(a_0 - a_1 d + 2U_z) &= 0 \; , \\ a_1 l_2(\alpha)(2-q_2) + q_2 l_1(\alpha)(a_0 + a_1 d - 2U_z) &= 0 \; . \end{split}$$

Из этих уравнений находим:

$$\begin{split} a_0 &= \frac{2U_z(q_2 - q_1)}{q_1 + q_2 + (d(l_1(\alpha)/l_2(\alpha)) - 1)q_1q_2} \;, \\ a_1 &= \frac{2q_1q_2U_z(l_1(\alpha)/l_2(\alpha))}{q_1 + q_2 + (d(l_1(\alpha)/l_2(\alpha)) - 1)q_1q_2} \;. \end{split}$$

Сделаем предельный переход к классическим газам для коэффициентов дискретного спектра. Устремляя  $\mu \to -\infty$  получаем  $\frac{l_1(\alpha)}{l_2(\alpha)} \to \frac{2}{\sqrt{\pi}}$ . Следовательно, для классических газов имеем:

$$a_0 = \frac{2U_z(q_2 - q_1)}{q_1 + q_2 + (2d/\sqrt{\pi} - 1)q_1q_2}, \quad a_1 = \frac{4/\sqrt{\pi} \ q_1q_2U_z}{q_1 + q_2 + (2d/\sqrt{\pi} - 1)q_1q_2},$$

что совпадает с известным результатом [6].

Подставим формулу Сохоцкого (2.14) в решение (2.19) и (2.20). Получаем два уравнения:

$$2\pi i \eta b(\eta, -d) = -q_1(a_0 - a_1 d + 2U_z) \left( \frac{f_1^+(\eta, \alpha)}{\lambda^+(\eta, \alpha)} - \frac{f_1^-(\eta, \alpha)}{\lambda^-(\eta, \alpha)} \right), \tag{2.21}$$

$$2\pi i \eta b(\eta, d) = q_2(a_0 + a_1 d - 2U_z) \left( \frac{f_1^+(\eta, \alpha)}{\lambda^+(\eta, \alpha)} - \frac{f_1^-(\eta, \alpha)}{\lambda^-(\eta, \alpha)} \right). \tag{2.22}$$

Заметим, что

$$\frac{f_1^+(\eta,\alpha)}{\lambda^+(\eta,\alpha)} - \frac{f_1^-(\eta,\alpha)}{\lambda^-(\eta,\alpha)} = 4\pi i \gamma(|\eta|,\alpha) t_1(-|\eta|,\alpha) ,$$
где  $\gamma(\eta) = \frac{|\eta| K_B(\eta,\alpha)}{\lambda^+(\eta,\alpha)\lambda^-(\eta,\alpha)} .$  (2.23)

При  $\mu \to -\infty$ , имеем соотношение

$$\frac{f_1^+(\eta)}{\lambda^+(\eta)} - \frac{f_1^-(\eta)}{\lambda^-(\eta)} = 4\sqrt{\pi}i\gamma(|\eta|)t_1(-|\eta|) \text{ , где } \gamma(\eta) = \frac{|\eta|\exp(-\eta^2)}{\lambda^+(\eta)\lambda^-(\eta)} \text{ ,}$$

которое полностью совпадает с известным результатом [6] для классических газов.

Таким образом, учитывая (2.23) формулы (2.21) и (2.22) принимают вид:

$$\eta b(\eta, -d) = -2q_1(a_0 - a_1d + 2U_z)\gamma(|\eta|, \alpha)t_1(-|\eta|, \alpha)$$
 (2.24)

$$\eta b(\eta, d) = 2q_2(a_0 + a_1 d - 2U_z)\gamma(|\eta|, \alpha)t_1(-|\eta|, \alpha), \tag{2.25}$$

Из уравнений (2.24) и (2.25) находим, что

$$\eta \cdot sh \frac{2d}{\eta} A(\eta) = -\left(\exp\left(\frac{d}{\eta}\right)q_1(a_0 - a_1d + 2U_z) + \exp\left(-\frac{d}{\eta}\right)q_2(a_0 + a_1d - 2U_z)\right)\gamma(|\eta|, \alpha)t_1(-|\eta|, \alpha)$$

Таким образом, неизвестные коэффициенты разложения (2.3) найдены. Это означает, что функция распределения полностью построена. При  $\mu \to -\infty$  (когда квантовый газ переходит в классический) функция распределения молекул бозе-газа переходит в функцию распределения молекул классического газа [6].

#### 3. МАКРОПАРАМЕТРЫ ГАЗА В КАНАЛЕ

С помощью функции распределения вычислим поток массы газа в канале в направлении оси z, приходящегося на единицу ширины канала. Будем использовать штрихованные переменные – размерные, нештрихованные – безразмерные. Выразим плотность потока массы через функцию  $h(x', \mu)$ .

$$j(x') = \int m v_z f(x', v) d^3 \Omega$$
,  $d\Omega = \frac{(2s+1)m^3}{(2\pi\hbar)^3} d^3 v$ ,

где s - спин частицы газа Бозе.

Учитывая функцию (1.4) и вычисляя соответствующие интегралы получим:

$$j(x) = -\frac{(2s+1)m^4}{(2\pi\hbar)^3 \beta^2} \frac{m\pi}{\beta^2} l_0(\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu, \alpha) h(x, \mu) d\mu.$$
 (3.1)

Заметим, что плотность числа частиц определяется следующим выражением:

$$\rho = mn = -\frac{(2s+1)m^3}{(2\pi\hbar)^3 \beta^{\frac{3}{2}}} 2m\pi l_0(\alpha).$$

Следовательно,

$$j(x) = \frac{\rho}{2\sqrt{\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu, \alpha) h(x, \mu) d\mu.$$

Величина потока массы газа определяется через плотность потока массы (3.1) интегралом:

$$J_{M} = \int_{-d'}^{d'} j(x')dx' = \frac{1}{v\sqrt{\beta}} \int_{-d}^{d} j(x)dx,$$

$$J_{M} = \frac{\rho}{2v\beta} \int_{-d}^{d} dx \int_{-\infty}^{\infty} K_{B}(\mu,\alpha)h(x,\mu)d\mu = \frac{\rho}{2v\beta} \int_{-d}^{d} j_{1}(x)dx.$$

Здесь  $j_1(x)$  - безразмерная плотность потока массы газа,

$$j_1(x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu, \alpha) h(x, \mu) d\mu.$$
 (3.2)

Подставляя в (3.2) разложение (2.4) получим:

$$j_1(x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu, \alpha) h_0(x, \mu) d\mu + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x}{\eta}\right) A(\eta) d\eta$$

Следовательно, полный поток массы газа в канале равен:

$$J_{M} = \frac{\rho}{2\nu\beta} \int_{-d}^{d} dx \int_{-\infty}^{\infty} K_{B}(\mu, \alpha) h_{0}(x, \mu) d\mu + \frac{\rho}{\nu\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \eta \cdot sh \frac{d}{\eta} A(\eta) d\eta.$$
 (3.3)

После подстановки в (3.3) коэффициентов  $a_0$  и  $a_1$  получаем:

$$J_{M} = \frac{2\rho}{\nu\beta} \frac{U_{z}(q_{1} - q_{2})(\gamma_{1}^{0}q_{1}q_{2} - d)}{q_{1} + q_{2} + (d(l_{1}/l_{2}) - 1)q_{1}q_{2}}.$$
(3.4)

В формуле (3.4) перейдем к размерным переменным. Здесь  $U_z = \sqrt{\beta} U'_z$ ,  $d = v \sqrt{\beta} d' = \sqrt{\pi}/4Kn$ , где Kn- число Кнудсена,  $\eta = \rho/2v\beta$ - динамическая вязкость. Следовательно,

$$J_{M} = 4\eta\sqrt{\beta} \frac{U'_{z}(q_{1} - q_{2})(\gamma_{1}^{0}q_{1}q_{2} - \sqrt{\pi}/4Kn)}{q_{1} + q_{2} + ((\sqrt{\pi}l_{1})/(4Knl_{2}) - 1)q_{1}q_{2}}$$

Найдем теперь силу вязкого трения в направлении оси z, которая приходится на единицу площади поверхности стенок канала.

$$F(x') = \int m v_x v_z f(x', v) d^3 \Omega, \ d\Omega = \frac{(2s+1)m^3}{(2\pi\hbar)^3} d^3 v.$$

Переходя к безразмерным координатам и учитывая формулу (1.4) получим:

$$F(x) = -\frac{\rho}{2\pi\beta \cdot l_0(\alpha)} \int C_x C_z [f_B(\tilde{N}) + g_B(\tilde{N})C_z h(x, C_x)] d^3C.$$
 (3.5)

Вычисляя все необходимые интегралы в формуле (3.5) формула силы вязкого трения будет иметь вид:

$$F(x) = \frac{\rho}{2\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \mu K_B(\mu, \alpha) h(x, \mu) d\mu . \tag{3.6}$$

Подставляя в (3.6) разложение (2.4) и проводя ряд преобразований получим:

$$F = -pa_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mu^2 K_B(\mu, \alpha) d\mu, \qquad (3.7)$$

Далее подставляя значение  $a_1$  в формулу (3.7) находим поток массы газа:

$$F = -\frac{2q_1q_2U_z(l_1/l_2)}{q_1 + q_2 + (d(l_1/l_2) - 1)q_1q_2} p \int_{-\infty}^{\infty} \mu^2 K_B(\mu, \alpha) d\mu.$$
 (3.8)

В формуле (3.8) перейдем к размерным переменным:

$$F = -\frac{2q_1q_2{U'}_z\,\sqrt{\beta}(l_1/l_2)}{q_1+q_2+((\sqrt{\pi}l_1)\big/(4Knl_2)-1)q_1q_2}\,p\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mu^2K_{_B}(\mu,\alpha)d\mu\,.$$

Найдем величину теплового потока в направлении оси z, приходящегося на единицу ширины канала.

$$q(x) = \frac{m}{2} \int (\mathbf{v} - \mathbf{u}(x)) |\mathbf{v} - \mathbf{u}(x)|^2 f(x, \mathbf{v}) d^3 \Omega, \ d\Omega = \frac{(2s+1)m^3}{(2\pi\hbar)^3} d^3 \mathbf{v},$$

где u(x) - массовая скорость газа.

В линейном приближении получаем:

$$(\mathbf{v} - \mathbf{u}(x))|\mathbf{v} - \mathbf{u}(x)|^2 = (\mathbf{v} - \mathbf{u}(x))(\mathbf{v}^2 - 2\mathbf{v}\mathbf{u}(x)) = \mathbf{v}\mathbf{v}^2 - 2\mathbf{v}\mathbf{v}\mathbf{u}(x) - \mathbf{v}^2\mathbf{u}(x).$$

Следовательно,

$$q(x) = \frac{(2s+1)m^3}{(2\pi\hbar)^3} \frac{m}{2} \int \left[ v_z v^2 - 2v_z v_z u_z(x) - v^2 u_z(x) \right] f(x, v) d^3 v,$$

поток направлен вдоль оси z.

Перейдем к безразмерным координатам:

$$q(x) = -\frac{nm}{4\pi J_0(\alpha)\beta^{\frac{3}{2}}} \int \left[ C_z C^2 - 2C_z C_z U_z(x) - C^2 U_z(x) \right] [f_B(C) + g_B(C) C_z h(x, C_x)] d^3 C$$
(3.9)

Вычисляя все необходимые интегралы в выражении (3.9) имеем:

$$q(x) = \frac{nkT}{2\sqrt{\beta}} \frac{1}{l_0(\alpha)} 2 \int_{-\infty}^{\infty} h(x,\mu) \int_{0}^{\infty} C_{\perp} \ln|1 - \exp(\alpha - C_{\perp}^2 - \mu^2)| dC_{\perp} d\mu +$$

$$+ \frac{nkT}{2\sqrt{\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} \mu^2 K_B(\mu,\alpha) h(x,\mu) d\mu - \frac{5nkT}{\sqrt{\beta}} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} K_B(\mu,\alpha) h(x,\mu) d\mu \int_{-\infty}^{\infty} \mu^2 K_B(\mu,\alpha) d\mu.$$
(3.10)

Подставляя в (3.10) разложение (2.3') и интегрируя по толщине канала от -d до d по x, находим:

$$J_{Q} = \frac{nkT}{\sqrt{\beta}} \frac{1}{l_{0}(\alpha)} \left\{ \left[ 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} C_{\perp} \ln|1 - \exp(\alpha - C_{\perp}^{2} - \mu^{2})|dC_{\perp}d\mu - Sl_{2}(\alpha) \right] \left[ \gamma_{1}^{0} \left[ -a_{0}(q_{1} + q_{2}) + (a_{1}d - 2U_{2})(q_{1} - q_{2}) \right] + a_{0}d \right] \right\} + \frac{nkT}{\sqrt{\beta}} \frac{1}{l_{1}(\alpha)} a_{0}dl_{2}(\alpha)$$

$$(3.11)$$

В выражении (3.11) подставим коэффициенты  $a_0$  и  $a_1$  и получим явное выражение величины потока тепла:

$$J_{\mathcal{Q}} = \frac{nkT}{l_0(\alpha)\sqrt{\beta}} \frac{2U_z(q_1 - q_2)}{q_1 + q_2 + (d(l_1/l_2) - 1)q_1q_2} \left\{ \left[ 2 \int_{-\infty}^{\infty} C_{\perp} \ln|1 - \exp(\alpha - C_{\perp}^2 - \mu^2)|dC_{\perp}d\mu - 5l_2(\alpha) \right] (\gamma_1^0 q_1 q_2 - d) - dl_2(\alpha) \right\}$$

$$(3.12)$$

Перейдем в формуле (3.12) к размерным координатам:

Здесь  $U_z=\sqrt{\beta}U^!_z$ ,  $d=\sqrt{\pi}/4Kn$ , где Kn- число Кнудсена,  $p=nkT=v\eta$ - давление газа.

$$\begin{split} J_{\mathcal{Q}} &= \frac{p}{l_{0}(\alpha)} \frac{2U'_{z} \left(q_{1} - q_{2}\right)}{q_{1} + q_{2} + (\sqrt{\pi}l_{1}/4l_{2}Kn) - 1\right)q_{1}q_{2}} \times \\ &\times \left\{ \left[ 2 \int_{-\infty}^{\infty} C_{\perp} \ln\left|1 - \exp(\alpha - C_{\perp}^{2} - \mu^{2}\right)\right| dC_{\perp} d\mu - 5l_{2}(\alpha) \right] (\gamma_{1}^{0}q_{1}q_{2} - \sqrt{\pi}/4Kn) - (\sqrt{\pi}l_{2}(\alpha))/4Kn \right\}. \end{split}$$

#### 4. АНАЛИЗ МАКРОПАРАМЕТРОВ

Когда коэффициенты аккомодации тангенциального импульса на обоих поверхностях совпадает  $q_1=q_2$  , то поток массы газа и тепловой поток газа равны нулю, т.е. совпадают.

Рассмотрим случай глубокого канала, когда число Кнудсена  $Kn = \frac{l}{2d} << 1$ . При этом возможны два режима течения газа в канале.

Первый режим соответствует случаю, когда  $\mathit{Kn} << q$  ,  $q = \max(q_1, q_2)$  . При этом знаменатели дробей  $a_1$  и  $a_0$  имеют вид:

$$q_1 + q_2 + (d(l_1/l_2) - 1)q_1q_2 = d(l_1/l_2)q_1q_2 + O(1)$$

Следовательно, выражения для макропараметров имеют соответственно следующий вид:

$$\begin{split} J_{M} = -4\eta \frac{U_{z}(q_{1}-q_{2})}{(l_{1}/l_{2})q_{1}q_{2}} \;, \quad F = -\frac{2U_{z}}{d} \; p \int_{-\infty}^{\infty} \mu^{2} K_{B}(\mu,\alpha) d\mu \;, \\ J_{Q} = \frac{p}{l_{0}(\alpha)\sqrt{\beta}} \frac{2U_{z}(q_{1}-q_{2})}{d \; (l_{1}/l_{2})q_{1}q_{2}} \bigg[ 2 \int_{-\infty}^{\infty} C_{\perp} \ln|1 - \exp(\alpha - C_{\perp}^{2} - \mu^{2})| dC_{\perp} d\mu - 5l_{2}(\alpha) \bigg] \gamma_{1}^{0} q_{1}q_{2} \end{split}$$

Переходя к размерным координатам имеем:

$$\begin{split} J_{\scriptscriptstyle M} &= -4\eta \frac{\sqrt{\beta}U_{\scriptscriptstyle z}'(q_1-q_2)}{(l_1/l_2)q_1q_2}\,, \\ F &= -\frac{2\sqrt{\beta}U_{\scriptscriptstyle z}'}{v\sqrt{\beta}d'}\eta v \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mu^2 K_{\scriptscriptstyle B}(\mu,\alpha)d\mu = -\eta\,\frac{2U_{\scriptscriptstyle z}'}{d'}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mu^2 K_{\scriptscriptstyle B}(\mu,\alpha)d\mu\,, \\ \\ J_{\scriptscriptstyle Q} &= \frac{\eta}{l_0(\alpha)}\frac{2U_{\scriptscriptstyle z}'(q_1-q_2)}{\sqrt{\beta}d'(l_1/l_2)} \Bigg[2\int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{0}^{\infty} C_{\scriptscriptstyle \perp} \ln|1-\exp(\alpha-C_{\scriptscriptstyle \perp}^2-\mu^2)|dC_{\scriptscriptstyle \perp}d\mu - 5l_2(\alpha)\Bigg]\gamma_1^0\,. \end{split}$$

Другой режим течения газа соответствует случаю, когда для числа Кнудсена выполняется неравенство q << Kn << 1,  $q = \max(q_1, q_2)$ . В этом случай знаменатель дроби  $a_1$  и  $a_0$  имеют вид:

$$q_1 + q_2 + (d(l_1/l_2) - 1)q_1q_2 = q_1 + q_2 + o(1)$$
.

При этом макропараметры определяются следующими выражениями:

$$\begin{split} J_{M} &= -\frac{2\rho}{\nu\beta} \frac{U_{z}(q_{1}-q_{2})}{q_{1}+q_{2}} d \;, \qquad F = -\frac{2q_{1}q_{2}U_{z}(l_{1}/l_{2})}{q_{1}+q_{2}} p \int_{-\infty}^{\infty} \mu^{2} K_{B}(\mu,\alpha) d\mu \;, \\ \\ J_{Q} &= \frac{nkT}{l_{0}(\alpha)\sqrt{\beta}} \frac{2\gamma_{1}^{0}q_{1}q_{2}U_{z}(q_{1}-q_{2})}{q_{1}+q_{2}} \Bigg[ 2\int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} C_{\perp} \ln|1 - \exp(\alpha - C_{\perp}^{2} - \mu^{2})|dC_{\perp}d\mu - 5l_{2}(\alpha) \Bigg] \;. \end{split}$$

Переходя к размерным координатам получаем:

$$\begin{split} J_{M} &= -\eta \frac{\sqrt{\pi} \sqrt{\beta}}{Kn} \frac{U'_{z}(q_{1} - q_{2})}{q_{1} + q_{2}} \,, \qquad F = -\frac{2\sqrt{\beta} q_{1} q_{2} U'_{z} \left(l_{1} / l_{2}\right)}{q_{1} + q_{2}} p \int_{-\infty}^{\infty} \mu^{2} K_{B}(\mu, \alpha) d\mu \,, \\ \\ J_{Q} &= \frac{p}{l_{0}(\alpha)} \frac{2\gamma_{1}^{0} q_{1} q_{2} U'_{z} \left(q_{1} - q_{2}\right)}{q_{1} + q_{2}} \Bigg[ 2 \int_{-\infty}^{\infty} C_{\perp} \ln|1 - \exp(\alpha - C_{\perp}^{2} - \mu^{2})| dC_{\perp} d\mu - 5l_{2}(\alpha) \Bigg] \cdot \end{split}$$

Таким образом, для почти зеркальных условий существует режим, когда выражения для потока массы газа в канале и силы вязкого трения отличны от классических. Этот режим называют гидродинамическим режимом со скольжением. Переход к классическому режиму течения осуществляется при более сильном условии Kn << q.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получено решение задачи о течении Куэтта с почти зеркальными граничными условиями. Построена функция распределения квантового бозе-газа. С помощью функции распределения вычислены макропараметры газа, а именно получено выражение для силы вязкого трения, потока массы и тепла газа в канале. Проведен анализ полученных результатов и сравнение их с результатами, полученными для классических газов [6-7].

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Шарипов Ф.М., Селезнев В.Д. Движение разреженных газов в каналах и микроканалах. Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2008. 230 с.
- 2. Siewert C.E. // Zeitschriff für Angewandte Mathematic und Physik. 2003. Bd 54. S. 273.
- 3. Siewert C.E., Valougeorgis D. // Europ. J. of Mechanics B. Fluids. 2004. Vol. 23. P. 645.
- 4. Garcia R.D.M., Siewert C.E. // SIAM J. of Appl. Mathematics. 2007. Vol. 67. P. 1041.
- 5. Garcia R.D.M., Siewert C.E. // Europ. J. of Mechanics B. Fluids. 2009. Vol. 28. P. 387.
- 6. Латышев А.В., Юшканов А.А. Аналитические решения граничных задач для кинетических уравнений. М.: МГОУ, 2004. 286 с.
- 7. В.Н. Попов, И.В. Тестова, А.А. Юшканов Аналитическое решение задачи о течении Куэтта в плоском канале с бесконечными параллельными стенками, Журнал технической физики, 2011, том 81, вып. 1, с. 53-58.
- 8. Бедрикова Е.А., Латышев А.В. arXiv:1212.1270v1 [math-ph] 6 Dec 2012, http://arxiv.org/abs/1212.1270.

# А.Б. Хмелев<sup>1</sup>, М.В. Калинин<sup>2</sup>, В.В. Рябченков<sup>2</sup>, П.В. Шувалов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт
<sup>2</sup> Национальный исследовательский центр Курчатовский институт

### РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ТЕЧЕНИЯ ПУАЗЕЙЛЯ

Аннотация: Проведено компьютерное моделирование течения Пуазейля на основе численного решения уравнения Больцмана. Оператор переноса аппроксимировался методом конечных объемов с использованием тетраэдрических сеток и сеток в виде призм. Интеграл столкновений вычислялся проекционным методом. Проведено параметрическое исследование течения при различных разбиениях сетки по длине трубки.

*Ключевые слова*: проекционный метод, метод конечных объемов, уравнение Больцмана, течение Пуазейля.

A. Hmelev<sup>1</sup>, M. Kalinin<sup>2</sup>, V. Ryabchenkov<sup>2</sup>, P. Shuvalov<sup>2</sup>

Moscow Institute of Physics and Technology

2 NRC "Kurchatov Institute"

### DEVELOPMENT OF METHODS OF COMPUTER MODELING AND ANALYSIS OF POISEUILLE FLOW.

*Abstract:* A computer simulation of Poiseuille flow on the basis of numerical solutions of the Boltzmann equation was conducted. Transfer operator was approximated by finite volume method using a tetrahedral mesh and meshes in the form of prisms. The collision integral was calculated by the projection method. A parametric study of flow in different partitions of the grid along the length of the tube was conducted.

Key words: projection method, finite volume method, Boltzmann equation, Poiseuille flow.

#### Ввеление

Современное развитие технологий позволяет разрабатывать, конструировать и создавать различные микро- и наноустройства: MEMS [1], микронасосы [2], газовые анализаторы [3]. Одним из важных направлений исследования в этой области является изучение неравновесных течений газов в микроструктурах. В микроустройствах при нормальных условиях длина свободного пробега соизмерима с характерными размерами течения, что влечет за собой неприменимость традиционного подхода моделирования газовых течений – решение уравнений непрерывной

среды (уравнений Навье-Стокса). Необходимо кинетическое описание газа, основой которого является кинетическое уравнение Больцмана.

Кинетическое уравнение Больцмана позволяет изучать течение разреженного газа и определять его макропараметры (плотность, температуру, среднюю скорость) путем интегрирования функции распределение молекул по скоростям. Аналитически решить кинетическое уравнение ввиду его сложности возможно лишь для узкого ряда задач. В большинстве случаев приходится применять численные методы.

В данной работе на основе численного решения кинетического уравнения Больцмана изучается однин из возможных вариантов течений Пуазейля. Исследование течения Пуазейля через микро полости и микро трубки имеет большой практический интерес, например, при конструировании вакуумного оборудования, фильтрующих мембран, газовых анализаторов и т. д.[4]. В работах [5] и [6] задача исследуется численно с помощью метода статистического моделирования и решения модельного уравнения, соответственно. Помимо этого, задача течения Пуазейля является классической задачей газовой динамики и может использоваться для верификации солверов.

#### Постановка краевой задачи

Геометрия моделируемого устройства представляет собой соединенные длинной цилиндрической трубкой большие резервуары. На Рис. 1 показана схема рассматриваемой задачи, состоящая из: цилиндрической трубки постоянного диаметра, A – резервуара с повышенным давлением, B – резервуара с пониженным давлением. Стрелка указывает направление течения газа, создающееся повышенным давлением в резервуаре A. Отношение давлений  $\frac{P\_A}{P\_B} = 1.1$ 

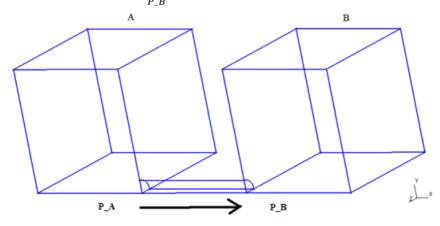


Рис. 1. Течение Пуазейля по цилиндрической трубке постоянного диаметра.

Геометрия рассматриваемой задачи симметрична относительно 2-х плоскостей, поэтому для уменьшения объема вычислений целесообразно моделировать движение газа в одной из таких областей. Поступая таким образом, мы решим задачу для всей системы.

Обозначим r — радиус трубки. Расчёты проводились для 3-х длин трубки L:

- 1) L = 10 \* r
- 2) L = 50 \* r
- 3) L = 100 \* r

Число Кнудсена было равным  $Kn = L/\lambda = 2$ 

В начальный момент функция распределения по скоростям газа внутри системы имеет максвелловский вид при температуре  $T_0$  и числовой плотности молекул  $n_A$  в трубке и  $n_B$  в резервуаре повышенного давления,  $n_A=1.1n_B$ 

$$f(\xi_x, \xi_y, \xi_z) = n_0 \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi k T_0}\right)^3} \exp\left(-\frac{m(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2k T_0}\right)$$

где  $\xi_x$ ,  $\xi_y$ ,  $\xi_z$  - проекции скорости молекулы на координатные оси, m-масса молекулы газа, k- постоянная Больцмана.

Температуры стенок резервуаров A и B равны  $T_0$ . Отражение молекул от стенок резервуаров и трубки является диффузным с максвелловским распределением по скоростям. Температура отраженных молекул равна температуре стенки. От плоскостей симметрии молекулы отражаются зеркально.

#### Построение пространственной сетки

Время, затрачиваемое на численное решение уравнения Больцмана, линейно зависит от числа ячеек в координатном пространстве, поэтому сетка должна отвечать следующим требованиям:

- 1) сгущаться в тех областях, в которых движение газа представляет наибольший интерес, и быть менее подробной там, где важно только распределение макропараметров.
- 2) сгущаться у искривленных поверхностей расчетной области для того, чтобы лучше повторять геометрию системы.

Этим требованиям удовлетворяет сетка, представленная на Рис. 2.

Геометрия системы и сетки были получены с помощью программы GMSH [7] - это генератор конечно-элементных сеток со встроенным CAD-редактором и модулем постобработки данных. GMSH — это быстрый, легковесный и дружелюбный генератор сеток с параметрическим представлением данных (как через графический интерфейс (OpenGL API), так и через собственный скриптовый язык) и расширенными возможностями визуализации.

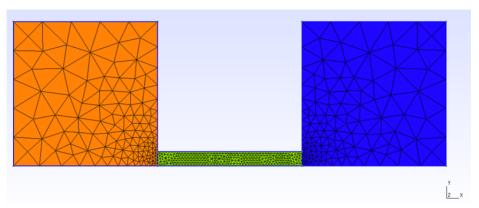


Рис. 2. Неравномерная тетраэдрическая сетка.

### Переход к безразмерным переменным и функциям

Для перехода от размерных переменных к безразмерным используется четыре нормирующие постоянные: температура  $T_0$ , плотность  $n_0$ , масса m, диаметр  $\sigma$ . Обезразмеривание переменных производится введением нормировочных констант:

Скорость:

$$v_0 = \sqrt{\frac{kT_0}{m}},$$

Импульс:

$$p_0 = \sqrt{kT_0 m},$$

Длина:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi n_0 \sigma_{\text{eff}}^2},$$

Время:

$$\tau_0 = \frac{\lambda}{v_0}$$

Соответственно переменные в безразмерном виде определяются выражениями:

$$p^* = \frac{p}{p_0}, t^* = \frac{t}{\tau_0}, b^* = \frac{b}{\sigma_{eff}}, x^* = \frac{x}{\lambda}, f^* = \frac{f}{n_0 v_0^{-3}}$$

Далее везде будем опускать знак \* у переменных и будем работать с безразмерными переменными.

Здесь в качестве исходной системы единиц можно брать, например, СГСЭ или СИ. При этом надо помнить, что при переходе от безразмерных единиц необходимо брать ту же систему изменения.

Уравнение Больцмана принимает вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} I \tag{1}$$

Кроме того, будем считать равной 1 константу Больцмана, а массу близкой единице.

#### Конечно-разностная схема.

Для численного решения уравнения (1) необходимо перейти от непрерывной функции распределения к дискретной. Для этого введем скоростную сетку, построение которой осуществляется следующим образом. Вначале определяется куб в пространстве скоростей и в нем строится равномерная сетка узлов. Выбор равномерной сетки узлов обусловлен методом вычисления интеграла столкновений. Ребро куба равно  $4.8\sqrt{T_I}$ . Затем в куб вписывается сфера, и исключаются все внешние узлы. Число узлов сетки сокращается примерно вдвое. Далее уравнение (1) решается в каждом из  $N_0$  равноотстоящих скоростных узлов  $\xi_\gamma$  в каждой ячейке пространственной тетраэдрической сетки.

В скоростном пространстве функция распределения и интеграл столкновений могут быть представлены на базисе  $\delta$  – функций в виде

$$f(\xi, \mathbf{x}, t) = \sum_{\gamma=1}^{N_0} f_{\gamma}(\mathbf{x}, t) \delta(\xi - \xi_{\gamma}) \cdot I(\xi, \mathbf{x}, t) = \sum_{\gamma=1}^{N_0} I_{\gamma}(\mathbf{x}, t) \delta(\xi - \xi_{\gamma})$$

Для определения дискретных значений  $I_{\gamma}(\mathbf{x},t)$  интеграла столкновений используется проекционный метод [11-13], сохраняющий массу, импульс и энергию, а также дающий точное значение интеграла, равное нулю, для максвелловской функции распределения. Последнее свойство метода выполняется для сколь угодно грубых кубатурных сеток, применяемых для вычисления интеграла столкновений.

После вычисления дискретных значений интеграла столкновений задача сводится к решению конечно-разностным методом системы уравнений

$$\frac{\partial f_{\gamma}}{\partial t} + \xi_{\gamma} \cdot \frac{\partial f_{\gamma}}{\partial \mathbf{x}} = I_{\gamma}(\mathbf{x}, t) \tag{2}$$

Система (2) из  $N_0$  уравнений решается симметричным методом расщепления с шагом по времени  $\tau = t^{j+1} - t^j$ 

$$\frac{f_{\gamma}^{l,j} - f_{\gamma}^{j}}{\frac{\tau}{2}} = \frac{1}{V} (\Phi_{l,\gamma}^{l} + \Phi_{2,\gamma}^{l} + \Phi_{3,\gamma}^{l} + \Phi_{4,\gamma}^{l})$$
 (3)

$$\frac{f_{\gamma}^{2,j} - f_{\gamma}^{1,j}}{\tau} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_{\gamma} \tag{4}$$

$$\frac{f_{\gamma}^{j+1} - f_{\gamma}^{2,j}}{\tau/2} = \frac{1}{V} (\Phi_{l,\gamma}^{2} + \Phi_{2,\gamma}^{2} + \Phi_{3,\gamma}^{2} + \Phi_{4,\gamma}^{2})$$
 (5)

 $f_{\gamma}^{\ l,j}$  и  $f_{\gamma}^{\ 2,j}$  - промежуточные значения функции распределения.

 $\Phi_k^{-1}$ ,  $\Phi_k^{-2}$  - потоки функции распределения через k -ю грань тетраэдра в уравнениях (3) и (5) соответственно. V - объем тетраэдра.

Уравнение переноса аппроксимируем явной консервативной схемой первого порядка точности. На каждом временном шаге оно решается два раза для смягчения условия Куранта.

Определим  $\Phi_k$  для всех тетраэдров. Через  $\mathbf{n_k}$  обозначим нормаль к k -й грани, направленной внутрь тетраэдра. Возможно 3 случая:

1) Рассматриваемый тетраэдр под номером i граничит с другим тетраэдром под номером m . Тогда справедлива формула

2)

$$\Phi_k = \begin{cases} S_k f(t, i, \xi)(\xi, \mathbf{n_k}), (\xi, \mathbf{n_k}) < 0 \\ S_k f(t, m, \xi)(\xi, \mathbf{n_k}), (\xi, \mathbf{n_k}) > 0 \end{cases}$$
(6)

где  $S_k$  - площадь  $\,k\,$ -й грани тетраэдра,

Верхняя формула отвечает вытеканию газа из тетраэдра, в то время как нижняя формула означает приток газа в i -й тетраэдр из соседнего k -го тетраэдра.

3) Грань тетраэдра граничит со стенкой, тогда имеет место диффузное отражение:

4)

$$\Phi_{k} = \begin{cases}
S_{k} f(t, i, \xi)(\xi, \mathbf{n}_{k}), (\xi, \mathbf{n}_{k}) < 0 \\
-\sum_{(\xi, \mathbf{n}_{j}) < 0} (\xi, \mathbf{n}_{k}) f(t, i, \xi) \\
\frac{\sum_{(\xi, \mathbf{n}_{k}) > 0} (\xi, \mathbf{n}_{k}) \exp(-\frac{\xi^{2}}{2T_{cm}})}{2T_{cm}} \exp(-\frac{\xi^{2}}{2T}), (\xi, \mathbf{n}_{k}) > 0
\end{cases}$$
(7)

где  $T_{cm}$  - безразмерная температура стенки.

5) Грань тетраэдра лежит на плоскости симметрии, тогда имеет место зеркальное отражение:

6)

$$\Phi_k = \begin{cases}
S_k f(t, i, \xi)(\xi, \mathbf{n_k}), (\xi, \mathbf{n_k}) < 0 \\
S_k f(t, i, \xi - 2\mathbf{n_k}(\xi, \mathbf{n_k}))(\xi, \mathbf{n_k}), (\xi, \mathbf{n_k}) > 0
\end{cases}$$
(8)

Уравнение (4) решается как интегральное с контролем положительной определенности получаемого решения, изложенным в [11-13].

### Результаты расчетов.

Ниже приведены значения потока частиц через трубку Q(n,t) в зависимости от количества ячеек сетки в трубке n и от времени t

Вначале рассмотрим моделирование сетки в трубке с помощью призм. В таблицах 1-3 представлены результаты для 3-x длин трубок

. Таблица 1 Поток частиц через трубку длиной L=10\*r. Призматическая сетка.

t	Q(2700)	Q(1350)	Q(540)
0,5	5,75	5,7	6,2
1,0	4,15	4,15	4,5
1,5	3,3	3,45	3,8
2,0	3,2	3,1	3,5
2,5	3,0	2,9	3,35
3,0	2,85	2,85	3,25

Таблица 2. Поток частиц через трубку длиной L = 50 \* r. Призматическая сетка.

t	Q(13500)	Q(6750)	Q(2700)
0,5	5,60	6,00	6,45
1,0	4,00	4,25	4,65
1,5	3,25	3,45	3,75
2,0	3,00	3,00	3,50
2,5	2,65	2,60	3,15
3,0	2,40	2,35	2,75
3,5	2,25	2,25	2,60
4,0	2,15	2,15	2,25
4,5	2,10	2,00	2,20
5,0	1,75	1,75	2,00

Таблица 3. Поток частиц через трубку длиной L = 100 \* r. Призматическая сетка.

t	Q(27000)	Q(13500)	Q(6750)
0,5	5,75	6,00	6,30
1,0	4,10	4,20	4,60
1,5	3,40	3,45	3,75
2,0	3,00	3,05	3,35
2,5	2,75	2,80	2,95
3,0	2,50	2,50	2,65
3,5	2,30	2,30	2,50
4,0	2,15	2,15	2,30
4,5	2,00	2,00	2,15
5,0	1,85	1,80	2,00
6,0	1,75	1,75	1,90
7,0	1,75	1,75	1,85

На Рис.3. представлена концентрация молекул в системе в момент выхода трубки на оптимальную пропускную способность.

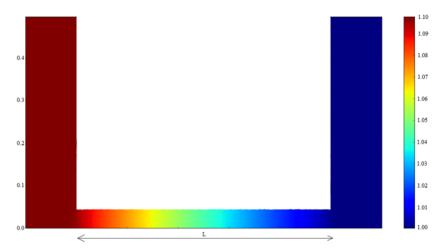


Рис.3. Установление оптимальной пропускной способности в трубке. Концентрация. Призматическая сетка.

Дальше рассмотрим моделирование сетки в трубке с помощью тетраэдров. В таблицах 4. — 6 представлены результаты для 3-х длин трубок

 $\label{eq:2.1} \mbox{Таблица 4.}$  Поток частиц через трубку длиной L=10\*r. Тетраэдрическая сетка.

t	Q(4835)	Q(831)	Q(178)
1,0	4,00	3,90	3,80
2,0	3,00	3,00	2,90
3,0	2,70	2,65	2,55
4,0	2,60	2,55	2,50
5,0	2,60	2,55	2,45
6,0	2,60	2,60	2,45

Таблица 5. Поток частиц через трубку длиной L = 50 \* r. Тетраэдрическая сетка.

t	Q(21872)	Q(3866)	Q(827)
0,5	6,25	6,00	5,80
1,0	4,10	4,00	3,90
1,5	3,60	3,50	3,45
2,0	3,15	3,00	2,90
2,5	2,75	2,70	2,65
3,0	2,50	2,40	2,35
3,5	2,25	2,20	2,10
4,0	2,15	2,05	1,90
4,5	2,00	1,95	1,85
5,0	1,85	1,85	1,75

7,5	1,60	1,55	1,50
10,0	1,35	1,35	1,30
15,0	1,15	1,15	1,10
17,5	1,15	1,15	1,10

Таблица 6. Поток частиц через трубку длиной L = 100 \* r. Тетраэдрическая сетка.

t	Q(43416)	Q(7332)	Q(1626)
0,8	4,30	4,10	4,00
3,5	2,25	2,10	2,00
5,0	1,95	1,80	1,65
7,5	1,60	1,40	1,35
10,0	1,40	1,25	1,15
12,5	1,25	1,15	1,05
15,0	1,10	1,00	0,95
17,5	0,95	0,90	0,85
20,0	0,90	0,85	0,80
22,5	0,85	0,80	0,75
25,0	0,85	0,80	0,75
27,5	0,85	0,80	0,75

На рис.4. представлена концентрация молекул и производная от концентрации в системе к моменту выхода трубки на оптимальную пропускную способность.

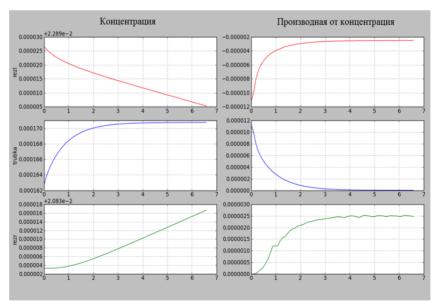


Рис.4. Изменение концентрации и её производной со временем. Тетраэдрическая сетка.

На рис.5. представлено отклонение значений потока частиц через трубку. При построении данного графика за основу брались значения потока через трубку при самой точной сетке. Относительно этих данных поставлены средние квадраты отклонений для результатов которые приведены в табл. 4.-6.

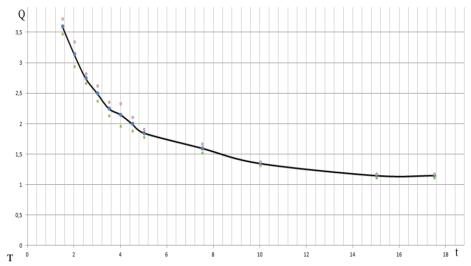


Рис. 5. Поток газа через трубку в зависимости от времени.

#### Выволы.

Как видно из таблиц, как для призматических сеток, так и для тетраэдрических — уменьшение точности сетки в 2 раза даёт потерю точности вычисления в 2-3%. При этом мощности для счёта задействовались в 1,5 раза меньшие. При уменьшении точности сетки количество ядер на задачу уменьшалось в 1,5 раза.

Уменьшение точности в 4 раза ведёт к погрешности в 5-10%. А соответствующий выигрыш в ресурсах составляет 3 раза.

Сравнивая между собой сетки из призм и тетраэдрические, можно сказать, что точность результатов получается одинаковая.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Nathanson H.C., Liberman I., Freidhoff C. Novel functionality using micro-gaseous devices // Proceedings of IEEE Int. Conf. on MEMS. 1995. P. 72–76.
- 2. Blomberg M., Rusanen O., Keranen K., Lehto A. A silicon microsystem-miniaturised infrared spectrometer // Proceedings of IEEE Int. Conf. on Solid-State Sensors and Actuators. 1997. V. 2. P. 1257–1258.
- 3. Terry S.C., Jerman J.H., Angell J.B. A gas chromatographic air analyzer

- fabricated on a silicon wafer // IEEE Trans. on Electron Devices. 1979. V. 26, I. 12. P. 1880–1886.
- 4. Knudsen M. Eine Revision der Gleichgewichtsbedingung der Gase. Thermische Molekularströmung // Ann. der Phys. 1910. Bd. 31, Nr. 9. S. 205–229.
- 5. S. Varoutis, D. Valougeorgis, F. Sharipov. Rarefied Gas Flow through Tubes of Finite Length. In the Proceedings of the 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. 2008. AIP Conf. Proc. 1084, pp. 1111-1116.
- 6. Titerev. Efficient Deterministic Modelling of Three-Dimensional Rarefied Gas Flows. Communications in Computational Physics, 2012.
- 7. www.geuz.org/gmsh/
- 8. Черемисин Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. Т. 357. № 1. С. 53-56. 1997
- 9. Черемисин Ф.Г. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // ЖВМ и МФ.Т. 46 № 2, С.329-343. 2006
- 10. Tcheremissine F.G. Solution of the Boltzmann Kinetic Equation for Low Speed Flows //Transport Theory and Statistical Physics. Vol. 37, N.5, pp. 564 575, 2008
- 11. www.gnuplot.info

УДК 533 6.011

# М.М. Кузнецов<sup>1,2</sup>, С.В. Матвеев<sup>2</sup>, Л.В. Смотрова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет)
<sup>2</sup> Московский государственный областной университет

# ПОСТУПАТЕЛЬНО НЕРАВНОВЕСНЫЙ ПИРОЛИЗ В СИЛЬНО ДИСПЕРГИРОВАННЫХ СМЕСЯХ ГАЗОВ

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

*Ключевые слова*: Ключевые слова: кинетика, уравнения, неравновесный, химический ,реакция, ударная волна, распределение, молекулярный.

### M. Kuznetsov, S. Matveev, L. Smotrova

<sup>1</sup>Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

<sup>2</sup>Moscow State Regional University

# FORWARD NON-EQUILIBRIUM PYROLYSI IN THE STRONGLY DISPERGATED MIXTURES OF GASES

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

*Keywords:* kinetic, equation, nonequilibrium, chemical, reaction shock wave, distribution, molecular.

Возможность получения материалов с заданными свойствами (нанотрубки, ультрадисперсные алмазы и т.д. [1]), по-прежнему, поддерживает интерес к исследованию высокотемпературного пиролиза газообразных соединений в ударных волнах. При этом одним из, теоретически до конца не выясненных вопросов, остается вопрос об удобных в эксперименте, критериях учёта поступательной неравновесности внутри фронтов ударных волн.

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

В последние годы в связи с развитием нанотехнологий наблюдается повышенный интерес к возможности получения углеродо- и метало- содержащих наночастиц с заданными свойствами (фуллерены, нанотрубки, карбины, ультра-дисперсные алмазы и т.д.) в высокотемпературных газовых реакциях за ударными волнами. Ударные волны являются также надежным средством экспериментального исследования кинетических механизмов формирования углеродных частиц вследствие пиролиза углеводородов в ударных трубах. В настоящее время в результате таких исследований разработано несколько кинетических моделей, которые с различной степенью детализации позволяют осмысливать экспериментальные данные о кинетике сажеобразования. В частности, в одной из таких моделей [2] предлагается в качестве сажеобразующей системы использовать смеси, содержащие бикарбонил углерода (С<sub>3</sub>О<sub>2</sub>). Как показано авторами [2], преимущества подобной системы по сравнению с традиционными заключаются в том, что при пиролизе исходных молекул в ударных волнах сразу образуется углеродный пар, а не промежуточные молекулярные соединения, длительно распадающиеся до атомов углерода через сложную систему цепных реакций. В конечном счете именно это обуславливает более эффективное образование конденсированных частиц углерода при пиролизе в ударных волнах. Качественная картина подобного кластерообразования сводится к тому, что его скорость лимитируется темпом распада исходного материала. В связи с этим определенный интерес представляет неисследованный до сих пор вопрос о влиянии поступательной неравновесности на скорость распада исходного материала не за фронтом ударной волны, как это имеет место во всех известных работах, а непосредственно в ее фронте.

Как оказалось, несмотря на все разнообразие систем активированных химических реакций, эффект высокоскоростной поступательной неравновесности в главном асимптотическом приближении (при значительном превышении кинетической энергии молекул над энергией их теплового движения) может быть учтен универсальной формулой, включающей все основные физические факторы, определяющие этот эффект.

Наиболее сложной составляющей в аналитическом выражении функции распределения пар молекул в ударной волне (при использовании бимодальной аппроксимации Тамма-Мотт-Смита) является т.н. «перекрестная» мода  $G_{ii}^{(neq)}$ 

Для удобства аналитического исследования выражение для функции  $G_{ij}^{(neq)}$  удобно записать в безразмерной форме, перенормировав, полученное ранее в работе [3] выражение для  $G_{ij}^{(neq)}$  на характерную величину тепловой скорости молекул  $V_T$ , связанную с эффективной «поперечной» температурой  $T_{ij}^{\perp}$  в смеси идеальных газов с компонентами ( i,j ).

Это выражение, нормированное на единицу, т.е.  $\int\limits_0^\infty G_{ij}^{(neq)} d\zeta = 1$  , имеет следующий вид:

$$G_{ij}^{(neq)} = A_{ij}^{(neq)} (\Delta V_{ij})^{-\frac{1}{2}} \left\{ \exp[-V_{ij}(\zeta - \eta)^{2}] \cdot \exp(-\zeta_{+}^{2}) \cdot Eff(\zeta_{+}) + \exp[-V_{ij}(\zeta + \eta)^{2}] \exp(-\zeta_{-}^{2}) Eff(\zeta_{-}) \right\}$$

$$\tag{1}$$

Здесь

$$\begin{split} A_{ij}^{(neq)} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} V_{ij} \quad V_{ij} = T_{ij}^{\perp} / T_{ij}^{\prime\prime} \\ T_{ij}^{\prime\prime} &= (T_i^{\prime\prime} m_j + T_j^{\prime\prime} m_i) / m_i + m_j \quad \Delta V_{ij} = 1 - V_{ij} \quad \zeta = g_{ij} V_T^{-1} \\ V_T &= \sqrt{\frac{2kT_{ij}^{\perp}}{\mu_{ij}}} \quad , T_{ij}^{\perp} = (m_i T_j^{\perp} + m_j T_i^{\perp}) / (m_i + m_j) \,, \quad \mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j) \end{split}$$

k — постоянная Больцмана.

 $\boldsymbol{g}_{ij}$  - скорость относительного движения молекул с массами  $m_{\mathrm{i}}$  и  $m_{\mathrm{j}}$ ,

$$\eta_{ij} = U_{ij}V_T^{-1}$$

 $U_{\rm ij}$  - средне- массовая макроскопическая скорость относительного движения континуумов смеси газов сортов і иј,  $U_{\rm ij} = U_{\rm i} - U_{\rm j}$ 

$$\zeta_{\pm ij} = \sqrt{\Delta V_{ij}} \zeta \pm \eta_{ij} V_{ij} / \sqrt{\Delta V_{ij}}$$

Erfi(x) - интеграл вероятности мнимого аргумента^

$$Erfi(x) = -iErfi(ix), i^{2} = -1$$
$$Erfi(x) = \int_{0}^{x} \exp(t^{2})dt$$
 [4]

(В дальнейшем для удобства записи формул индексы i и j , будут опущены).

Важно отметить, что параметры  $V_{ij} \equiv V$  и  $\Delta V_{ij} \equiv \Delta V$  , как по-казывают численные расчеты ударной волны [5-7] и эксперимент [8], оказываются существенно меньше единицы.

Это обстоятельство позволяет в целях построения максимально упрощенной и наглядной аналитической оценки эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности применить асимптотический подход к дальнейшему анализу распределения пар молекул (1), (где  $G_{ij}^{(neq)} \equiv G^{(neq)}$ ). Полагая величину  $\Delta V$  асимптотически малой  $\Delta V \rightarrow 0$ , получим, что аргументы  $\zeta_{\pm}$  в выражениях для интегралов вероятности мнимого аргумента становятся асимптотически большими по сравнению с единицей.

$$\zeta_+ >> 1$$
 , т.к. величина  $(\eta V \big/ \sqrt{\Delta V})$  при

$$\Delta V \rightarrow 0$$
 ,  $\eta \approx 1$  ,  $V \approx 1$  (2)

асимптотически стремится к бесконечности.

Важно отметить, что предельный переход  $(\eta V/\sqrt{\Delta V}) \to \infty$  возможен не только в случае (2), но и в случае

$$\eta >> 1$$
,  $\Delta V \approx 1$ ,  $V \approx 1$  (3)

что физически соответствует большим значениям макроскопической скорости «U» относительного движения континуумов газов сортов і и j, сталкивающихся в ударной волне, по сравнению со скоростью теплового движения  $V_{\scriptscriptstyle T}$ 

Асимптотическое условие (2) реально выполняется в однокомпонентных или релеевских смесях газов с большим преобладанием концентрации легкой компоненты  $n_1$  над концентрацией  $n_h$  тяжелой, при  $n_1 >> n_h$  и  $m_1 << m_h$  [5].

Случай (3) наиболее интересен для рассматриваемой теории, т.к. эффект высокоскоростной поступательной неравновесности в ударной волне был обнаружен при наличии высокопороговых процессов электронного возбуждения молекул [9 - 11] или их высокопороговой диссоциации, лимитирующей времена рождения активных радикалов в реакциях горения [12].

В обоих случаях, используя при  $\zeta >> 1$  связь функций  $Erfi(\zeta)$  с вырожденной гипергеометрической функцией  $\hat{O} = \left(\frac{1}{3}, \frac{3}{2}; \zeta^2\right)$  [4], т.е.

$$Erfi(\zeta) = \zeta \hat{O}\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \zeta^2\right)$$
 (4)

Получим:

$$Erfi(\zeta) \approx (1/2\zeta) \exp(\zeta^2)$$
 (5)

Функция распределения пар молекул (1) в силу соотношения (5) преобразуется к виду:

$$G^{(neq)} = A^{(neq)} (\Delta V)^{-1/2} \left\{ \exp\left[-V(\zeta - \eta)^2\right] (2\zeta_+)^{-1} + \exp\left[-V(\zeta + \eta)^2\right] (2\zeta_-)^{-1} \right\}$$
(6)

Наличие выражения (6) позволяет получить, в частности, аналитические представления констант поступательно неравновесных высокопороговых химических реакций  $K^{(neq)}$  для наиболее часто используемых в практических приложениях моделей сечения процессов  $\sigma(\zeta)$ , когда эти сечения зависят только от энергии относительного движения сталкивающихся молекул и не зависят от их внутренних (квантовых) состояний (раздел 9 [13]):

$$K^{(neq)} = \int_{\zeta_0}^{\infty} G^{(neq)} \sigma(\zeta) d\zeta \tag{7}$$

 $K^{(neq)}=\int\limits_{\zeta_0}^{\infty}G^{(neq)}\sigma(\zeta)d\zeta \tag{7}$  Здесь  $\zeta_0=\sqrt{\frac{\mu E_0}{2kT^{\perp}}}$  ,  $E_0$  - энергия активации неупругих соударений

частиц компонентов «i» и «j» смеси газов.

Проведенный анализ аналитических свойств эллипсоидальной функции распределения пар молекул позволяет сформулировать основную концепцию существования эффекта высокоскоростной тельной неравновесности в ударных волнах. Она заключается в том, что для реализации этого эффекта число пар высокоскоростных молекул, способных преодолеть энергетический барьер активации, должно соответствовать «куполу» эллипсоидального распределения пар молекул, а не его «хвосту», как в поступательно равновесном случае.

Для моделей сечений бинарных столкновений с энергетическим порогом (раздел 9.[13])

эллипсоидальное распределение пар молекул (6) позволяет учесть эффект высокоскоростной поступательной неравновесности универсальной формулой, включающей все основные физические факторы, определяющие этот эффект.

Эта формула для отношения констант скоростей поступательного неравновесных  $K_{ij}^{(neq)}$  и равновесных  $K_{ij}^{(eq)}$  реакций имеет следующий вид :

$$K_{ij}^{(neq)}/K_{ij}^{(eq)} \approx \exp\left[Q_{0}^{ij}/T_{ij} - (T_{ij}/T_{ij}^{\parallel})\left(\sqrt{Q_{0}^{ij}/T_{ij}} - \sqrt{Q_{u}^{ij}/T_{ij}}\right)^{2}\right]$$

$$Q_{0}^{ij} = E_{0}^{ij}/k \qquad Q_{u}^{ij} = \mu_{ij}u_{ij}^{2}/2K \quad 3T_{ij} = T_{ij}^{\parallel} + 2T_{ij}^{\perp}$$

$$T_{ij} = (m_{i}T_{j} + m_{j}T_{i})/(m_{i} + m_{j})$$

$$T_{ij}^{(\alpha)} = (m_{i}T_{j}^{(\alpha)} + m_{j}T_{j}^{(\alpha)})/(m_{i} + m_{j}) \qquad \alpha = \parallel, \perp$$
(8)

 $E_0^{ij}\,$  - энергия активации химической реакции компонентов смеси i и j,

 $\mu_{ij}$ ,  $U_{ij}$  - приведенная масса и относительная средне - массовая скорость компонентов i и j, k - постоянная Больцмана,  $m_i$  и  $m_j$  - массы молекул компонентов смеси.

В заключение на основе формулы (8) были проведены оценки длин релаксации за ударной волной в калибрах длины пробега  $l_S$ , для аррениусовского пиролиза  $-l_A \ / \ l_S$ , и поступательно-неравновесного  $-\ l_u \ / \ l_S$ , для четырех типичных реакций пиролиза

- 1.  $Fe(CO)_5 + M \rightarrow Fe + 5CO + M$
- 2.  $C_3O_2 + M \rightarrow C + 2CO + M$
- 3.  $CH_4 + M \rightarrow H + CH_3 + M$
- 4.  $C_2H_4 + M \rightarrow H + CH_3^* + M$

В реакциях распада углеродосодержащих веществ: пентокарбонила (Fe(CO)<sub>5</sub>), недокиси углерода (C<sub>3</sub>O<sub>2</sub>), метана (CH<sub>4</sub>) и этилена (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) в качестве относительно легкого газа разбавителя М были соответственно выбраны: гелий Не (в случаях 1,3,4) и аргон (в случае 2). Типичное процентное соотношение «тяжелого» углеродосодержащего компонента и «легкого» компонента разбавителя составляло 1% к 99%. Значения искомых параметров  $l_A/l_S$  и  $l_u/l_S$  представлены в таблице, где величина

А,  $\frac{c M^3}{MOЛb \cdot c}$  – т.н. частотный множитель химической реакции. Давление

за скачком  $P_S$  и концентрация углеродосодержащих молекул соответственно равнялись  $P_S = 10^5 \, \mathrm{\Pi a}, \ n_B = 10^{14} \, \mathrm{cm}^{-3}.$ 

Данные, представленные в табл.1, свидетельствуют о том, что поступательно-неравновесный пиролиз эффективно происходит уже на длинах, сравнимых с толщиной ударной волны в релеевском газе

$$\Delta \approx \frac{m_{\beta}}{m_{\alpha}} l_{S}$$

Таблица 1 Оценка релаксации в поступательном неравновесном пиролизе

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

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Ч. Пул-мл., Ф. Оуэнс. Нанотехнологии М.: Техносфера, 2010 336 с
- 2. Вагнер Х.Г., Власов П.А., Дерге К.Ю., Еремин А.В., Заслонко И.С., Танке Д. Кинетика образования кластеров углерода в процессе пиролиза C<sub>3</sub>O<sub>2</sub> // Кинетика и катализ. 2001. Т.42, №5. с. 645-656.
- 3. Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Смотрова Л.В. Эффект высокоскоростной поступательной неравновесности в бимодальной ударной волне. Вестник МГОУ. Сер. № «Физика-математика», 2012, №2 с.108-115.
- 4. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.Н. Интегралы и ряды , Наука, Гл. ред. Физ-мат. лит., 1981 г.
- 5. Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л. Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях. Изв. АН СССР, Механика жидкостей и газа. -1990. №2, с. 144-150.
- 6. Bird G.A., Shock wave structure in Gas Mixtures. Proceed. of the 14-th. Int. Symp. on Rar. Gas Dyn., ed. by H.Oguchi, V.1, 1985, pp. 175-182.

- 7. В.В. Аристов , Черемисин Ф.Г.. Прямое численное решение кинетического уравнения Больцмана. Изд.ВЦ РАН, М., 1992 г.,187 с.
- 8. Muntz E.P., Harnett L.N. Molecular Velocity Distribution Function Measurement in a Normal Shock Wave. The Physics of Fluids, V.12, No 10, 1969, pp.2027-2035
- 9. Генич А.П., Куликов С.В., Соловьев М.Е., Черешнев С.Л. Влияние поступательной неравновесности в ударной волне на скорость элементарных молекулярных процессов. Фундаментальные проблемы физики ударных волн. Тезисы докладов т.1., Часть 2, 1987 г., с. 240-242.
- 10. Козлов П.В., Лосев С.А., Романенко Ю.В. Поступательная неравновесность во фронте ударной волны в смеси аргона и гелия. Письма в ЖТФ, 2000, т.26, вып. 22, с.69-75
- 11. Великодный В.Ю., Емельянов А.В., Еремин А.В., Неадиабатическое возбуждение молекул йода в зоне поступательной неравновесности ударной волны
- 12. Диваков О.Г., Еремин А.В., Зиборов В.С., академик В.Е. Фортов. Неравновесное воспламенение кислородно-водородных смесей во фронте слабой ударной волны. Доклады РАН ,т.373,№4, 2000,с. 487-490.
- 13. Физико-химические процессы в газовой динамике. т.1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме / под ред. Г.Г. Черного и С.А. Лосева. М.: Изд. Моск. ун-та. 1995. 350 с.

УДК 533.6.071.08.632.57

# И.А. Амелюшкин<sup>1</sup>, А.Л. Стасенко<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Центральный аэрогидродинамический институт имени проф. Н.Е. Жуковского (ЦАГИ)

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) (МФТИ);

## СТОХАСТИКА И ДЕТЕРМИНИЗМ ДВИЖЕНИЙ КАПЕЛЬ ВОДЫ В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ АЭРОЗОЛЬНОМ ПОТОКЕ, ОБТЕКАЮЩЕМ ТВЕРДОЕ ТЕЛО

Аннотация. Исследовано влияние броуновского движения частиц и турбулентных пульсаций несущего газа на траектории малых частиц аэродисперсного потока и на коэффициент их захвата обтекаемым телом. Ключевые слова: броуновское рассеяние частиц, турбулентные пульса.

# I Amelysuhkin<sup>1</sup>, A. Stasenko<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Central Aerohydrodynamic Institute (TsAGI); <sup>2</sup>Moscow Institute of Physics and Technology (State University) (MIPT);

## STOCHASTICS AND DETERMINISM OF WATER DROPLET MOTIONS IN A SUPERCOOLED AEROSOL FLOW WHICH CIRCUMFLUENTS A SOLID BODY

*Abstract.* Influence of the Brownian particle motion and carrying gas turbulent pulsations on trajectories of small particles of the aerosol flow and on the circumfluent solid body caption ratio was investigated.

*Keywords*: Brownian scattering of particles, turbulent pulsation, capture ratio, streamlined body icing

Для понимания физики обледенения тела в переохлажденном воздушно-капельном потоке чрезвычайно важно адекватное моделирование взаимодействия отдельной капли с поверхностью обтекаемого объекта. Процессы, предшествующие попадание микрокапель на поверхность тела и их взаимодействие с этой поверхностью, были исследованы теоретически и экспериментально в работах [1-5]. В этих процессах важную роль должны играть наночастицы воды, присутствующие в большом количестве во влажной переохлажденной атмосфере даже в предконденсационный период, когда еще не образовались облачные макрокапли. Очевидно, что если такие наночастицы покроют поверхность летательного аппарата пленкой воды даже в несколько молекулярных слоев, то физикомеханические свойства поверхности уже не будут играть роль в дальнейшем процессе обледенения. Между тем ясно, что на поверхность обтекаемого тела могут попасть только достаточно крупные капли, траектории которых отличаются от линий тока газа. Вероятность попадания очень мелких капель на поверхность тела должна существенно зависеть от стохастики турбулентных пульсаций газа в пограничном слое и от броуновского блуждания самих наночастиц. Рассмотрению этих процессов и посвящена настоящая работа.

Для оценки скорости соударения с поверхностью рассмотрим модельную задачу о приближении наночастицы к твердому телу, начиная с некоторого конечного расстояния. Поскольку (в случае нормальных условий) средняя длина свободного пробега  $l_m$  молекулы воздуха много больше диаметра наночастицы ( $\mathrm{Kn} = l_m / 2a_p$ ), то для оценки времени релаксации ее скорости можно использовать выражение для случая сво-

бодномолекулярного обтекания: 
$$au_V \sim \frac{
ho_p}{
ho} \frac{a_p}{< c>}$$
, где  $ho$  и  $ho_p$  – плотность

газа и материала частицы соответственно; < c > - средняя тепловая скорость молекул газа. Таким образом, торможение «осредненного» движе-

ния такой частицы по нормали к поверхности происходит по закону

$$V_n = V_n^0 \exp\left[-\frac{t}{\tau_V}\right].$$

Будем считать, что на это движение наложены пульсации частицы, связанные с турбулентностью газа  $V_p^{\rm Turb}$  и броуновским движением. (Термодинамически равновесная скорость хаотических тепловых движений наночастицы равна  $V_p^{\rm Br} = \frac{< c>}{\sqrt{N_m}} = \sqrt{\frac{8 {\rm k_B} T}{\pi m_0 N_m}}$ ).

На основании работ [6–9] примем следующие выражения для масштабов этих скоростей:  $V_p^{\text{Turb}} = \frac{V'}{\sqrt{1+\frac{\tau_V}{\tau_t}}}, \quad V_p^{\text{Br}} = \frac{< c>}{\sqrt{N_m}} = \sqrt{\frac{8 \text{k}_B T}{\pi m_0 N_m}} \,, \quad \text{где}$ 

характерное время турбулентных пульсаций равно  $\tau_t = 0.19~k/\epsilon$ ;  $<\!c\!>$  средняя тепловая скорость молекул водяного пара,  $N_m$  — число молекул воды в капле,  $V' = \sqrt{2k}$  — средняя скорость турбулентных пульсаций, k,  $\epsilon$  — удельная кинетическая энергия турбулентных пульсаций и скорость ее диссипации соответственно,  $m_0$  — масса молекулы воды.

Таким образом, суммарную скорость наночастицы (рис. 1) можно моделировать выражением:

$$\mathbf{V}_{p} = \mathbf{V}_{p}^{0} \exp \left[ -\frac{t}{\tau_{R}} \right] + \frac{\mathbf{V'}}{\sqrt{1 + \frac{t}{\tau_{R}}}} \cdot \operatorname{rand} \left[ \frac{\mathbf{V'}}{|\mathbf{V'}|} \right] + \sqrt{\frac{8k_{B}T}{\pi m_{0}N_{m}}} \cdot \operatorname{rand} \left[ \frac{\mathbf{V}_{p}^{\mathbf{Br}}}{|\mathbf{V}_{p}^{\mathbf{Br}}|} \right],$$

где rand — символ случайного единичного вектора. Длительность воздействия турбулентной пульсации на частицу имеет порядок  $\tau_t$ . Для броуновских пульсаций в работе [6] в предположении гармонических турбулентных пульсаций (частоты  $\omega_t$ ) приведено выражение [8] для степени увлечения частиц ( $\tau_V^{\rm St}/\tau_t << 1$ )

$$\frac{V_p^{\text{Turb}}}{V'} = \frac{\sin(\omega_t t - \varphi)}{\sqrt{1 + (\omega_t \tau_V)^2}}.$$

Однако, для осредненной (по пульсациям газа) степени увлечения частиц имеет место зависимость [9]:

$$\frac{\langle (V_p^{\text{Turb}})^2 \rangle}{\langle V^2 \rangle} = \frac{1}{1 + \tau_V^{\text{St}} / \omega_E},$$

где  $\omega_E \approx \omega_L = \text{const} - \text{эйлерова}$  и лагранжева частоты. Верхний индекс St означает стоксовский режим обтекания. В частности, коэффициент диффузии частиц связан с коэффициентом диффузии газа соотношением

$$D_p^{\text{Turb}} = \frac{D_{\text{Turb}}}{1 + \tau_V \omega_E}$$

Аналогичное выражение приведено в [7]

$$\frac{\langle (V_p^{\text{Turb}})^2 \rangle}{\langle V'^2 \rangle} = \frac{1}{1 + \tau_V / \tau_t},$$

где  $\tau_t$  – интегральное время турбулентных пульсаций несущей среде.

На рис. 2 представлен фрагмент характерных стохастических траекторий частиц различной массы на отрезке горизонтальной оси 0 < x < 10 мкм. Обратим внимание, что масштабы осей отличаются на три порядка. Видно легко объяснимое уменьшение поперечных отклонений с увеличением радиуса частицы  $a_p$ . Оно коррелирует с зависимостью прицельного параметра от  $a_p$ , представленной на рис. 3 слева: чем массивнее частицы, тем меньшее влияние оказывает на ее движение броуновское движение и турбулентные пульсации. Начиная с некоторого размера, частицы всё слабее увлекаются несущим газом, обтекающим тело, в результате чего растет орошаемая ими поверхность (рис. 3, центральная часть). Однако, с дальнейшим ростом размера капли возникает ее сплющивание, что приводит к росту коэффициента сопротивления (см. зависимость  $C_D$  и Stk от числа Вебера We [10]) и уменьшению площади орошения, и, следовательно, степени ее увлечения несущим газом. Этот эффект был получен в работе [1].

Определение коэффициента взаимодействия частиц с обтекаемым телом в дисперсном потоке может быть связано как с предельным углом орошения  $\theta$ , так и прицельным расстоянием  $b_{\rm max}$ . В настоящей работе предложено выражение

$$\left(\frac{b_{\text{max}}}{R}\right)^2 = \left(\frac{\text{Stk}}{1 + \text{Stk}}\right)^2 + \frac{2D_t}{Ru_{\infty}} \frac{1}{\sqrt{1 + \text{Stk} \frac{\tau_R}{\tau_t}}} + \frac{2D_{\text{Br}}}{Ru_{\infty}}.$$

Здесь R — радиус цилиндра, моделирующего переднюю кромку элемента конструкции летательного аппарата;  $u_{\infty}$  — скорость набегающего потока;  $\tau_R = \frac{8}{3} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{a_p}{u_{\infty}} \frac{1}{C_D}$  — время релаксации частицы;  $C_D$  — коэффициент

сопротивления частицы, который при малых числах Рейнольдса  $\mathrm{Re_p}$  ее обтекания стремится к  $C_D^\mathrm{St} = \frac{24}{\mathrm{Re}_p}$ , где число Рейнольдса частицы в несу-

щем ее газе  ${\rm Re}_p = \frac{{
m \rho} 2 a_p u_\infty}{\mu_m}$ , (в общем случае коэффициент сопротивления

частицы рассчитывался по формуле Хендерсона [11]);  $\mu_m$  – молекулярная вязкость несущего газа;  $D_t$  – коэффициент турбулентной диффузии, который связан с энергией турбулентных пульсаций газа k и скоростью их диссипации  $\epsilon$  соотношением  $D_t = \frac{0.19k^2}{\epsilon}$ ; в расчетах этот коэффициент был принят равным  $10^{-3}$  м²/с;  $\tau_t$  – характерное время турбулентных пульсаций несущего газа, которое в расчетах было принято равным 0.01 с;  $D_{\rm Br} = \frac{k_{\rm B}T}{\mu_m a_p}$  – коэффициент диффузии за счет броуновских блужданий;

Stk – параметр, характеризующий скоростную неравновесность дисперсного потока.

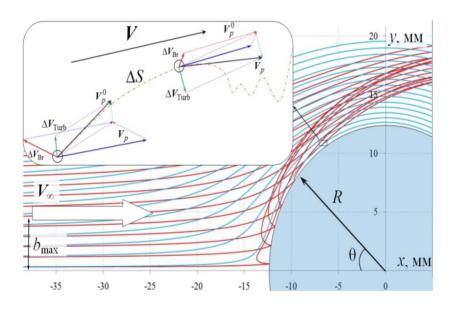


Рис. 1. Схема взаимодействия частицы с потоком воздуха и обтекаемым телом

В настоящей работе введено модифицированное число Стокса, которое зависит от режима обтекания частицы:

$$Stk = Stk_0 \frac{C_D}{C_D^{Stk}} \exp(-0.03 \cdot We),$$

где 
$$W_e = \frac{\rho_f 2a_p u_\infty^2}{\sigma_I}$$
 — число Вебера. Входящий в предпоследнюю форму-

лу экспоненциальный множитель приводит к немонотанности зависимости области поверхности, орошаемой частицами от радиуса частицы и числа Стокса (рис. 3, кривые 5–7);

$$\mathrm{Stk}_0 = \frac{2\rho_p u_\infty}{9\mu_m R} a_p^2$$
 — число Стокса при вязком обтекании частицы контину-

альной средой при малых значениях  $Re_p$ ;

 $\sigma_l$  – поверхностное натяжение капли;

$$\sigma_l$$
 – поверхностное натяжение капли; 
$$\mathrm{Re} = \frac{\rho_f u_\infty R}{\mu_m} - \mathrm{xарактерноe} \ \mathrm{числo} \ \mathrm{Peйнольдсa} \ \mathrm{набегающегo} \ \mathrm{потокa}.$$

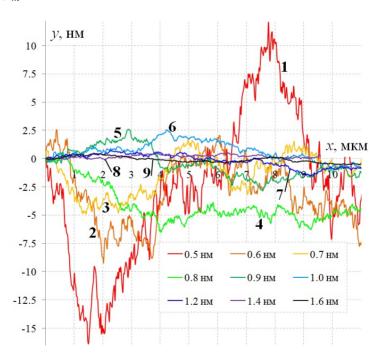


Рис. 2. Стохастика траекторий малых частиц различных радиусов с учетом броуновского движения и турбулентных пульсаций несущего газа;

кривые 1÷7 соответствуют радиусам частиц 1÷1.6 нм  $\hat{c}$  шагом  $\Delta a_{p} = 1$  нм;  $u_{\infty} = 100$  м/с

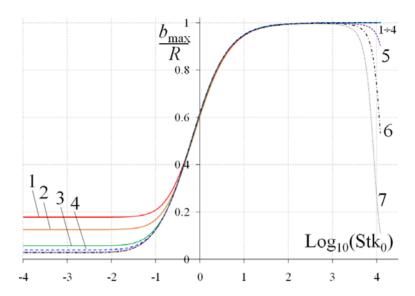


Рис. 3. Зависимость предельного прицельного параметра  $b_{\rm max}$  орошения (коэффициента захвата) поверхности цилиндра от числа Стокса: кривые 1÷7 соответствуют значениям скорости потока  $u_{\infty}$  5, 10, 50, 100, 175, 200, 225 м/с

Для набора параметров, характерных для модельных экспериментов в аэрохолодильной установке [5], имеем:

$$Stk_0 = \frac{2}{9} \frac{\rho_p a_p^2}{\mu_f} \cdot \frac{u_\infty}{2R_w} \ge Stk^* \approx 0.0417 \cdot$$

Последнее критическое значение получено для потенциального обтекания шара. Например, для радиуса  $R=10^{-2}$  м и скорости потока 100 м/с соответствующее критическое значение радиуса частицы равно  $a_{\rm min}\approx 750$  нм. Это значение на порядок превосходит длину свободного пробега молекулы в воздухе при нормальных условиях, что оправдывает использование характерного времени стоксовой релаксации для случая континуального обтекания частицы. Таким образом, в рассмотренном примере без учета стохастики траекторий на обтекаемый цилиндр могли бы попасть только частицы с радиусом более 0.75 мкм. Газодинамический «фон», на котором движутся частицы перед столкновением с обтекаемым телом, может быть численно исследован при помощи алгоритмов, приведенных в монографии [12].

#### Заключение.

Показано, что без учета турбулентных пульсаций и броуновского движения на поверхность обтекаемого тела могут попасть только достаточно крупные капли аэрозольного потока. Предложено выражение для прицельного расстояния, позволяющее оценить влияние стохастических движений наночастицы, приводящих ее к столкновению с обтекаемым цилиндром.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 13-01-00766.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Стасенко А.Л., Толстых А.И., Широбоков Д.А. К моделированию оледенения самолёта: Динамика капель и поверхность смачивания // Математическое моделирование, 2001. Т. 13, № 6, с. 81–86.
- 2. Амелюшкин И.А., Гринац Э.С., Стасенко А.Л. Кинетика молекулярных кластеров и гидротермодинамика капель при обледенении летательных аппаратов // Вестник МГОУ. Сер. «Физика Математика». 2012. № 2. С. 153–161.
- 3. Гринац Э.С., Миллер А.Б., Потапов Ю.Ф., Стасенко А.Л. Экспериментальное и теоретическое исследование процессов обледенения наномодифицированных супергидрофобных и обычных поверхностей // Вестник МГОУ. «Физика-Математика». 2013. № 3. С. 82–92.
- 4. Amelyushkin I.A., StasenkoA.L. Dynamics of molecules in a supercooled water nanoparticle during the ice accretion on the aircraft surface // EU-CASS-Paper. Flight Physics, 2014, V .7.
- 5. Miller A.B., Potapov Yu.F., Stasenko A.L. Experimental and theoretical investigation of aircraft icing in the case of crystal and mixed-phase flow // 29<sup>th</sup> Congress of the International Council of the aeronautical sciences. September 7–12, 2014. St-Peterburg, Russia. Paper No 0576.
- 6. Crowe C.T. On models of turbulence modulation in fluid–particle flows // Intern. J. Multiphase Flow. 2000. Vol. 26. P. 719–727.
- Sinonin O. Eulerian formulation fro particle dispersion in turbulent twophase flows. In: Sommerfeld M., Wenerberg D. (Ed.) // Proc. 5 th Workshop on Two-Phase Flow Predictions. 1990. – Erlangen, Germany. P. 156 – 166.
- 8. Медников Е.Т. Турбулентный перенос и осаждение аэрозолей // М.: Наука. 1981. 174 с.
- 9. Friedlander S.K. Behavior of suspended particles in a turbulent fluid // AIChE J. 1957. Vol. 3, No 3. P. 381–385.
- 10. Раушенбах Б.В. и др. Физические основы рабочего процесса в камерах сгорания воздушно-реактивных двигателей / М.: Машиностроение. 1964.
- 11. Henderson C. B. Drag coefficients of spheres in continuum and rarefied flows // AIAA J. 1976. V. 14, N 6. P. 707 –708.

12. Башкин В.А., Егоров И.В. Численное моделирование динамики вязкого совершенного газа / М.: Физматлит. – 2012. – 372 с.

УДК 539.2

# **В.М.** Кузнецов<sup>1</sup>, К. Б.Терешкина<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева (РХТУ им. Д.И. Менделеева)

<sup>2</sup>Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН (ИХФ РАН)

### О ВЕЩЕСТВАХ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ

Аннотация. Обнаружено, что межмолекулярные колебательные спектры малых ван-дер-ваальсовых кластеров, рассчитанные методами *ab initio*, имеют степенную зависимость от частоты, подобно кристаллическим телам. Однако показатели  $d_f$  их пространственной размерности, в отличие, например, от трёхмерного волнового пространства  $d_f$ =3 (закон Дебая), принимают значения  $d_f$ <1,  $d_f$ =0 и даже могут быть отрицательными. Спектров с размерностью  $d_f$ <0 у веществ ранее обнаружено не было. *Ключевые слова*: димеры, тримеры, межмолекулярные спектры, отрицатель

# V. Kuznetsov<sup>1</sup>, K. Tereshkina<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>D. Mendeleyev University of Chemical Technology of Russia <sup>2</sup>Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences

# ABOUT MATERIALS WITH NEGATIVE DIMENSION OF VIBRATIONAL SPECTRA

Abstract. It was found that intermolecular vibrational spectra of Van der Waals clusters, calculated by ab initio methods have power-law dependence on the frequency, like crystalline bodies. However, the argument  $d_f$  of their spatial dimension, in contrast, for example, from the three-dimensional wave space  $d_f = 3$  (the Debye law), take the values  $d_f < 1$ ,  $d_f = 0$ , and may even be negative. Substances with dimension of spectra  $d_f < 0$ , previously were not found. Keywords: dimers, trimmers, intermolecular spectra, negative dimension

Введённая в [1,2] фрактальная модель континуальной среды, использовалась ранее для решения задач низкотемпературной решёточной теплоёмкости и устойчивости твёрдотельных структур по Линдеману в

предположении, что показатель пространственной размерности колебательного спектра веществ  $d_f$  может изменяться в диапазоне  $0 < d_f < +\infty$ , включая целые и дробные значения. Функции плотности состояний колебательного спектра в этой модели имеют вид:

$$g(\omega) = \frac{N^*}{\omega \ln(\omega_{\text{max}}/\omega_{\text{min}})} \qquad \text{ДЛЯ} \quad d_f = 0$$

$$g(\omega) = \frac{N^* d_f \omega^{d_f - 1}}{\omega_{\text{max}}^{d_f} - \omega_{\text{min}}^{d_f}} \quad \text{ДЛЯ} \quad d_f \neq 0$$

где  $N^*$ — число межмолекулярных колебательных мод, а  $\omega_{\rm max}$  и  $\omega_{\rm min}$  - частотные граница колебательного спектра. В случае кластеров  $N^*=6N-6$  либо  $N^*=5N-6$ , соответственно для нелинейных или линейных молекул в кластере, N — число молекул в исследуемом кластере или наноструктуре.

Для расчёта решёточной теплоёмкости используется выражение:

$$\frac{C(T)}{C_{\infty}} = \frac{d_f}{\left(\frac{\theta_H}{T}\right)^{d_f} - \left(\frac{\theta_N}{T}\right)^{d_f}} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{x^{d_f+1} e^x dx}{\left(e^x - 1\right)^2},$$
(2)

где  $x_{\min}=\theta_N/T$ ,  $x_{\max}=\theta_H/T$ ,  $C_{\infty}$  - значение теплоёмкости, соответствующее закону Дюлонга и Пти,  $\theta_H=\frac{\hbar\,\omega_{\max}}{k_B}$ ,  $\theta_N=\frac{\hbar\,\omega_{\min}}{k_B}$ ,  $\hbar$ ,  $k_B$  — постоянные

Планка и Больцмана.

Малые размерности колебательного спектра  $d_f \sim 0.3$ -0.4 были обнаружены ранее в кластерах воды  $(H_2O)_{10}$ - $(H_2O)_{22}$  (N = 10-22) [2], а нулевая размерность  $d_f = 0$  в димерах:  $(N_2)_2$ ,  $(CCl_4)_2$ ,  $(SF_6)_2$  и др. [3]. Что касается отрицательных значений  $d_f$ , то они не противоречат модели (1-2), но ранее на них не обращалось внимания в связи с малыми ожиданиями существования в природе веществ с подобными спектрами. И хотя фрактальные волновые пространства и пространства с отрицательной размерностью не обладают привычной наглядностью, как одно, двух или трёхмерные, соответствующие им функции  $g(\omega)$  – это привычные степенные зависимости, которые приведены на рис. 1 (в условных единицах, когда  $N^*/\omega_{max}=1,\;\omega_{min}=10;\;\omega_{max}=100$ ). Обладают ли такими спектрами реальные вещества, можно установить по данным расчёта небольших молекулярных систем методами ab initio, основанных на решении уравнения Шрёдингера методом Хартри-Фока. При этом сначала решаются уравнения для многоэлектронных волновых функций, именуемых базисными, и определяется поверхность потенциальной энергии молекулярной системы, которая затем используется как эффективный потенциал для

ядерного гамильтониана. Этот гамильтониан содержит информацию о колебательных, вращательных и поступательных состояниях ядер.

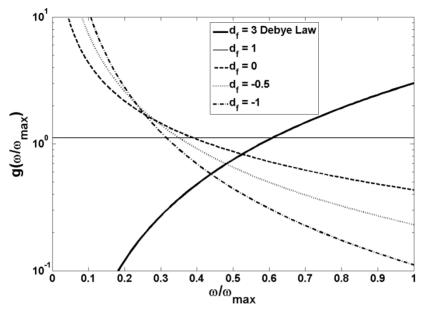


Рис. 1 Функции плотности состояний колебательных спектров

В данной работе для расчёта структуры кластеров использовался универсальный пакет квантово-химических программ FIREFLY с наборами базисных функций 6-311 G(d,p), 6-31 G(d) [4]. Для димеров, тримеров и более крупных кластеров воды использовались частотные спектры, полученные ранее методом *ab initio* в работе [5]. Результаты расчётов приведены в табл. 1.

Таблица 1. Частоты и структурные параметры спектров межмолекулярных колебаний димеров и тримеров

Димер		ω <sub>i</sub> , cm <sup>-1</sup>						$d_f$	$\theta_{H}/\theta_{N}$
$(H_2O)_2[4]$									
CCSD(T)/aVTZ	131	146	157	186	360	622	268	-0.7	4.75
CCSD(T)/aVQZ	130	146	152	186	354	619	265	-0.7	4.75
LCCSD(T)/aVT Z	117	139	143	167	325	577	245	-0.7	4.95

LCCSD(T)/aVQ Z	119	138	152	179	334	592	252	-0.7	4.95
HBB2	125	140	149	181	352	611	260	-0.7	4.9
WHBB	127	140	150	181	351	610	260	-0.7	4.8
(H <sub>2</sub> O) <sub>3</sub> [4] LCCSD(T)/aVQ Z	136 321	169 334	175 415	183 530		210 799	335	-0.5	5.9
$(D_2O)_2$	81	98	107	163	261	439	191	-0.61	5.5
$(C_2H_5OH)_2$	31	35	42	67	81	144	67	-0.66	4.5
$(CO_2)_2$	17	26	36	95			44	-0.3	5.6

Данные для димеров воды  $(H_2O)_2$  указаны с учётом различных вариантов базисных наборов, которые в результате приводят к разбросу в значениях частот колебаний  $\omega_i$  в несколько процентов. Размерность спектров определялась из условия приравнивания среднеарифметической частоты  $\overline{\omega} = \frac{1}{N^*} \sum_{i=1}^{N^*} \omega_i$  к средней частоте непрерывного спектра  $\langle \omega \rangle$  в

континуальной модели среды [1, 2]:

$$\overline{\omega} = \langle \omega \rangle = \frac{1}{N^*} \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \omega g(\omega) d\omega = \omega_{\max} \frac{d_f}{d_f + 1} \frac{1 - \left(\frac{\theta_N}{\theta_H}\right)^{d_f + 1}}{1 - \left(\frac{\theta_N}{\theta_H}\right)^{d_f}}$$
(3)

Для всех димеров и тримеров, приведённых в таблице, показатель размерности спектра  $d_f$  оказался отрицательным. Отметим, то условие непрерывности спектра  $N^* >> (\theta_H \ / \ T)^{d_f}$ , необходимое для корректного введения понятия его размерности, выполняется при низких температурах  $T << \theta_H$  для малых, а тем более отрицательных значений  $d_f$  даже для димеров ( $N^*$ =4 или 6). Проверить это условие можно, например, сопоставлением температурных кривых решёточной теплоёмкости, рассчитанных по континуальной модели (1,2) и дискретной модели, представляющей собой обычную сумму эйнштейновских осцилляторов:

$$\frac{C_E(T)}{C_{\infty}} = \frac{1}{N^*} \sum_{i=1}^{N^*} \frac{(\theta_i/T)^2 e^{\theta_i/T}}{(e^{\theta_i/T} - 1)^2}$$
(4)

где  $\theta_i = h\omega_i/\kappa_B$ 

Результаты расчётов теплоёмкости димеров воды и спирта приведены на рис. 2.

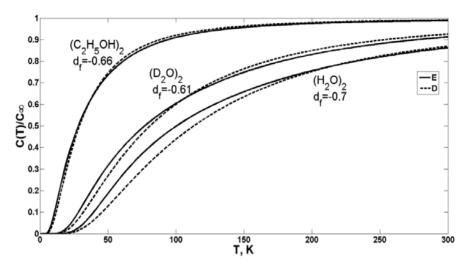


Рис.2. Температурная зависимость теплоёмкости димеров воды и спирта. Е – дискретная модель (4), D – континуальная модель (1,2).

Близость кривых во всей температурной области свидетельствует о том, что континуальное приближение можно применять к структурам, состоящим из небольшого количества частиц.

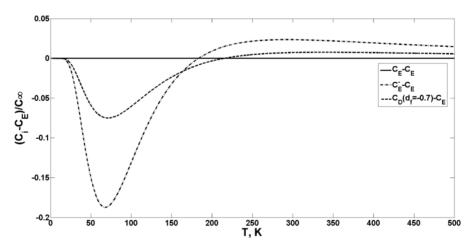


Рис. 3. Сравнение различных моделей решёточной теплоёмкости на примере димеров воды.

Отметим, что сравнительно небольшое число колебаний в кластерах позволяет сравнить результаты расчётов температурных зависимостей

теплоёмкости согласно (4) как с континуальным приближением (1,2) так и традиционным эйнштейновским по одной характерной частоте спектра, в качестве которой обычно выбирается  $\overline{\mathcal{Q}}$  [6]. На рис. 3 приведено это сравнение для димеров воды по относительной разности значений теплоёмкостей относительно модели (4). При этом разность  $C_E - C_E$  означает, что модель (4) сравнивается сама с собой,  $C_D - C_E$  - это сравнение (4) с континуальной моделью (1,2), а  $C_E^{'} - C_E$  - сравнение (4) с традиционной моделью Эйнштейна.

Размерность колебательного спектра  $d_f$  возрастает по мере увеличения частиц в кластере и переходу в макроскопическую кристаллическую фазу. Соответствующие данные для воды приведены в табл. 2.

Таблица 2. Параметры колебательных спектров различных состояний воды

Basis set	$(H_2O)_2$	$(H_2O)_3$	$(H_2O)_{10-22}$	•••	$(H_2O)_{ice}$
$d_f$	-0.7	-0.3	0.3-0.4		1.4
$\theta_{\! H}\!/\theta_{\! N}$	5	5	20-50		$\infty$

В заключение отметим, что начальное положительное, равное нулю или отрицательное значение  $d_f$  в молекулярных димерах, представляющих собой минимально возможное связанное состояние частиц в природе, зависит от ряда факторов, в частности от типа конформации, то есть, взаимного расположения молекул друг относительно друга. Так, например, у димеров метана, имеющих 12 устойчивых начальных конфигураций [7], имеются как положительные, так и отрицательные значения  $d_f$  спектров межмолекулярных колебаний.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Кузнецов В.М., Хромов В.И. Фрактальная модификация континуального приближения квантовой теории решёточной теплоемкости. // ПЖТФ. -2010. - Т. 36. - № 11. - С. 98-103.
- 2. Кузнецов В.М., Хромов В.И. О существовании макро и наноструктур с фононными спектрами малой фрактальной размерности. // ПЖТФ. -2012. Т. 38. № 11. С. 11-18.
- 3. Kuznetsov V., Tereshkina K. Fractal Continual Model of Matter for Classification of Nanostructures, Clusters and Massive Bodies. // Nanomaterials: Application & Properties, North America, 2014. http://nap.sumdu.edu.ua/index.php/nap/nap2014/ paper/view/1447/686

- 4. Granovsky A.A., Firefly version 7.1.G, http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html
- 5. Wang Y., Huang X., Shepler B., Braams B.C. and Bowman J.M. Flexible, ab initio potential, and dipole moment surfaces for water. I. Tests and applications for clusters up to the 22-mer. // J. Chem. Phys. 2011. V. 134. P. 094509
- 6. Жирифалько Л. Статистическая физика твердого тела М.: Мир, 1975, 382 с.
- 7. Chao S.W., Li A.H., Chao S.D. Molecular dynamics simulations of fluid methane properties using ab initio intermolecular interaction potentials. // J. Comput Chem. 2009. V.12. P. 1839-49.

УДК 538.953

### А.В. Гелиев, Ю.Е. Маркачев

Центральный аэрогидродинамический институт имени проф. Н.Е.Жуковского (ЦАГИ)

# КВАЗИХИМИЧЕСКАЯ КЛАСТЕРНАЯ МОДЕЛЬ РЕАЛЬНОГО ГАЗА И УРАВНЕНИЕ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА

Аннотация. В рамках квазихимической кластерной модели реального газа получено выражение эмпирических параметров уравнения состояния реального газа Ван-дер-Ваальса через константы равновесия реакций димеризации мономеров газа. Проведено сравнение полученных таким образом теоретических результатов с имеющимися экспериментальными данными для аргона.

*Ключевые слова:* уравнение Ван-дер-Ваальса, вириальное уравнение состояния, квазихимическая кластерная модель, димеризация

### A. Geliev, Yu. Markachev

Central aerohydrodynamic institute named after prof. N.E.Zhukovsky (TsAGI)

# QUASICHEMICAL CLUSTER MODEL OF REAL GAS AND VAN-DER-VAALS EQUATION

Abstract. Within quasichemical cluster model of real gas empirical parameters of Van der Waals equation of state are derived in terms of equilibrium constants of reactions of dimerization of gas monomers. Comparison of the theoretical results received with the available experimental data for argon is carried out.

Keywords: Van der Waals's equation, virial equation of state, quasichemical cluster model, dimerization

Эмпирическое уравнение состояния реального газа, предложенное Ван- дер-Ваальсом в 1873г., имеет вид [1,2]:

$$\left(P + \frac{a}{V_{\mu}^2}\right)(V_{\mu} - b) = RT\tag{1}$$

Здесь  $V_{\mu} = V / n$  - молярный объем (n - число молей вещества в объеме V), a,b - постоянные Ван-дер-Ваальса. При условии  $b/V_{\mu} < 1$  уравнение (3) можно представить в виде ряда [3,4]:

$$PV_{\mu} = RT + \frac{RTb - a}{V_{\mu}} + RT \sum_{n=2}^{\infty} \frac{b^{n}}{V_{\mu}^{n}}$$
 (2)

Наиболее теоретически обоснованное уравнение для описания P,V,T – свойств реального газа – вириальное уравнение состояния, которое можно записать в виде [3]:

$$\frac{PV}{RT} = 1 + B\rho + C\rho^2 + D\rho^3 + \dots$$
 (3)

Здесь  $\rho = 1/V$  - плотность газа, а B, C, D - второй, третий и четвертый вириальный коэффициенты соответственно. В работах [2,3] был дан обзор одного из старейших подходов к проблеме составления уравнения состояния реального газа в виде смеси групп молекул ассоциатов — кластеров. В работах [4,5] уравнение (3) было представлено в виде:

$$\frac{PV}{RT} = 1 + (B_f + B_b + B_m)\rho + \dots$$
 (4)

В уравнении (4) оставлены члены вплоть до второго вириального коэффициента, который равен сумме  $B_f, B_b, B_m$  - составляющих второго вириального коэффициента, учитывающих взаимодействие двух свободных частиц, двух связанных в стабильный димер частиц и двух частиц, вращающихся около общего центра масс – метастабильный димер.

Сравнивая уравнения (2) и (4), получим с точностью до второго вириального коэффициента:

$$B = B_f + B_b + B_m = b - \frac{a}{RT} \tag{5}$$

Согласно работам [1,5] величины b и  $B_f$  тождественны и равны исключенному объему газа. Поэтому из соотношения (5) можно найти параметр Ван-дер-Ваальса:

$$a = -RT(B_b + B_m) \tag{6}$$

Отметим, что найденные таким образом параметры Ван-дер-Ваальса a и b зависят только от температуры. Величина  $b=B_f$  зависит только от взаимодействия свободных частиц, в то время как величина a зависит от взаимодействия частиц, связанных в стабильный ( $B_b$ ) и метастабильный ( $B_m$ ) димеры. Согласно [5,6] величины  $B_b$  и  $B_m$  можно выразить через величины констант равновесия образования стабильных ( $K_b > 0$ ) и метастабильных ( $K_m > 0$ ) димеров газа:  $B_b = -K_b(T)$ ,  $B_m = -K_m(T)$ .

Константы равновесия реакции димеризации  $K_b$  и  $K_m$  рассчитывались на основе квазихимической кластерной модели газа [6] с использованием современных пакетов прикладных программ квантовой химии. Далее параметр Ван-дер-Ваальса a вычислялся согласно (6), а параметр b вычислялся по соотношению (5) с использованием экспериментальных данных по второму вириальному коэффициенту [7]. Давление реального газа P вычислялось с использованием найденных таким образом параметров a и b согласно уравнению (1) для различных значений молярного объема  $V_\mu$  при фиксированных значений температуры.

На рис.1 приведены результаты расчетов изотерм аргона по уравнению (1) в сравнении с экспериментальными данными [7].

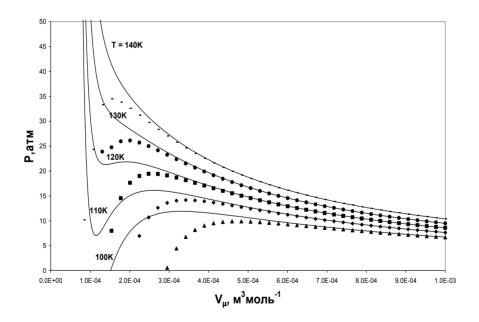


Рис. 1. Сравнение результатов расчетов изотерм аргона по уравнению (1) с экспериментальными данными [7].

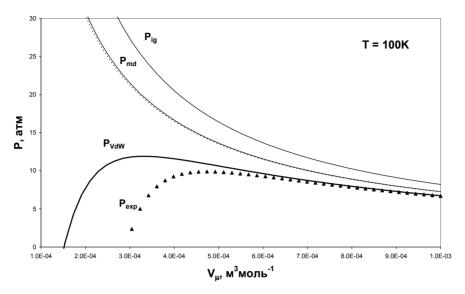


Рис. 2. Результаты расчетов изотерм аргона при фиксированной температуре T=100K для разных моделей газа: идеальный газ (кривая  $P_{ig}$ ), реальный газ, представленный в виде идеальной равновесной смеси мономеров и димеров (кривая  $P_{md}$ ), мономеров, димеров и тримеров (кривая  $P_{mdt}$ ) и квазихимическая кластерная модель газа Ван-дер-Ваальса (кривая  $P_{vdW}$ ), экспериментальные данные (треугольники  $P_{\rm exp}$  [7]).

Видно, что в области относительно больших молярных объемов и в диапазоне температур 100K < T < 140K, наблюдается хорошее согласие с экспериментальными данными. С ростом температуры согласие с экспериментальными данными сохраняется до всё более малых объёмов (больших плотностей).

На рис.2 приведены результаты расчетов изотерм аргона при фиксированной температуре T=100K для разных моделей газа — идеальный газ (кривая  $P_{ig}$ ), реальный газ, представленный в виде идеальной равновесной смеси мономеров и димеров (кривая  $P_{md}$ ), мономеров, димеров и тримеров (кривая  $P_{mdt}$ ) и квазихимическая кластерная модель газа Вандер-Ваальса (кривая  $P_{vdw}$ ). Для сравнения приведены эксперименталь-

ные данные (треугольники  $P_{\rm exp}$  [7]). Видно, что при достаточно низких плотностях все модели (особенно кластерные) дают неплохое согласие с экспериментом, но при возрастании плотности газа в области близкой к переходу в жидкость только учет исключенного объема и более тщательный учет взаимодействия между молекулами, который в первом приближении обеспечивает теория Ван-дер-Ваальса с параметрами, вычисляемыми в рамках квазихимической кластерной модели газа, дает лучшее согласие с экспериментом.

Хотя проведенные теоретические расчеты на основании уравнения Ван- дер-Ваальса (1) с параметрами a и b, рассчитанными с использованием развитого квазихимического кластерного подхода (6) указывают на принципиальную возможность описания перехода в жидкое состояние, они не согласуются с экспериментальными данными. Настоящая модель учитывает только процессы димеризации в реальном газе, дальнейшее развитие ее с учетом кластеров больших размеров, по-видимому, позволит продвинуться в область перехода в жидкое состояние.

В заключение авторы выражают благодарность Терешкиной К.Б. за помощь в проведении квантово-химических расчетов кластеров.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Van-der-Waals I.D. в книге Handbuch der Physik, Bd. X, 1927. (I.D.Van der Waals. Diss. Leiden, 1873)
- 2. Вукалович М.П., Новиков И.И. Уравнения состояния реальных газов. М. Л.: Гос. энерго издат, 1948.
- 3. Мейсон Э., Сперлинг Т. Вириальное уравнение состояния. М.: Мир, 1972.
- 4. Хилл Т. Статистическая механика. Принципы и избранные приложения. М.: Иностранная литература, 1960.
- 5. Stogrin D.E., Hirschfelder J.O. Contribution of bound, metastable and free molecules to the second virial coefficient and some properties of double molecules // J.Chem. Phys. 1959. V. 31, N.6, P.1531-1545.
- 6. Гелиев А.В. и др. Корреляционная зависимость критического числа Рейнольдса ламинарно-турбулентного перехода от константы равновесия реакции димеризации в газе // Химическая физика 2011. Т.30, №1, С.1-7.
- 7. Tegeler Ch., Span R., Wagner W. A New Equation of State for Argon Covering the Fluid Region for Temperatures From the Melting Line to 700 K at Pressures up to 1000 MPa // J. Phys. Chem. Ref. Data 1999. V.28, N.3, P.779-850.

УДК 533.6.011

#### И.З. Шарафутдинов

Санкт – Петербургский государственный университет

## МНОГОТЕМПЕРАТУРНАЯ КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ И ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА В ВОЗДУХЕ ЗА УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

Аннотация. В статье изучаются течения пятикомпонентной воздушной смеси  $(N_2/O_2/NO/N/O)$  за ударными волнами на основе трехтемпературного и однотемпературного описания колебательной и химической кинетики. Показано влияние колебательной неравновесности молекул азота и кислорода на скорости обменных реакций Зельдовича и параметры течения в релаксационной зоне за ударной волной при разных числах Маха в набегающем потоке.

*Ключевые слова:* колебательная и химическая кинетика, ударная волна, трехтемпературное приближение, обменные химические реакции, пятикомпонентная воздушная смесь.

#### I. Sharafutdinov

Saint Petersburg state university,

#### MULTITEMPERATURE VIBRATIONAL AND CHEMICAL KINETICS IN AIR FLOWS BEHIND SHOCK WAVES

Abstract. In this paper chemical and vibrational relaxation of the five component air mixture behind shock waves is studied numerically on the basis of the three-temperature and one-temperature kinetic theory approaches. The influence of vibrational nonequilibrium as well as anharmonicity effects on the rates of exchange chemical reactions and macroscopic flow parameters in relaxation zone behind shock waves is estimated for different Mach numbers. Key words: vibrational and chemical kinetics, shock wave, three-temperature approach, exchange chemical reactions, five components air mixture.

**1.Введение.** Исследование течений воздуха за ударными волнами, возникающими у поверхности тел, движущихся со сверхзвуковыми скоростями в атмосфере Земли, является важной проблемой современной газодинамики. Внутри тонкого фронта ударной волны резко повышается температура воздуха, что приводит к возбуждению внутренних степеней свободы молекул и химическим реакциям в релаксационной зоне за

ударной волной. В высокотемпературном газе эти процессы происходят в режиме сильной неравновесности, поэтому уравнения газодинамики и неравновесной кинетики надо решать совместно. Поскольку вращательные степени свободы молекул воздуха релаксируют почти так же быстро, как поступательные, то распределение молекул по поступательным и вращательным энергиям за ударным фронтом обычно считается равновесным [1, 2, 3].

Для описания неравновесной колебательной и химической кинетики в потоках реагирующих газов в кинетической теории разработаны разные подходы. Наиболее строгим является поуровневое описание [4], использованное в [5] при численном моделировании течений ударно нагретого воздуха, а также в ряде других работ (см. ссылки в [5]) в расчетах течений в соплах и пограничном слое. Применение такого подхода связано с большими вычислительными трудностями, так как требуется решение большого числа уравнений для заселенностей колебательных уровней разных химических сортов молекул смеси. В частности, для решения задачи о течении воздуха за ударной волной необходимо решение более ста уравнений кинетики и знание коэффициентов скорости всех переходов колебательной энергии и химических реакций, зависящие от колебательных уровней. Для практического применения полезны, наряду с поуровневыми, и более простые модели, основанные на сокращенном описании кинетики [4, 6 – 10]. Построению таких моделей и их применению для решения задач неравновесной газодинамики уделяется в настоящее время, как и ранее, большое внимание. Кинетическая теория многотемпературного описания реагирующих многокомпонентных смесей разработана в [4]. Двухтемпературные модели использовались неоднократно для расчетов течений бинарных смесей  $N_2/N$ ,  $O_2/O$  (см. ссылки в [4]), в [6, 7] трехтемпературное приближение применяется для решения задачи о течении воздуха за ударной волной, работы [8, 9, 10] также посвящены переходу от поуровневого описания гиперзвуковых потоков воздуха к упрощенным моделям.

Многотемпературное описание позволяет рассматривать вместо большого числа уравнений для заселенностей колебательных уровней молекул разных сортов лишь несколько уравнений для колебательных температур и числовых плотностей молекул. В настоящей работе численно изучены течения пятикомпонентной смеси  $(N_2/O_2/NO/N/O)$  в релаксационной зоне за ударными волнами на основе трехтемпературного приближения. Значительное внимание уделено рассмотрению двухтемпературных коэффициентов скорости обменных реакций Зельдовича, играющих важную роль в высокотемпературном воздухе, но изученным гораздо слабее, чем скорости диссоциации. Показано влияние колебательной неравновестности и чисел Маха в набегающем потоке на коэффициенты скорости реакций обмена и макропараметры потока за ударной волной.

2. Неравновесные распределения и уравнения для макропараметров. В потоках воздуха за фронтом ударной волны в работе учитываются следующие неравновесные процессы: диссоциация и рекомбинация

$$N_2 + M \leftrightarrow N + N + M, \tag{1}$$

$$O_2 + M \leftrightarrow O + O + M, \tag{2}$$

$$NO + M \leftrightarrow N + O + M,\tag{3}$$

 $M = N_2, O_2, NO, N, O$  — партнер по столкновению, обменные реакции Зельдовича

$$N_2 + O \leftrightarrow NO + N, \tag{4}$$

$$O_2 + N \leftrightarrow NO + O, \tag{5}$$

а также обмены колебательными энергиями молекул смеси и переходы колебательной энергии в поступательную.

Из экспериментов известно (см., например [1, 11]), что близкие к резонансным  $VV_1$  обмены колебательными энергиями при столкновениях молекул одного и того же сорта происходят значительно чаще, чем  $VV_2$  обмены между молекулами разных сортов и VT(TV) переходы колебательной энергии в поступательную. В таких условиях сохраняется число колебательных квантов в системе сталкивающихся частиц каждого химического сорта. При этом заселенности колебательных уровней молекул каждого сорта  $\mathcal C$  могут быть представлены в виде распределений Тринора [12, 4]:

$$n_{ci} = \frac{n_c}{Z_c^{vibr}(T, T_1^c)} \exp\left(-\frac{\varepsilon_i^c - i\varepsilon_1^c}{kT} - \frac{i\varepsilon_1^c}{kT_1^c}\right),$$

$$c = 1, 2, \dots L; \quad i = 0, 1, \dots L_c,$$
(6)

где  $T(\vec{r},t)$  — температура,  $n_c$  — числовые плотности молекул,  $T_1^c(\vec{r},t)$  — температура первого колебательного уровня молекул сорта c, k — постоянная Больцмана,  $\varepsilon_i^c$  и  $\varepsilon_i^c$  — колебательные энергии молекул сорта c на уровне i и при i=1,  $Z_c^{vibr}(T,T_1^c)$  — неравновесная колебательная статистическая сумма:

$$Z_{c}^{vibr}(T, T_{1}^{c}) = \sum_{i} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{i}^{c} - i\varepsilon_{1}^{c}}{kT} - \frac{i\varepsilon_{1}^{c}}{kT_{1}^{c}}\right). \tag{7}$$

Энергия  $\varepsilon_i^c$  отсчитывается от энергии нулевого уровня на основе модели ангармонического осциллятора [13]. На основе обобщенного метода Энскога – Чепмена с учетом распределений (6) в [4] получены замкнутые системы уравнений, описывающих течения многокомпонентных реагирующих смесей в многотемпературном приближении. В настоящей рабо-

те течения пятикомпонентного воздуха, с учетом распределений (6), описываются на основе трехтемпературного приближения [6, 7]. При этом макропараметрами являются числовые плотности компонентов  $n_c(\vec{r},t)$  $(c = N_2, O_2, NO, N, O)$ , температуры первых колебательных уровней  $T_1^c(\vec{r},t)$  ( $c=N_2,O_2$ ), скорость и температура газа  $v(\vec{r},t)$  и  $T(\vec{r},t)$ .

Колебательная температура  $T_1^c(\vec{r},t)$  связана со средним числом колебательных квантов в единице объема  $W_c(T, T_1^c)$  молекул сорта c следующим соотношением [4, 6, 7]:

$$W_c(T, T_1^c) = \sum_i i n_{ci} (T, T_1^c), \qquad c = N_2, O_2.$$

Для гармонических осцилляторов  $\varepsilon_i^c = i\varepsilon_1^c$  и распределения (6) переходят в распределения Больцмана с колебательными температурами  $T_1^{\mathcal{C}}=T_{\mathcal{v}}^{\mathcal{C}},\ c=N_2,O_2$  [4]. В термически равновесной смеси  $T_1^{\mathcal{C}}=T$  и распределения (6) переходят в больцмановские распределения с температурой T, макропараметрами потока являются функции  $n_c(\vec{r},t)$  (c= $N_2, O_2, NO, N, O), T(\vec{r}, t), v(\vec{r}, t).$ 

Известно [11, 4], что использование распределения Тринора при сильном колебательном возбуждении (при  $T_1^c > T$ ) может приводить к нереальному перезаселению верхних колебательных уровней. Заселенности сильно возбужденных колебательных уровней описываются распределениями, детально рассмотренными в [11, 4]. Однако оценки показывают, что если ударная волна возникает в равновесном потоке воздуха, то в релаксационной зоне за ударным фронтом сохраняется условие  $T > T_1^c$ и распределение Тринора справедливо на всех колебательных уровнях.

В настоящей работе молекулы NO рассматриваются только на нулевом уровне и не учитывается их колебательное возбуждение, как и в [14, 6]. Это связано, с тем, что существующие поуровневые модели реакций (4), (5) [3] не описывают возбуждение молекул NO, а также с тем, что доля этих молекул в смеси значительно меньше доли  $N_2$  и  $O_2$ , и поэтому их возбуждение слабее влияет на общий характер релаксации.

Одномерное стационарное течение невязкого нетеплопроводного газа в релаксационной зоне за прямой ударной волной в трехтемпературном приближении описывается следующими уравнениями:

$$\frac{dn_c v}{dx} = R_c^{2 \leftrightarrow 2} + R_c^{2 \leftrightarrow 3}, \ c = N_2, O_2, \tag{8}$$

$$\begin{split} \frac{dn_{c}v}{dx} &= R_{c}^{2\leftrightarrow 2} + R_{c}^{2\leftrightarrow 3}, \ c = N_{2}, O_{2}, \\ \frac{dn_{NO}v}{dx} &= -R_{N_{2}}^{2\leftrightarrow 2} - R_{O_{2}}^{2\leftrightarrow 2} + R_{NO}^{2\leftrightarrow 3}, \\ \frac{dn_{NV}v}{dx} &= -R_{N_{2}}^{2\leftrightarrow 2} + R_{O_{2}}^{2\leftrightarrow 2} - 2R_{N_{2}}^{2\leftrightarrow 3} - R_{NO}^{2\leftrightarrow 3}, \\ \frac{dn_{O}v}{dx} &= R_{N_{2}}^{2\leftrightarrow 2} - R_{O_{2}}^{2\leftrightarrow 2} - 2R_{O_{2}}^{2\leftrightarrow 3} - R_{NO}^{2\leftrightarrow 3}, \\ \frac{dw_{C}v}{dx} &= R_{C}^{W}, \quad c = N_{2}, O_{2}, \end{split} \tag{8}$$

$$\frac{dn_N v}{dx} = -R_{N_2}^{2 \leftrightarrow 2} + R_{O_2}^{2 \leftrightarrow 2} - 2R_{N_2}^{2 \leftrightarrow 3} - R_{NO}^{2 \leftrightarrow 3},\tag{10}$$

$$\frac{d\tilde{n}_{0}v}{dx} = R_{N_{2}}^{2\leftrightarrow 2} - R_{O_{2}}^{2\leftrightarrow 2} - 2R_{O_{2}}^{2\leftrightarrow 3} - R_{NO}^{2\leftrightarrow 3},\tag{11}$$

$$\frac{dW_c v}{dx} = R_c^W, \quad c = N_2, O_2,$$
 (12)

$$\rho v = \rho_0 v_0, \tag{13}$$

$$\rho_0 v_0^2 + p_0 = \rho v^2 + p, (14)$$

$$h_0 + \frac{v_0^2}{2} = h + \frac{v^2}{2},\tag{15}$$

где p – давление, x – расстояние от фронта ударной волны, индекс "0" обозначает значения параметров в набегающем потоке, h – энтальпия единицы массы:

$$h = \sum_{c} h_{c} Y_{c}, \quad h_{c} = \frac{5}{2} \frac{R}{\mu_{c}} T + \frac{\varepsilon_{c}}{m_{c}}, \qquad c = N, O,$$

$$h_{c} = \frac{7}{2} \frac{R}{\mu_{c}} T + \frac{1}{\rho_{c}} \sum_{i} n_{ci} \varepsilon_{i}^{c} + \frac{\varepsilon_{c}}{m_{c}}, \qquad c = N_{2}, O_{2}, NO,$$

здесь  $\rho$  – плотность газа, R – универсальная газовая постоянная,  $\mu_c$  – молярная масса частицы сорта c,  $\varepsilon_c$  – энергия образования частицы сорта c,  $Y_c = \rho_c/\rho$  – массовая доля молекул и атомов.

Релаксационные члены в уравнениях (8)–(11) записываются в виде:

$$R_{N_2}^{2 \leftrightarrow 2} = n_{NO} n_N k_{r,N_2} - n_{N_2} n_O k_{N_2,f}, \tag{16}$$

$$R_{O_2}^{2\leftrightarrow 2} = n_{NO} n_O k_{r,O_2} - n_{O_2} n_N k_{O_2,f}, \tag{17}$$

$$\begin{split} R_{N_{2}}^{2\leftrightarrow2} &= n_{NO} n_{N} k_{r,N_{2}} - n_{N_{2}} n_{O} k_{N_{2},f}, \\ R_{O_{2}}^{2\leftrightarrow2} &= n_{NO} n_{O} k_{r,O_{2}} - n_{O_{2}} n_{N} k_{O_{2},f}, \\ R_{c}^{2\leftrightarrow3} &= \sum_{M} n_{M} \left( n_{d}^{2} k_{rec,c}^{M} - n_{c} k_{c,diss}^{M} \right), \end{split} \tag{16}$$

$$c = N_2$$
,  $d = N$   $u$   $c = O_2$ ,  $d = O$ ,

$$R_{NO}^{2 \leftrightarrow 3} = \sum_{M} n_{M} (n_{N} n_{O} k_{rec, NO}^{M} - n_{NO} k_{NO, diss}^{M}), \tag{19}$$

где  $k_{c,f},\ k_{r,c},\,k_{c,diss}^{M}$  и  $k_{rec,c}^{M}$  – коэффициенты скорости прямых и обратных обменных реакций (4), (5), диссоциации (1) – (3) и рекомбинации, приводящей к образованию молекул сорта  $c, M = N_2, O_2, NO, N, O - парт$ нер по столкновению.

Коэффициенты  $k_{c,diss}^{M}$  и  $k_{c,f}$  зависят от двух температур T,  $T_{1}^{c}$  и определяются соотношениями [4]:

$$k_{c,diss}^{M}(T, T_{1}^{c}) = \frac{1}{n_{c}} \sum_{i} n_{ci} k_{ci,diss}^{M},$$
 (20)

$$k_{c,f}(T, T_1^c) = \frac{1}{n_c} \sum_i n_{ci} k_{ci,f},$$
 (21)

где  $k_{ci,f}$  и  $k_{ci,diss}^{M}$  – поуровневые коэффициенты скорости прямых реакций обмена и диссоциации.

Релаксационные члены в уравнениях (12) характеризуют изменение колебательной энергии молекул в результате VV2 и VT обменов колебательной энергией и химических реакций:

$$R_c^W = R_c^{W,VT} + R_c^{W,VV_2} + R_c^{W,2\leftrightarrow 2} + R_c^{W,2\leftrightarrow 3}, \qquad c = N_2, O_2,$$
где

$$R_{N_2}^{W,2 \leftrightarrow 2} = \sum_{i} i \left( n_{NO} n_N k_{r,N_2 i} - n_{N_2} n_O k_{N_2 i,f} \right), \tag{22}$$

$$R_{O_2}^{W,2\leftrightarrow 2} = \sum_i i (n_{NO} n_O k_{r,O_2 i} - n_{O_2} n_N k_{O_2 i,f}), \tag{23}$$

$$R_{N_{2}}^{W,2\leftrightarrow2} = \sum_{i} i \left( n_{NO} n_{N} k_{r,N_{2}i} - n_{N_{2}} n_{O} k_{N_{2}i,f} \right), \tag{22}$$

$$R_{O_{2}}^{W,2\leftrightarrow2} = \sum_{i} i \left( n_{NO} n_{O} k_{r,O_{2}i} - n_{O_{2}} n_{N} k_{O_{2}i,f} \right), \tag{23}$$

$$R_{c}^{W,2\leftrightarrow3} = \sum_{i} i \sum_{M} n_{M} \left( n_{d}^{2} k_{rec,ci}^{M} - n_{ci} k_{ci,diss}^{M} \right), \tag{24}$$

$$c = N_{2}, d = N \text{ if } c = O_{2}, d = O,$$

$$R_{c}^{W,VT} = \sum_{i} i \sum_{M} n_{M} (n_{c,i-1} k_{c,i-1 i}^{M} + n_{c,i+1} k_{c,i+1 i}^{M} - n_{c,i} (k_{c,i i-1}^{M} + k_{c,i i+1}^{M})), \quad c = N_{2}, O_{2},$$

$$R_{c}^{W,VV_{2}} = \sum_{i} i \sum_{k} n_{c,i+1} n_{d,k-1} k_{c,i+1 i}^{d,k-1 k} + n_{c,i-1} n_{d,k+1} k_{c,i-1 i}^{d,k+1 k} - n_{c,i} n_{d,k} (k_{c,i i+1}^{d,k+1} + k_{c,i i-1}^{d,k+1}),$$

$$c = N_{2}, d = N \text{ if } c = O_{2}, d = 0,$$

$$(25)$$

где  $k_{c,i-1}^{M}$  и  $k_{c,i-1}^{d,k}{}^{k-1}$  – поуровневые коэффициенты скорости VT и  $VV_2$ переходов. Коэффициенты скорости диссоциации вычислялись на основе модели Тринора – Маррона [4], а коэффициенты скорости переходов колебательной энергии по формулам теории Шварца, Славского и Герцфельда [3]. Коэффициенты скорости прямых и обратных процессов связаны соотношениями, следующим из принципа детального баланса

3. Коэффициенты скорости обменных реакций. Кинетика обменных реакций изучена слабее, чем диссоциация. Запишем двухтемпературные коэффициенты (21) скорости прямых реакций (4), (5) в виде:

$$k_{c,f}(T, T_1^c) = Z_{c,f}(T, T_1^c) k_{c,f}^{eq}(T), \ c = N_2, O_2,$$
 (27)

где  $Z_{c,f}(T,T_1^c)$  – двухтемпературный неравновесный фактор,  $k_{c,f}^{eq}(T)$  – равновесный коэффициент обменной реакции, осредненный по распределению Больцмана:

$$k_{c,f}^{eq}(T) = \frac{1}{Z_{vibr,c}(T)} \sum_{i} k_{ci,f}(T) \exp\left(-\frac{\varepsilon_i^c}{kT}\right), \tag{28}$$

 $Z_{vibr,c}(T)$  – колебательная статистическая сумма.

Равновесные коэффициенты  $k_{c,f}^{eq}$  могут быть найдены и по формуле Аррениуса:

$$k_{c,f}^{Ar} = A_c T^n \exp\left(-\frac{E_\alpha}{kT}\right). \tag{29}$$

Значения постоянных  $A_c$ ,  $E_{\alpha}$  и n рекомендованы для реакций обмена (4), (5) в [3, 15, 16].

На рис. 1 представлено сравнение коэффициентов равновесных реакций  $k_{c,f}$  (T), найденных по формуле (28) (с учетом рассмотренного ниже выражения (32) для  $k_{cif}$  из [17]) и по формуле Аррениуса (29) (с параметрами, приведенными в [3, 15, 16]).

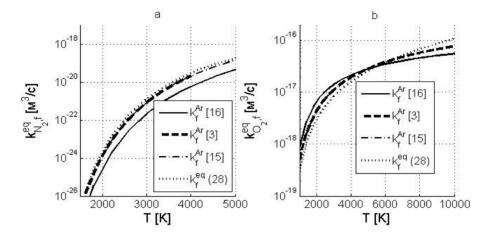


Рис. 1. Коэффициенты скорости равновесных обменных реакций [м $^3/c$  ], в зависимости от T [K].

Введем поуровневый неравновесный фактор:

$$Z_{ci,f}(T) = \frac{k_{ci,f}(T)}{k_{c,f}^{eq}(T)}, \quad c = N_2, O_2.$$
 (30)

Учитывая (28), (27), можем записать выражение для  $Z_{c,f}$ :

$$Z_{c,f}(T, T_1^c) = \frac{1}{n_c} \sum_i n_{ci} (T, T_1^c) Z_{ci,f}(T).$$
 (31)

Поуровневые модели коэффициентов скорости обменных реакций предложены в ряде работ, как на основе эмпирических соотношений, так и в результате аппроксимации численных решений задачи о столкновении. Некоторые из этих моделей представлены в [3]. В настоящей работе используется модель, предложенная в [17] (см. также [3]) на основе расчетов в теории химически активных столкновений:

$$k_{ci,f} = \frac{c}{Na}(i+1)T^{\beta} \exp\left(-\frac{E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^{c}}{kT}\Theta(E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^{c})\right), \tag{32}$$

где  $\theta$  — функция Хэвисайда, Na — число Авогадро, значения постоянных C,  $\beta$  и  $E_{\alpha,c}$  даны в табл. 1.

Таблица 1.

Значения постоянных $C$ ,	β	И	$E_{\alpha}$	c·
---------------------------	---	---	--------------	----

	С	β	$E_{\alpha,c}$ [эВ]
$N_2 + O \rightarrow NO + N$	$4.17 \cdot 10^{12}$	0	3.2
$O_2 + N \rightarrow NO + O$	$1.15 \cdot 10^9$	1.0	0.33

С учетом (32) получаем  $Z_{ci,f}$  в виде:

$$Z_{ci,f} = (i+1) \frac{Z_{vibr,c}(T)exp\left(-\frac{E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^c}{kT}\Theta(E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^c)\right)}{\sum_i (i+1) \exp\left(-\frac{E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^c}{kT}\Theta(E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^c)\right) exp\left(-\frac{\varepsilon_i^c}{kT}\right)}.$$
 (33)

На рис. 2 представлена зависимость  $Z_{ci,f}$  молекул  $N_2$  и  $O_2$  от температуры для нескольких колебательных уровней и зависимость  $Z_{ci,f}$  от колебательных уровней при фиксированных значениях температуры. С ростом температуры значение  $Z_{ci,f}$  уменьшается, а с ростом i, напротив, возрастает. Такой же характер изменения поуровневого фактора неравновесности отмечался в [4] для диссоциации молекул  $N_2$ .

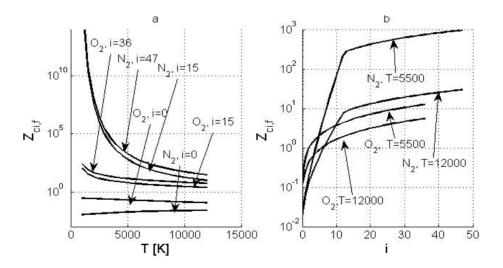


Рис. 2. Зависимость  $Z_{ci,f}$ : (a) от T при разных i; (b) от i при разных значениях T.

Подставляя (33) в (31), получим:

$$\begin{split} Z_{c,f}(T,T_1^c) &= \frac{Z_{vibr,c}(T)}{Z_c^{vibr}(T,T_1^c)} \times \\ &\times \sum_i \frac{(i+1) \mathrm{exp} \left( -\frac{E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^c}{kT} \Theta(E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^c) - \frac{\varepsilon_i^c - i \varepsilon_1^c}{kT} - \frac{i \varepsilon_1^c}{kT^c} \right)}{\sum_i (i+1) \exp \left( -\frac{E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^c}{kT} \Theta(E_{\alpha,c} - \varepsilon_i^c) - \frac{\varepsilon_i^c}{kT} \right)}. \end{split}$$

На рис. З представлена зависимость  $Z_{c,f}$  от температуры газа T для молекул азота и кислорода при фиксированной температуре  $T_1^c$ . С ростом T значения неравновесного фактора уменьшаются и становятся равными единице при  $T=T_1^c$ , а с ростом колебательной температуры значения  $Z_{c,f}$  увеличиваются.

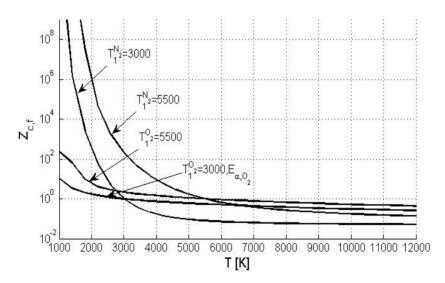


Рис. 3. Зависимость  $Z_{c,f}$  от T при фиксированной температуре  $T_1^c$ .

Коэффициенты скорости прямых обменных реакций представлены на рисунке 4. Кривые 1 и 2 соответствуют значениям  $T_1^c = 5500~\mathrm{K}$  и  $T_1^c = 3000~\mathrm{K}$  соответственно. Здесь же показана зависимость от температуры равновесных коэффициентов, вычисленных по формуле Аррениуса (29) (с параметрами из [16]) и по формуле (28). Сплошные и пунктирные линии показывают значения  $k_{c,f}$ , найденные с учетом ангармоничности колебаний и без ее учета. Можно заметить, что при  $T \geq T_1$  двухтемпературные коэффициенты  $k_{c,f}$  превышают равновесные коэффициенты  $k_{c,f}^{eq}$  и оказываются меньшими по величине, чем  $k_{c,f}^{eq}$  при  $T < T_1$ . Эффекты

ангармоничности становятся заметнее при более высокой колебательной температуре.

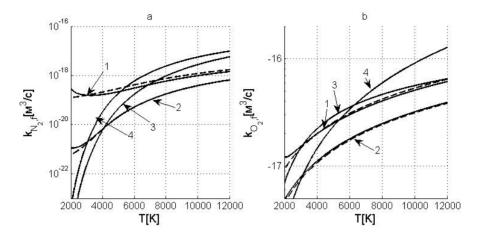


Рис. 4. Коэффициенты  $k_{c,f}$  [м³/c] в зависимости от T [K]:  $1-T_1^c=5500, 2-T_1^c=3000, 3-k_{c,f}^{Ar}(T), 4-k_{c,f}^{eq}(T)$  по формуле (28); (а) для  $N_2$ , (b) для  $O_2$ .

**4. Результаты.** Результаты численных расчетов макропараметров течений воздуха за ударной волной на основе трехтемпературного и однотемпературного приближений приведены на рис. 5-7.

Расчеты проводились при следующих условиях в набегающем пото- ке:  $T_0=271~{\rm K},\ p_0=100~{\rm \Pi a},\ T_{1,0}^{N_2}=T_{1,0}^{O_2}=T_0,\$ химический состав смеси  $n_{N_2,0}=0.79n_0,\ n_{O_2,0}=0.21n_0\ (n_0$  — числовая плотность смеси), числа Маха M=15,10,7. Внутри фронта ударной волны  $VV_2$  и VT обмены и химические реакции считались замороженными. Значения макропараметров непосредственно за ударным фронтом вычислялись из условий динамической совместности, соответствующих равновесному распределению частиц по поступательным и вращательным степеням свободы.

Рис. 5а показывает изменение температуры T и колебательных температур  $T_1^{N_2}$  и  $T_1^{O_2}$  в релаксационной зоне за ударной волной при разных числах Маха M=15,10,7. Видно, что использование однотемпературного приближения приводит к недооценке температуры в релаксационной зоне за ударным фронтом, что проявляется более заметно при больших числах Маха. Можно отметить быстрый рост колебательных температур  $T_1^{N_2}$ ,  $T_1^{O_2}$  сразу за ударным фронтом в результате TV колебательного возбуждения, особенно активного у молекул кислорода.

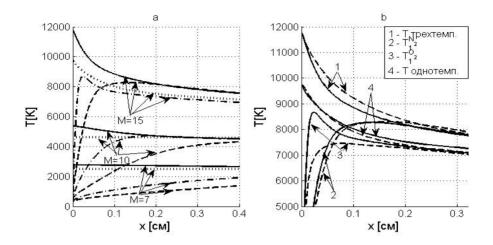


Рис. 5. Зависимость температур T ,  $T_1^{N_2}$  ,  $T_1^{O_2}$  от  $\boldsymbol{x}$ 

- (a) M = 7, 10, 15: -T, трехтемпературное приближение,
- T, однотемпературное приближение,  $-T_1^{N_2}$ ,  $-\cdot -T_1^{O_2}$ ;
- (b) M = 15, сплошные и пунктирные линии ангармонический и гармонический осцилляторы.

Рис. 5b показывает влияние ангармоничности колебаний молекул на температуры T,  $T_1^{N_2}$ ,  $T_1^{O_2}$ , которое особенно заметно в колебательно возбужденном газе. В трехтемпературном приближении пренебрежение ангармоничностью приводит к завышенным значениям температуры газа и недооценке колебательных температур  $T_1^{N_2}$  и  $T_1^{O_2}$ . Максимальная погрешность при вычислении температуры T без учета ангармоничности достигает 3%, а при вычислении колебательных температур  $T_1^{N_2}$  и  $T_1^{O_2}$  она доходит до 11.3% и 24.3% соответственно.

На рисунках 6, 7 показано изменение относительных числовых плотностей молекул и атомов при удалении от фронта волны. Активная диссоциация молекул кислорода, а также диссоциация молекул азота приводит к появлению атомов и интенсивным прямым реакциям обмена (4), (5). По мере накопления атомов и молекул окиси азота увеличивается роль обратных обменных реакций, что приводит к немонотонному изменению  $n_{NO}$ . Однотемпературная модель дает значительную недооценку плотностей молекул  $N_2$ ,  $O_2$ , переоценку плотностей атомов и молекул окиси азота и замедляет возрастание и убывание молекул окиси азота. Это объясняется тем, что однотемпературное приближение не описывает процесс колебательной релаксации и соответствующую задержку диссоциации, проявляющуюся в неравновесном газе как при теоретических расчетах [4, 6, 5], так и в экспериментах [1, 3]. Различия между параметрами течения, найденными в трехтемпературном и однотемпературном

приближениях, уменьшаются с ростом х по мере приближения к термическому равновесию.

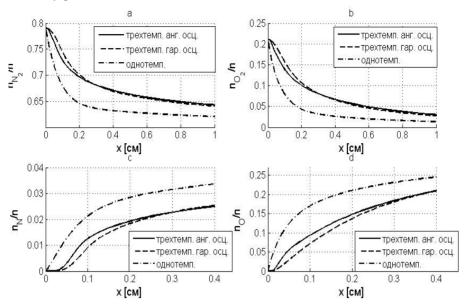


Рис. 6. Относительные числовые плотности молекул  $N_2$  (a),  $O_2$  (b) и атомов N (c), O (d) в зависимости от x.

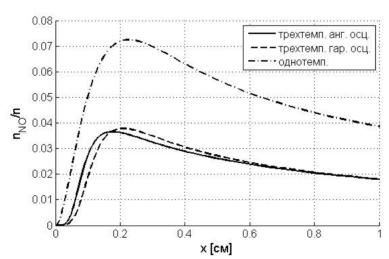


Рис. 7. Относительные числовые плотности молекул NO в зависимости от x.

Пренебрежение ангармоничностью колебаний приводит к завышенным значениям плотностей молекул  $N_2$  и  $O_2$ , замедленному образованию и убыванию молекул NO и заниженным значениям плотностей атомов,

что особенно заметно при небольшом удалении от фронта. С увеличением x эффекты ангармоничности уменьшаются. Максимальное влияние эффектов ангармоничности при вычислении химического состава смеси достигает 15%.

5. Заключение. В работе численно исследована колебательная и химическая релаксация в потоках воздуха за ударными волнами на основе трехтемпературного описания неравновесной кинетики. Предложена и использована в расчетах двухтемпературная модель для вычисления коэффициентов скорости неравновесных обменных реакций Зельдовича. Представлено сравнение коэффициентов скорости реакций и параметров ударно нагретого воздуха, полученных в результате расчетов, проведенных на основе трехтемпературного и однотемпературного приближений. Показано влияние колебательной неравновесности, разных чисел Маха в набегающем потоке и ангармоничности молекулярных колебаний на температуру и химический состав воздуха в релаксационной зоне за ударными волнами.

Автор благодарен профессору Нагнибеда Екатерине Алексеевне за идею работы и полезные советы при ее выполнении.

Работа выполнена при поддержке СПбГУ НИР N 6.38.73.2012.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965. 484 с.
- 2. R. Brun (Ed.), High Temperature Phenomena in Shock Waves, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2012. 337 p.
- 3. Физико-химические процессы в газовой динамике / под редакцией Черного Г.Г. и Лосева С.А. / М.:Науч. мир. 1995. Т. 1., 2002. Т. 2.
- 4. Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во СПб ун-та, 2003 272 с.
- 5. Kunova O.V., Nagnibeda E.A. State-to-state description of reacting air flows behind shock waves // Chemical Physics, 2014. Vol. 441, pp. 66-76
- 6. Chikhaoui A., Dudon J.P., Geneys S., Kustova E.V., Nagnibeda E.A. Multitemperature kinetic model for heat transfer in reacting gas mixture // Phys. Fluids. 2000. Vol.12. № 1. pp. 220 230.
- 7. Kunova O.V., Nagnibeda E.A, Sharafutdinov I.Z. Vibrational-chemical coupling in air flows behind shock waves // 21st International Shock Interaction Symposium. Book of Proceedings. 2014. pp. 179-184
- 8. Bourdon A., Annaloro J., Bultel A., Capitelli M., Colonna G., Guy A., Magin T.E., Munafó A., Perrin M.Y. and Pietanza L.D. Reduction of State-to-State to Macroscopic Models for Hypersonics // The Open Plasma Physics Journal, 2014, № 7. pp. 60 75.

- 9. Colonna G., Armenise I., Bruno D., Capitelli M. Reduction of state-to-state kinetics to macroscopic models in hypersonic flows // Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 20, N 3, 2006, pp. 477 486.
- 10. Colonna G., Pietanza L.D., Capitelli M. Reduced two-level approach for air kinetics in recombination regime // AIP Conference Proceedings, Vol. 1333, N 1, 2011, pp. 1365 1370.
- 11. Гордиец Б.Ф., Осипов А.И., Шелепин Л.А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980. 512 с.
- 12. Treanor C.E., Rich J.W., Rehm R.G. Vibrational relaxation of anharmonic oscillators with exchange dominated collisions. // J. Chem. Phys. 1968. Vol. 48. pp. 1798 1807.
- 13. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. М.: Изд-во иностр. лит., 1949. 403 с.
- 14. Capitelli M., Armenise I., Gorse C. State -to-state approach in the kinetics of air components under re-entry conditions. J. Thermophys. Heat Transfer. 1997. Vol. 11. N 4. pp. 570 578.
- 15. Capitelli M., Ferreira C.M., Gordiets B.F., Osipov A.I. Plasma kinetics in atmospheric gases. Berlin: Springer-Verlag, 2000
- 16. Test Case 2: Definition of shock tunnel test cases for gas radiation prediction in a planetary atmosphere, in: Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, Part II. Porquerolles, France (ESA SP-583, April 2004), p. 139
- 17. Warnatz J., Riedel U., Schmidt R. Different levels of air dissociation chemistry and its coupling with flow models. In: Advanced in Hypersonic Flows, Vol.2: Modeling Hypersonic Flows. Birkhäuser, Boston, 1992. pp. 67 103.

УДК 539.124.143

#### В.А. Жачкин<sup>1</sup>, Л.Д. Богомолова<sup>2</sup>, В.В. Тарасова<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный областной университет (МГОУ)
<sup>2</sup> Научно-исследовательский институт ядерной физики
им. Д.В.Скобельцына

Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова (НИИЯФ МГУ)

 $^3$ Физический факультет

Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова)

ЭЛЕКТРОННЫЙ ПАРАМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ОКСИДНЫХ СТЕКЛАХ СИСТЕМЫ  $V_2O_5$ – $BaO-Mn_2O_3$ 

Аннотация: С помощью ЭПР исследовались взаимодействия между ионами V и Мп и их влияние на электрические свойства в бариево—ванадатных стеклах при введении в них  $Mn_2O_3$ . С ростом содержания  $Mn_2O_3$  электропроводность стекол убывает вследствие образования пар  $V^{4+}$ — $Mn^{2+}$ , а также крупных кластеров ионов V и Мп в высших формах окисления за счет изменения расстояния V-V и прямого вклада энергии обменного взаимодействия в энергию активации прыжкового процесса. Ключевые слова: полупроводниковые бариево—ванадатные стекла, электронный парамагнитный резонанс, электропроводность, обменные взаимодействия, малые поляроны, сверхтонкая структура.

#### V. Zhachkin<sup>1</sup>, L. Bogomolova<sup>2</sup>, V. Tarasova<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Moscow State Regional University

<sup>2</sup>Skobel'tsyn Research Institute of Nuclear Physics, Moscow State University <sup>3</sup>Physical Department of Moscow State University (MSU)

#### ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE IN SEMICONDUCTING OXIDE GLASSES OF SYSTEM V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-BaO-Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Abstract: The interactions between V and Mn ions in semiconducting glasses of the system  $BaO-V_2O_5$  are investigated by EPR. The influence of these interactions on the electrical properties of barium-vanadate glasses after an addition of  $Mn_2O_3$  is studied. The electrical conductivity of barium-vanadate glasses decreases with increasing content of  $Mn_2O_3$ . It is proposed that this decrease is associated with the formation of pairs  $Mn^{2+}-V^{4+}$ , related exchange interaction as well as with the formation of large clusters of the ions V and  $Mn^{3+}$ ,  $Mn^{4+}$ . This phenomenon can lead to a change of V–V distances. The pairs and large clusters make a direct contribution to the activation energy of hopping small polarons.

*Keywords:* semiconducting barium–vanadate glasses, electron paramagnetic resonance, electrical conductivity, exchange interaction, small polarons, hyperfine structure

#### 1.Введение

После открытия эффекта переключения для халькогенидных стекол в 70-е годы прошлого столетия значительное внимание уделяется изучению электрических и других свойств аморфных полупроводников. Среди аморфных и стеклообразных полупроводников особую группу составляют оксидные стеклообразные полупроводники (ОСП), основанные на оксидах переходных элементов (ПЭ). Полупроводниковые свойства в них обусловлены существованием ионов ПЭ, по крайней мере, в двух валент-

ных состояниях, при этом проводимость осуществляется переходом электрона от иона с низкой валентностью к высоко-валентному иону.

В последнее время интерес к оксидным стеклообразным полупроводникам возрос в связи с их применением для сенсорных экранов в смартфонах и планшетах, а также в качестве прозрачной резистивной памяти произвольного доступа (мемистор), позволяющей быстро записывать и стирать информацию. На основе тонкопленочной технологии с применением ОСП фирмой Самсунг была создана жидкокристаллическая панель очень больших размеров (70 дюймов по диагонали) высокого разрешения, большой яркости и контрастности. Успешное применение ОСП требует тщательных фундаментальных исследований, касающихся физических процессов в этих веществах. Поскольку ОСП содержат в своем составе ПЭ, одним из эффективных методов их изучения может быть электронный парамагнитный резонанс (ЭПР).

Из ОСП особо выделяются ванадатные стекла, в которых ванадий является стеклообразующим оксидом и полупроводниковой компонентой одновременно. Стеклообразный  $V_2O_5$  трудно синтезировать традиционными методами. Обычно ванадатные стекла получают с добавлением классических стеклообразователей ( $P_2O_5$ ,  $B_2O_3$ ,  $TeO_2$  и др.), при этом электрические свойства таких стекол зависят от их природы. В настоящей работе исследовались стекла в системе  $BaO-V_2O_5$ , в которых нет другого стеклообразователя кроме оксида ванадия. Ванадатные стекла используются для создания электрохимических батарей и в схемах переключения памяти. На основе оксидов ванадия можно получить нанотрубки [1].

Одно из первых исследований электрических свойств бариевованадатных стекол было проведено в работе [2] для состава  $67V_2O_5$ –33BaO (мол.%). Проводимость при высоких температурах в этих стеклах объясняется прыжками поляронов малого радиуса [3]; при низких температурах интерпретируется в терминах зонной теории.

Целью настоящей работы является исследование с помощью ЭПР эффектов взаимодействия между ионами ванадия, содержащегося в составе бариево—ванадатного стекла, и ионами Мп, вводимыми в качестве примеси, модифицирующей свойства этого стекла. Спектры ЭПР  $V^{4+}$  чувствительны к присутствию парамагнитных примесей, а их параметры дают информацию о взаимодействии между ионами  $V^{4+}$  и вводимой примесью ПЭ [4-7].

В работах [4-7] было показано, что ионы  $V^{4+}$  образуют ассоциаты с ионами  $\Pi$ Э, которые влияют на электропроводность бариево-ванадатных стекол. В настоящей работе мы делаем попытку установить корреляцию между электропроводностью бариево-ванадатных стекол и образованием ассоциатов ионов  $V^{4+}$  с примесью Mn.

#### 2. Приготовление образцов и методика эксперимента.

Для синтеза образцов использовались следующие реактивы:  $V_2O_5$ ,  $BaCO_3$  и  $Mn_2O_3$ . Стекла были выплавлены из шихты массой 20 г в платиновом тигле при  $1000^{\circ}$ С в электрической печи на воздухе в течение 1ч. Состав исходного стекла (в мол.%) был 35 BaO-65  $V_2O_5$  (обозначим как BV). Мп вводился в шихту в форме  $Mn_2O_3$  в количестве от 0,1 до 10 масс.%. Чтобы избежать влияния условий приготовления образцов, все они плавились одновременно. Расплавы были отлиты на пластину из нержавеющей стали.

ЭПР спектры были измерены в интервале температур от 77 до 473К с помощью модифицированного радиоспектрометра РЭ-1306 трехсантиметрового диапазона, снабженного температурной приставкой. Концентрация парамагнитных центров определялась сравнением интегральных интенсивностей спектра ЭПР изучаемого образца известной массы и спектра эталонного образца.

Электропроводность на постоянном токе измерялась при температурах от 77 до 500К путем приложения фиксированного напряжения от 0,1 до 10 В и измерения тока с помощью электрометра ВК-216 при высоких температурах и микроамперметра М-95 — при низких. Измеряемые образцы представляли собой полированные с двух сторон диски 2х-мм толщины. Нихромовые электроды были напылены на обе поверхности. Температура измерялась с помощью термопары, закрепленной на образцах. Диэлектрическая проницаемость измерялась в интервале частот от 1 до 600 МГц методом коаксиальной линии, а при 1500 МГц — методом подстройки резонансной частоты. Все электрические измерения проводились в Сибирском ФТИ (г. Томск).

#### 3. Результаты.

Спектр ЭПР исходного BV-стекла имеет сложную форму и типичен для иона  $V^{4+}$  в оксидных стеклах [8], в том числе и для бариево-ванадатных [4-7]. В этом спектре можно наблюдать сверхтонкую структуру (СТС), обусловленную взаимодействием неспаренного электрона  $V^{4+}$  с ядрами  $^{51}$ V (спин ядра I=7/2).

На рис.1a показаны экспериментальный и расчетный спектры образца BV, содержащего 0,1 масс.%  $Mn_2O_3$ , а на рис.16 представлены спектры, из которых был построен расчетный спектр.

На рис.2 приведены спектры образцов BV-стекла с различным содержанием  $Mn_2O_3$ , указывающие на то, что линии CTC  $V^{4+}$  с ростом концентрации  $Mn_2O_3$  расширяются, и при концентрации выше  $1\%~Mn_2O_3$  наблюдаются синглетные почти изотропные линии с g-фактором и шириной между экстремумами производной (табл.1), зависящими от концентрации  $Mn_2O_3$ .

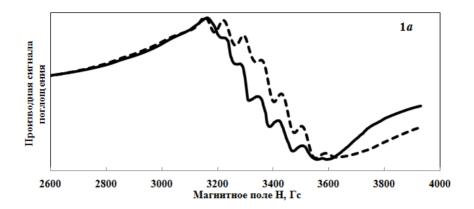


Рис.1. а) Экспериментальный (сплошная линия) и расчетный (пунктирная линия) спектр ЭПР в стекле состава  $67V_2O_5$ –33BaO с примесью 0.1 масс.%  $Mn_2O_3$ .

- б) Расчетный спектр ЭПР BV-стекла (1) и его составляющие:
  - 2-спектр ЭПР  $V^{4+}$  с СТС;
  - 3-спектр ЭПР Mn<sup>2+</sup> с СТС;
  - 4—синглетная линия ЭПР лоренцевой формы шириной  $\Delta H_{pp}$  = 480 Гс.

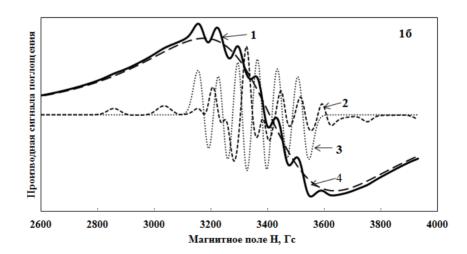


Рис.2. Экспериментальные (сплошная линия) и расчетные (пунктирная линия) спектры образцов BV-стекла с различным содержанием  $Mn_2O_3$ .

На рис.3 представлена логарифмическая зависимость проводимости  $\sigma$  на постоянном токе от обратной температуры 1/T (в интервале от 290 до 500К) для некоторых бариево-ванадатных стекол с различным содержанием  $\mathrm{Mn_2O_3}$ . Выше 300К проводимость имеет линейную зависимость. Из наклона этой линии была вычислена энергия активации Е и предэкспоненциальный множитель  $\sigma_0$  в предположении, что электропроводность подчиняется закону Аррениуса [9]:

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E/kT). \tag{1}$$

В табл.2 приведены значения энергии активации. Как видно из рис.3 и табл.2, проводимость падает с увеличением содержания  $Mn_2O_3$ , тогда как энергия активации возрастает.

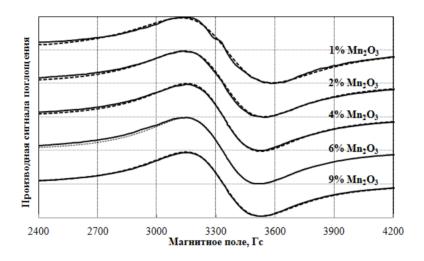


Рис.3. Логарифмическая зависимость проводимости (lgσ) от обратной температуры 1/T (в интервале от 290 до 500K) для некоторых BV–стекол с различным содержанием Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

#### Таблица 1

Зависимость g-фактора, ширины  $\Delta H_{pp}$  одиночной изотропной линии, теоретической концентрации  $V^{4+}$  и  $Mn^{2+}$  и экспериментальных значений концентрации парамагнитных центров (ПЦ) и ионов  $V^{4+}$ 

в BaO– $V_2O_5$  стекле от содержания примеси  $Mn_2O_3$ .

ĺ	$Mn_2O_3$	σ	ΔНрр,	Теоретич.	Теоретич.	Эксперим.	Эксперим.
	% Will <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ,	g- фактор	дпрр, Гс	конц-ия V	конц-ия Мп	конц-ия ПЦ	конц-ия $V^{4+}$
	/0	фактор	10	на 1 г.	на 1 г.	на 1 г.	на 1 г.
ĺ	0	-	-	6,95E+21	0,00E+00	5,59E+19	5,59E+19
ĺ	0,1	1,952	480	6,94E+21	7,62E+18	1,16E+20	3,75E+19
	0,3	1,999	460	6,93E+21	2,29E+19	3,95E+20	3,04E+19

0,5	2,000	460	6,91E+21	3,81E+19	5,60E+20	2,15E+19
1	2,000	460	6,88E+21	7,62E+19	1,05E+21	следы
2	2,008	420	6,81E+21	1,52E+20	1,56E+21	-
3	2,009	410	6,74E+21	2,29E+20	2,20E+21	-
4	2,015	390	6,67E+21	3,05E+20	2,96E+21	-
5	2,015	400	6,60E+21	3,81E+20	2,88E+21	-
6	2,015	390	6,53E+21	4,57E+20	2,97E+21	-
7	2,016	390	6,46E+21	5,33E+20	4,69E+21	-
8	2,016	400	6,39E+21	6,10E+20	6,23E+21	-
9	2,014	380	6,32E+21	6,86E+20	6,69E+21	-

Концентрация Мп <sub>2</sub> О <sub>3</sub> ,	Ε,	$\sigma_0,$
масс.%.	эВ	$\sigma_0, \ \mathrm{Om^{-1} \cdot m^{-1}}$
0%	0,45	187
2%	0,47	162
4%	0,48	53
6%	0,52	65
8%	0,53	34

Таблица 3 Значения g-фактора для антиферромагнитной (АФМС) и ферромагнитной связи (ФМС), рассчитанные с помощью (3) и (4) для изученных стекол (см. Табл.1).

$S_1$	$S_2$	g <sub>1</sub>	$g_2$	S <sub>1</sub> +1	$(S_1+1) - S_2$	g AФMC	g ФМС
2,5	0,5	2	1,95	3,5	3	2,008	1,992

#### 4. Обсуждение результатов

Как отмечалось выше, бариево—ванадатные стекла содержат ванадий в состоянии  $V^{4+}$ , который принимает форму иона ванадила  $VO^{2+}$ с одной укороченной связью V=O, при этом электрическое поле вокруг  $V^{4+}$  имеет форму сжатого вдоль этой связи — тетрагональной оси кислородного октаэдра (симметрия— $C_{4\nu}$ ). В силу аксиальной симметрии спектр ЭПР описывается спин-гамильтонианом:

$$\mathbf{H} = g_{||} \beta H_z S_z + g_{\perp} \beta (H_x S_x + H_y S_y) + A_{||} S_z I_z + A_{\perp} (S_x I_x + S_y I_y). \tag{2}$$

3десь z — ось симметрии отдельного парамагнитного центра, каждый из которых ориентирован друг относительно друга произвольно. При приложении внешнего магнитного поля тетрагональная ось z каждого парамагнитного комплекса направляется вдоль поля (чему соответствует индекс II), тогда как индекс  $\bot$  соответствует направлению поля, лежащему в плоскости, перпендикулярной оси z.  $\beta$  – магнетон Бора. Результирующий спектр получается путем интегрирования сигналов от всех комплексов, при этом вследствие усреднения по углам в нем можно выделить «параллельную» и «перпендикулярную» составляющие. Так как спектр  $V^{4+}$  в исследованных стеклах имеет сложную форму со сверхтонкой структурой (СТС), его параметры СТС были определены путем сопоставления экспериментального спектра с рассчитанным [10]. Параметры спин-гамильтониана (2) для иона  $V^{4+}$  в BV- стекле равны: g<sub>II</sub> = 1,923;  $g_{\perp}$ = 1,970;  $A_{\parallel}$  = 162·10<sup>-4</sup> см<sup>-1</sup>;  $A_{\perp}$  = 55·10<sup>-4</sup> см<sup>-1</sup>. С точностью до ошибок измерения они совпадают с параметрами, полученными в других работах, например в [5].

Как следует из рис.16, спектр ЭПР BV–стекла с 0,1%  $\rm Mn_2O_3$  содержит три сигнала. Один из них принадлежит ионам  $\rm V^{4+}$  с приведенными выше параметрами. Другой содержит изотропную шестикомпонентную СТС, которая характеризуется параметрами  $\rm g=2,0023$  и  $\rm A=65\cdot 10^{-4}\rm cm^{-1}$ . Этот спектр обусловлен ионами  $\rm Mn^{2+}$  в слабом магнитном поле, удовлетворяющем условию  $\rm \it D,\it E << g\beta H$  [8], где  $\rm \rm \it D,\it E - константы$  тонкой структуры. Значение спина ядра  $\rm ^{55}Mn$  I=5/2 отвечает за шестикомпонентную СТС. Третий спектр представляет собой синглетную линию лоренцевой формы с  $\rm \it g=1,96}$  и шириной  $\rm \it \Delta \it H = 800~\Gamma c$  (ширина между экстремумами производной  $\rm \it \Delta \it H_{pp} = 480~\Gamma c$ ). Он может быть приписан ионам  $\rm \it V^{4+}$ , связанным обменными взаимодействиями [11].

Марганец, введенный в бариево-ванадатное стекло, может существовать в различных состояниях окисления. Высокое значение оптической основности, рассчитанной по формулам работы [12] для бариевованадатного стекла изученного состава (Л=0,658), способствует появлению Mn в высших формах окисления. Как отмечалось выше, в BV- стеклах с Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub> наблюдается линия ЭПР с шестикомпонентной СТС, которая была приписана иону  $Mn^{2+}$ . Увеличение ширины линий СТС  $V^{4+}$  с ростом концентрации Мп<sub>2</sub>О<sub>3</sub> до 1 масс. % можно объяснить дипольдипольным взаимодействием между ионами ванадия и марганца. Появление синглетных линий лоренцевой формы выше 1% может быть связано с обменным взаимодействием между ионами  $V^{4+}$  и  $Mn^{2+}$ . При кон-(2-3) масс.% наблюдаются синглетные линии с центрации Мп<sub>2</sub>О<sub>3</sub> g=2,08-2,09. Мы предполагаем, что эта линия может быть результатом образования пар V<sup>4+</sup> – Mn<sup>2+</sup>, связанных сильным антиферромагнитным взаимодействием. Такое заключение можно сделать на основании анализа значений д-фактора для стекол, изученных в настоящей работе.

В работе [13] показано, что в пределе сильного обменного взаимодействия двух различных ионов со спинами  $S_1$  и  $S_2$  сигналы ЭПР характеризуются эффективным  $g^{(i)}$ -фактором, описываемым выражением:

$$g = [(S_1+1)g^1 - S_2g^2] / (S_1+1-S_2)$$
(3)

для антиферромагнитной связи при  $S_1 > S_2$  и

$$g = (S_1 g^1 + S_2 g^2) / (S_1 + S_2)$$
(4)

для ферромагнитной связи.

Из табл.3 следует, что в паре  $V^{4+}$ – $Mn^{2+}$  значение g–фактора удовлетворяет случаю антиферромагнитной связи. Анализ данных, представленных в табл.1, показывает, что концентрация парамагнитных центров, вносящих вклад в синглетную линию при содержании  $Mn_2O_3$  выше 2 масс.%, в несколько раз больше экспериментально определенной концентрации  $V^{4+}$  в исходном нелегированном образце BV–стекла, т.е. возможное содержание ионов  $V^{4+}$  недостаточно для образования пар. Повидимому, эта линия обусловлена обменно связанными в кластеры ионами  $V^{4+}$  и ионами Mn.

На рис.3 видно, что температурная зависимость проводимости на постоянном токе в бинарном бариево—ванадатном стекле и в марганец—содержащих стеклах идентична и указывает на то, что и в том и в других случаях перенос носителей тока осуществляется по ванадиевым узлам. При высоких температурах  $(T > 1/2\theta_{\rm д})$ , где  $\theta_{\rm д}$  — температура Дебая, имеет место прыжковый механизм проводимости, при низких — проводимость осуществляется через смешанный прыжковый и зонный механизм.

Уменьшение проводимости при введении и последующем увеличении концентрации  $Mn_2O_3$  может быть обусловлено двумя причинами. Вопервых, это может быть связано с уменьшением содержания ионов  $V^{4+}$  в результате реакции  $V^{4+}+Mn^{3+}=V^{5+}+Mn^{2+}$ , происходящей в процессе синтеза стекла, и, во-вторых, с тем, что ионы  $V^{4+}$ , входящие в антиферромагнитую пару  $V^{4+}$ – $Mn^{2+}$ , не участвуют в процессе переноса заряда.

Известно, что высокотемпературная проводимость определяется термически активированным прыжковым механизмом малых поляронов. Избыточный электрон искажает окружающую решетку таким образом, что возникает потенциальная яма достаточно глубокая, чтобы индуцировать локализацию электрона. Радиус полярона должен быть больше, чем радиус иона, на котором локализуется электрон, но меньше, чем расстояние между узлами. Термическая активация поляронов происходит в результате взаимодействия с оптическими фононами.

Проводимость на постоянном токе описывается при высоких температурах законом Аррениуса (2), но ниже комнатной температуры энергия активации уменьшается постепенно с понижением температуры. Энергия активации определяется выражением

$$E=W_{\rm H}+(1/2)W_{\rm D}+\Delta U$$
 (5)

где  $W_H$  — энергия активации прыжка полярона,  $W_D$  — энергия разупорядочения окружения иона V [3],  $\Delta U$  — энергия взаимодействия между ионами V и Mn. Каждое из этих слагаемых может вносить вклад в изменение энергии активации проводимости бариево—ванадатных стекол при легировании оксидами Mn:

$$W_{\rm H} = (e^2/16\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\rm p})(r_{\rm p}^{-1} - R^{-1}), \qquad W_{\rm D} = (0.3e^2/4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\rm s}R),$$
 (6)

где  $r_{\rm p}$  — радиус малого полярона; R — среднее расстояние между ванадиевыми узлами;  $\epsilon_{\rm p}^{-1} = (\epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_{\rm s}^{-1})$ ,  $\epsilon_{\infty}$  и  $\epsilon_{\rm s}$  — оптическая и статическая диэлектрические константы, соответственно;  $\epsilon_{\infty} = n^2$ , где n — коэффициент преломления света в исследуемых стеклах[14].

Для BV-стекла  $\varepsilon_s$  = 51; при введении  $Mn_2O_3$  от 2 до 8 масс.% эта величина колеблется в интервале 49÷55, т.е. статическая диэлектрическая константа практически не зависит от содержания примеси. Это позволяет предположить, что проводимость в стеклах с  $Mn_2O_3$  осуществляется по ванадиевым узлам. Величину  $\varepsilon_{\infty}$  определить невозможно, так как стекла непрозрачны и измерение коэффициента преломления  $\boldsymbol{n}$  для них затруднено. Таким образом, при введении  $Mn_2O_3$  на величину энергии активации влияют  $r_p$ , R и  $\Delta U$ .

В работе [15] показано, что проводимость ванадатных стекол почти не зависит от концентрации и природы модификатора. Ионы Мп в бариево-ванадатном стекле играют роль модификатора, замещающего Ва. Можно предположить поэтому, что ванадиевая сетка стекла не меняется при введении  $Mn_2O_3$ . Нейтронная дифракция бариево-ванадатных стекол [16] показывает, что атомы Ва случайно распределены в дырках ванадатной сетки, связанных с немостиковыми атомами кислорода. Ионы Мп, по-видимому, занимают такие же позиции.

Используя значение концентрации ионов V в BV-стекле, приведенное в Табл.1, и плотность стекла этого состава  $d=3,49~\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$  из работы [17], находим, что среднее расстояние между ионами ванадия R=0,35 нм. Согласно [16], расстояние V-O в бариево-ванадатных стеклах ~0,17 нм, что соответствует полученным нами результатам для R (V-0-V). Как отмечалось выше, из-за высокой основности BV-стекла Мп может входить в него в высших формах окисления (например, Mn³+, Mn⁴+). При больших концентрациях Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub> не исключено образование более крупных

кластеров между ионами V и Mn в высших валентных формах. Присутствие этих кластеров может привести к изменению R. Учитывая положение ионов Мп как модификаторов в сетке бариево-ванадатного стекла, можно предполагать, что при введении  $Mn_2O_3$  величина  $r_p$  не меняется С другой стороны, ионы Mn располагаются вблизи ионов V, с которыми они могут взаимодействовать по закону Кулона, а также благодаря спин-спиновым связям. В частности, выше было показано, что ионы V<sup>4+</sup> и Mn<sup>2+</sup> образуют антиферромагнитные пары, связанные сильным обменным взаимодействием. Возможно также образование кластеров этих пар с ионами Mn<sup>4+</sup>. В случае антиферромагнитных и ферромагнитных взаимодействий между ними и учитывая, что g=1,992 для иона  $Mn^{4+}[18]$ , величина g=2,013 для таких кластеров практически совпадает для изученных стекол при концентрации Мп<sub>2</sub>О<sub>3</sub> больше 4 масс.% (табл.1), что подтверждает это предположение. Следовательно, величина  $\Delta U$  в формуле (5) может быть обусловлена энергией взаимодействия между ионами V и Mn.

Таким образом, изменение энергии активации при введении  $Mn_2O_3$  в бариево- ванадатное стекло обусловлено образованием обменных пар  $V^{4+}$ -  $Mn^{2+}$  и более крупных кластеров между ионами V и Mn. Последние влияют на межионное расстояние V- V, а также вносят прямой вклад в энергию активации.

#### Заключение

С помощью ЭПР исследовались взаимодействия между ионами V и Mn и их влияние на электрические свойства в бариево- ванадатных стеклах. Установлено, что в исходном бариево-ванадатном стекле ванадия присутствует в форме  $V^{4+}$  и  $V^{5+}$ . При введении от 0,1 до 0,5 масс.%  $Mn_2O_3$  в спектре ЭПР наблюдался сигнал со сверхтонкой структурой иона  $Mn^{2+}$ . При концентрации  $Mn_2O_3$  2-3 масс.% образуются пары  $V^{4+}$  -  $Mn^{2+}$ , связанные сильным обменным взаимодействием. При концентрации  $Mn_2O_3$  выше 4 масс.% синглетные линии ЭПР указывают на образование крупных кластеров ионов V с ионами Mn. Электропроводность бариевованадатных стекол выше комнатной температуры осуществляется через прыжки малых поляронов. С ростом содержания  $Mn_2O_3$  проводимость стекол убывает вследствие образования пар  $V^{4+}$  -  $Mn^{2+}$  и крупных кластеров ионов V и Mn за счет изменения расстояния V-V и прямого вклада энергии обменного взаимодействия в энергию активации.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Lozarda-Morales R., Cid-Garcia A., Cervantes-JUarez E., etc . Analysis of vanadate compoUnds and glasses from CUO-CdO- $V_2O_5$  ternary system // J. Non-Cryst. Solids. 2014. Vol. 398/399. P. 10-15.

- 2. Denton E.P., Rawson H, Stanworth J.E. Vanadate glasses // NatUre. 1954. Vol. 173. P. 1030-1032.
- 3. Greaves G.N. Small polaron condUction in V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>–P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> glasses // J. Non-Cryst. Solids. 1973. Vol.11(2). P. 427-439.
- 4. Bogomolova L.D., Glassova M.P. The impUrity effects in vanadate semicondUcting glasses // J. Non-Cryst. Solids. 1980. Vol. 37. P. 423-426.
- 5. Bogomolova L.D., Jachkin V.A., Glassova M.P. Vanadate semicondUcting glasses doped with oxides of other transition metals // JoUrnal de PhysiqUe. 1981. Vol. 42. ColloqUe C4, sUp.l, aU №10. C.4-993-996.
- 6. Bogomolova L.D., Spasibkina S.N. AmorphoUs bariUm vanadates doped with of transition metals // Physica. 1983. Vol. 117B/118B. P. 998-1000.
- 7. Bogomolova L.D., Glassova M.P., Spasibkina S.N. Electrical properties of semicondUcting bariUm vanadate glasses doped with Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> // J. Non-Cryst. Solids.1986. Vol. 85. P. 170-185.
- 8. Griscom D.L. Electron spin resonance in glasses // J. Non-Cryst. Solids. 1980. Vol. 40. P. 211-272.
- 9. AUstin I. G., Mott N.F. Polarons in crystalline and non-crystalline materials // Adv. Phys. (GB). 1968. Vol. 18(71). P. 41-57.
- 10. Богомолова Л.Д., Жачкин В.А. и др. ЭПР ионов  $CU^{2+}$  в стеклах на основе тетрафторидов циркония и гафния // Физика и химия стекла. 1987. Т.13. № 2. С.202-208.
- 11. Horvath L.I., Geresdi I., Szorenyi T. The role of spin-spin interaction in the electrical condUctivity of vanadiUm-phosphate glasses // J. Non-Cryst. Solids. 1985. Vol.70(3). P. 429-438.
- 12. DUffy J.A., Ingram M.D. An interpretation of glass chemistry in terms of optical basicity concept // J. Non-Cryst. Solids. 1976. Vol. 21. P. 373-410.
- 13. BUlUggiU E, Vera A. Effective g-tensor of a pair of dissimilar ions in the strong isotropic exchange limit // Z. NatUrforsch. 1976. Vol. 31a(8). P. 911-914.
- 14. Isard J.O. The Application of polaron theory in oxide glasses // J. Non-Cryst. Solids. 1980. Vol. 42. P. 371-380.
- 15. Kawamoto Y., FUkUzUka M., Ohta Y., Imai M. Electronic condUction and glass strUctUre in V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-BaO-K<sub>2</sub>O-ZnO glasses // Phys. Chem. Glasses. 1979. V. 20(3). P. 54-59.
- 16. Wright A.C., Yarker C.A., Johnson P.A.V., Sinclair R.N. A neUtron diffraction investigation of the strUctUre of phosphorUs, bariUm and lead vanadate glasses // J. Non-Cryst. Solids. 1985. Vol. 76. P. 333-350.
- 17. Kawamoto Y., Tanida J., Hamada H., Kiriyama H. VanadiUm-bronze-vanadate glasses in the system V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-V<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Ba<sub>0,5</sub>Zn<sub>0,5</sub>O and their

- magnetic and electrical properties // J. Non-Cryst. Solids. 1980. Vol. 38/39. P. 301-306.
- 18. Bottcher R., Langhammer H.T., MUller T. EPR parameters of Mn<sup>4+</sup> in BaTiO<sub>3</sub> crystals. // J.Phys.Condens.Matter. 2005. V.17. P. 4925-4929.

УДК 533

## В.С. Зиборов<sup>1</sup>, Р.А. Галиуллин<sup>1,2</sup>, В.П. Ефремов<sup>1</sup>, В.В. Шумова<sup>1</sup>, В.Е. Фортов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединённый Институт Высоких Температур РАН (ОИВТ РАН) <sup>2</sup>ООО «РезонансЪ»

# ПРИМЕНЕНИЕ ЛАЗЕРНОГО ШЛИРЕН МЕТОДА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЙ СТРУКТУРЫ ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ В ГЕЛИИ С МАЛОЙ ПРМЕСЬЮ ТЯЖЕЛЫХ МОЛЕКУЛ

Аннотация. Изменение градиента плотности газа во фронте ударной волны в He, содержащем (0.1-1.0)% Xe, измерено лазерным шлирен методом в диапазоне чисел Маха M=(2.8-3.1) при давлениях за фронтом УВ в условиях равновесия P=(0.4-0.6) атм. Обнаружено, что протяженность зоны поступательной релаксации УВ в исследованном диапазоне линейно растет с концентраций Xe.

*Ключевые слова:* фронт ударной волны, градиент плотности, пространственное разрешение, неравновесная функция распределения энергии парных соударений, зона поступательной релаксации

## V. Ziborov<sup>1</sup>, R. Galiullin<sup>1,2</sup>, V. Efremov<sup>1</sup>, V. Shumova<sup>1</sup>, V. Fortov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Joint Institute for High Temperatures of RAS (JIHT) <sup>2</sup>OOO «ResonansЪ»

#### APPLICATION OF LASER SHLIEREN METHOD FOR MEASURMENT OF SHOCK FRONT STRUCTURE IN HELIUM WITH SMALL ADMIXTURE OF HEAVY MOLTCULES

Abstract. Change in the gradient of gas density in the shock wave front in He containing (0.1 - 1.0)% Xe is measured using the laser schlieren method in the range of Mach numbers M = (2.8 - 3.1) at equilibrium pressures behind the

shock front P = (0.4 - 0.6) atm. It is found that the length of the shock front in this range increases linearly with the concentration of Xe.

*Keywords*: shock wave front, density gradient, space resolution, nonequilibrium distribution function of binary collisions energy, translation relaxation zone

В работах [1,2] было обнаружено, что распространение фронта слабой ударной волны в лёгком инертном газе He, содержащем малую примесь тяжелых молекул Mo (CO)<sub>6</sub>, сопровождается интенсивным неравновесным излучением в УФ диапазоне, появлением заряженных частиц и электронного предвестника. Обнаружено, что эффективная энергия активации ионизации составляет всего  $\sim 0.8$  эВ, что почти на порядок величины ниже, чем порог ионизации Mo(CO)<sub>6</sub>, при том, что равновесные температура и давление за УВ (T $\sim 1000$ K, P  $\sim 0.5$  атм.) были весьма умеренными.

Количественное описание механизма наблюдаемого эффекта требует знания неравновесной функции распределения энергии парных соударений во фронте УВ, для численного моделирования которой необходимы данные распределения плотности, чтобы устранить неопределённость при выборе подгоночных параметров модели.

Целью данного исследования является измерение распределения плотности во фронте УВ в близких условиях, в смеси He + Xe.

Исследования проведены в условиях, близких к условиям [1]. Отличие в том, что  $Mo(CO)_6$  заменён на Xe, что значительно упрощало и ускоряло эксперименты: концентрация Xe = (0.1 - 1.0)%, равновесные температура и давление за фронтом УВ T=(950-1150)K, P=(0.4-0.6) атм.). Использованы газы высокой чистоты (99.9996%). Генератором УВ служила высоковакуумная ударная труба «Яшма» (100 мм калибр, 8 м длина камеры низкого давления, остаточное давление фонового газа менее  $\sim 1.0*10^{-6}$  мм рт.ст.).

Измерения изменения градиента плотности (ГП) (см. рис.1) выполнены усовершенствованным лазерным шлирен методом [3,4], пространственное разрешение  $20\pm1$  мкм. Временное разрешение электронной схемы измерений не хуже 2 нс. Не-Ne лазер генерировал зондирующий пучок ( $\lambda$ = 632 нм).

Основные соотношения метода:

$$\Delta I = f(\Delta n)$$
,

где  $\Delta I$  — изменение интенсивности регистрируемого излучения, вызванного поворотом пучка света при прохождении сквозь среду с резким градиентом коэффициента преломления n, который в свою очередь является функцией от плотности вещества [3,4].

Типичные осциллограммы показаны на рис. 2. Видно, что сигнал имеет немонотонную форму, которая, по-видимому, отражает особенности распределения плотности в зоне поступательной релаксации УВ. Показаны осциллограммы, полученные в близких режимах (число Маха в диапазоне  $2.7\pm0.1$ ) в смесях  $(0.1,\,0.5,\,1.0)\%$  Хе в Не. Хорошо видно, что начальный участок сигнала (отрезок 1-2) примерно 80-90 нс, на всех осциллограммах имеет одинаковый наклон.

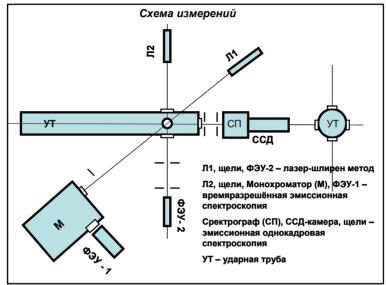


Рис.1. Схема измерений на высоковакуумной ударной трубе «Яшма».

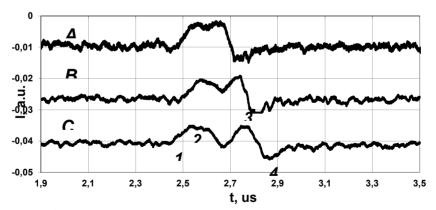


Рис.2. Типичные осциллограммы шлирен сигналов, полученные при числах Маха  $2.7\pm0.1$  в чистом гелии (*A*), в смесях 0.5%Хе и 1.0%Хе в Не (*B*) и (*C*) соответственно; 1,2,3,4 — характерные точки.

Далее форма сигналов становится выражено немонотонной (отрезок 2-3). В экспериментах с большими концентрации ксенона наблюдается большая протяженность сигнала T (отрезок 1-4). Значения измеренных величин T в сопоставлены с концентрацией Xe на рис. З. Хорошо видно, что в исследованном диапазоне концентраций тяжёлого газа эта зависимость имеет линейный характер и изменяется примерно от  $\sim 220$  нс при [Xe] = 0.1% до  $\sim 450$  нс при [Xe] = 1.0%.

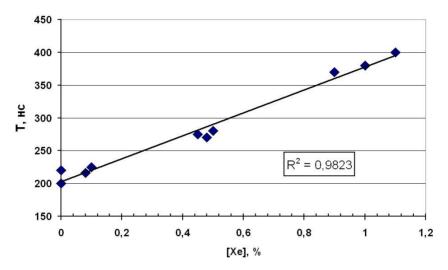


Рис.3. Зависимость протяженности зоны поступательной релаксации от концентрации Xe. Ромбы — измеренные в экспериментах величины, сплошная линия — линейная аппроксимация.

Одинаковый наклон начального участка шлирен сигнала (отрезок 1 — 2 на рис.2), по-видимому, связан с тем, что наибольший градиент плотности определяется лёгким газом Не, который и определяет радиус стрелы прогиба фронта УВ в пограничном слое на поверхностях иллюминаторов наблюдения [4].

Выводы: Впервые удалось экспериментально обнаружить зависимость параметров зоны поступательной релаксации УВ в лёгком несущем газе от концентрации малой примеси тяжелого газа. Установлено, что в исследованных режимах зависимость имеет линейный характер. Получены экспериментальные данные, позволяющие определить подгоночные параметры для численных моделей неравновесной функции распределения энергии парных соударений во фронте УВ.

Работа поддержана Грантом РФФИ - № 12-08-01266-а и Программой Президиума РАН – 1.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Зиборов В.С., Ефремов В.П., Фортов В.Е. Эффект ионизации во фронте слабой ударной волны, распространяющейся в инертном газе, разбавленном малой концентрацией Мо(СО)<sub>6</sub> // Письма в ЖЭТФ, 2007б Т. 86, №3, с. 211-215.
- 2. Ziborov V.S., Efremov V.P., Shumova V.V., Fortov V.E. The structure of shock wave front in helium containing the small concentration of the heavy molecules Mo(CO)<sub>6</sub>.// ISIS -18, Proc., Rouen 2008 pp. 165-169
- 3. Зиборов В.С. Методы и техника исследования ударных волн и плазмы за ударными волнами // Энциклопедия низкотемпературной плазмы под ред. Колесникова В.Н., Москва, ЯНУС-К, 2006, стр.88-135
- 4. Kiefer J., in Shock Waves in Chemistry, Ed. by A. Lifshitz (Marcel Dekker, New York, 1981), p. 219

УДК 681.883.7

Д.А. Евсевичев, О.В. Максимова, С.М. Максимов Ульяновский государственный технический университет

#### МЕТОДОЛОГИЯ СИНТЕЗА ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ИНДИКАТОРОВ

Аннотация. В статье рассматриваются вопросы выбора и применения метода синтеза тонкопленочного электролюминесцентного индикатора. Авторским коллективом изучены методы параметрического синтеза и структурно-параметрического синтеза тонкопленочных электролюминесцентных индикаторов. Проведенное сравнение методов синтеза тонкопленочных электролюминесцентных индикаторов позволил выделить структурно-параметрический синтез как наиболее эффективный, благодаря простоте формализации и возможности поиска оптимального проектного решения с непосредственным оперированием в процессе поиска структурой и параметрами устройства.

*Ключевые слова:* тонкие пленки, электролюминесценция, индикатор, проектирование, синтез.

#### D. Evsevichev, O. Maksimova, S. Maksimov Ulvanovsk State Technical University

### THIN-FILM ELECTROLUMINESCENT INDICATORS SYNTHESIS METHODOLOGY

Abstract. This article discusses the selection and application of the thin-film electroluminescent indicator synthesis method. thin-film electroluminescent indicators parametric synthesis and structural-parametric synthesis methods were studied by the group of authors. A comparison of thin-film electroluminescent indicators synthesis methods allowed to identify structural and parametric synthesis as the most effective, due to the simplicity and the search formalizing possibility for the optimal design solution with direct device structure and parameters handling during the search.

Key words: thin films, electroluminescence, display, design, synthesis.

Важным элементом функционирования современных электронных устройств являются средства отображения информации, обеспечивающие ее представление в пригодном для зрительного восприятия виде. Рассмотрение разновидностей таких устройств позволяет выделить ряд классов средств отображения информации. Наиболее распространенным из этих классов является индикаторная техника благодаря удобству и скорости визуализации информации.

Сравнительный анализ перечисленных индикаторов [1] позволяет сделать вывод о том, что ТПЭЛ дисплеи превосходят по светотехническим характеристикам жидкокристаллические дисплеи, однако уступают OLED дисплеям, что, впрочем, компенсируется высокими конструкторско-технологическими параметрами (среднее время безотказной работы, диапазон рабочих температур, радиационная стойкость). Благодаря перечисленным достоинствам и высокому качеству изображения ТПЭЛ дисплеи находят широкое применение в средствах отображения информации и идеально подходят для применения в сложных условиях, когда приборы на основе других технологий не дают необходимых результатов. Электролюминесцентные дисплеи чаще всего применяются в оборудовании и системах, от которых требуются высокие качество изображения и надежность, а также длительный срок службы устройств. Такие особенности ТПЭЛ дисплеев обуславливают их применение прежде всего в военной, медицинской, морской и космической отраслях, где предъявляются жесткие требования к аппаратуре.

Процесс проектирования индикаторов заключается в принятии проектных решений, обеспечивающих выполнений разрабатываемым индикатором предъявляемых к нему требований.

Существующие методики разработки конструкций индикаторов

представляют собой приёмы и способы действий, используемые с целью достижения желаемого результата в процессе проектирования. Сложность процессов проектирования и нестандартность решаемых проектных ситуаций вызывают необходимость выбора метода, который обеспечивает требуемый уровень эффективности принятых решений. Наиболее полно отвечают предъявленным требованиям методы параметрического и структурно-параметрического синтеза, благодаря простоте их формализации и возможности поиска оптимального проектного решения с непосредственным оперированием в процессе поиска структурой и параметрами устройства.

Модели, используемые в параметрическом и структурнопараметрическом синтезе различаются по нескольким признакам, с учетом [3] (таблице 1).

Проанализировав представленную сравнительную таблицу, можно сделать вывод о том, что при параметрическом синтезе индикатора поиск проектного решения конструкции осуществляется в области допустимых значений параметров при сохранении структуры, в то время как при структурно-параметрическом синтезе индикатора поиск решения производится в пространстве структур и значений конструктивных параметров. Следовательно, при структурно-параметрическом синтезе можно смоделировать универсальную модель, описывающую класс ТПЭЛ индикаторов с различными структурными особенностями, то есть с заданием монохромности или полноцветности устройства и количеством и составом слоев. Универсальная модель обеспечивает ограничения на множество структур индикатора, на котором организуется поиск технического решения.

Таблица 1 Сравнение моделей для структурного и структурнопараметрического синтеза

Синтез				
Параметрический	Структурно-параметрический			
Структура модели фиксирована и не изменяется в процессе синтеза	Структура модели заранее неизвестна и модель формируется автоматически			
Изменяются только параметры (номиналы элементов). Поиск осуществляется в пространстве параметров	Изменяются как структура, так и параметры. Поиск осуществляется в пространстве структур и параметров			
Размерность вектора параметров фиксирована	Размерность вектора параметров заранее неизвестна и может быть определена только после того, как будет определена структура			

Методика проектирования ТПЭЛ индикатора может быть разработана при помощи анализа математического аппарата расчета его основных электрических и светотехнических характеристик и их взаимосвязи с типом и параметрами выбранной конструкции [1]. В общем случае, процесс проектирования ТПЭЛ индикатора выглядит следующим образом – использую заданные в техническом задании электрические характеристики можно разработать нелинейные математические модели, обеспечивающие расчет допустимых и оптимальных конструктивных параметров. Использование заданных светотехнических характеристик позволяет ограничить диапазон допустимых значений параметров и выбрать соответствующую конструкцию.

Процесс проектирования ТПЭЛ индикатора состоит из этапов разработки и анализа технического задания на проектируемый индикатор, структурного и параметрического синтеза, в результате выполнения которых определяются структура и конструктивные параметры индикатора, и анализа, при котором определяются основные функциональные характеристики индикатора, сравниваются с требованиями технического задания и в случае необходимости корректируется задача синтеза.

Такой подход к проектированию позволил разработать и сформулировать методы решения задач структурного синтеза, параметрического синтеза и анализа ТПЭЛ индикатора.

Первым этапом проектирования является селективный структурный синтез, заключающийся в поиске допустимых проектных решений и отсеве структурных элементов по параметрам длины волны, пороговой напряженности и диэлектрической проницаемости люминофоров, электрической прочности и диэлектрической проницаемости диэлектриков. Для описания множества структурных решений были использованы морфологические И–ИЛИ деревья:

На рис. 2 в прямоугольниках (в вершинах) отображены способы включения и элементы ТПЭЛ индикаторов. Связь типа «И», обозначаемая сплошной линией, характеризует компоненты, которые обязательно войдут в проектируемый индикатор, связь типа «ИЛИ» (пунктирная линия), характеризует компоненты, в которых только один из набора вариантов войдет в проектируемый индикатор.

В процессе выполнения структурного синтеза ТПЭЛ индикатора формируется множество альтернатив конструкций индикаторного элемента. Итоговые конструкции ТПЭЛ индикаторов выбираются в параметрическом виде, т. е. без указания числовых значений параметров элементов.

Следующий этап — редукционный параметрический синтез, позволяющий рассчитывать оптимальные конструкции ТПЭЛ структур с учетом требований, предъявляемых к проектируемому индикатору и на основе методов математического программирования.

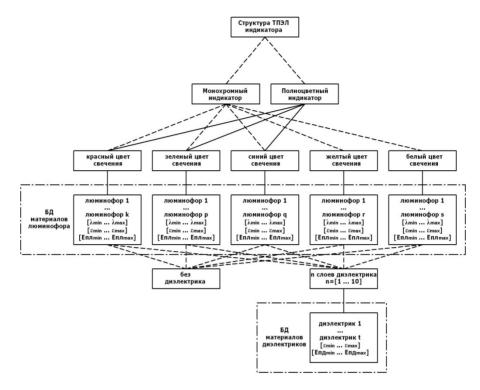


Рис. 2. Морфологическое И-ИЛИ дерево структуры ТПЭЛ индикатора

Основными требованиями, предъявляемыми к ТПЭЛ индикаторам, являются высокие электрические и светотехнические характеристики и параметры, а также их стабильность во времени [2].

Принятие лучшего решение означает выбор такой альтернативы из числа возможных, в которой с учетом всех разнообразных факторов будет оптимизирована общая эффективность структуры индикатора. Для ТПЭЛ индикаторов важнейшими характеристиками являются светотехнические и электрические. Такими функциями выступают зависимость максимальной яркости индикатора от толщины люминесцентного слоя и зависимость порогового напряжения от толщин люминесцентного и диэлектрических слоев [3]. Эти функции характеризуют такие параметры, как средняя мощность, средняя яркость, продолжительность свечения источника излучения.

Процесс решения задачи параметрического синтеза для полноцветных ТПЭЛ индикаторов, в структуру которых входит три слоя люминофора, аналогичен синтезу монохромного индикатора. Это объясняется особенностью структуры такого типа индикаторов (подробно рассмот-

ренных в первом разделе), каждый субпиксель которого является по сути самостоятельным монохромным ТПЭЛ индикатором. Ограничением, накладываемым на структуру такого типа индикаторов является необходимость реализации соответствующих люминесцентных и диэлектрических слоев одинаковой толщины. Причина такого ограничения является чисто технологической и связана с особенностями производства современных ТПЭЛ дисплеев.

Еще одним дополнительным этапом при проектировании ТПЭЛ индикаторов является этап анализа конструкций ТПЭЛ индикаторов.

Процедура квалиметрического анализа ТПЭЛ индикатора заключается в исследовании самого проектируемого индикатора и его описания, направленном на получение информации о его свойствах. Цель анализа – проверка работоспособности индикатора. Проектная процедура анализа ТПЭЛ индикатора позволяет проводить исследование свойств синтезированного варианта индикатора с использованием разработанных математических моделей [5]. На данном этапе происходит принятие проектного решения, то есть выбор варианта конструкции индикатора из сформированных на этапе синтеза альтернативных вариантов.

Решение задачи анализа ТПЭЛ индикатор включает расчет электрических характеристик и параметров (пороговое напряжение, максимальное рабочее напряжение, ток проводимости, средняя рассеиваемая мощность и др.) и светотехнических характеристик и параметров (максимальная и средняя яркость свечения, максимальная и средняя светоотдача и др.) при рассчитанных оптимальных конструктивных параметрах [6].

Процесс принятия проектного решения варианта конструкции ТПЭЛ индикатора носит итерационный характер. Коррекция спроектированной ТПЭЛ структуры выполняется при условии неудовлетворения синтезированного варианта проекта индикатора поставленным требованиям [7].

Решение представленных задач позволяет спроектировать оптимальную конструкцию ТПЭЛ индикатора и определить выполнимость технических условий на проектирование [8].

Представленные методы были использованы при разработке в среде Delphi 7 с использованием императивного, структурированного, объектно-ориентированного язык программирования Delphi системы автоматизированного проектирования ТПЭЛ индикаторов IDECSoft. Разработанная автоматизированная система представляет собой прикладное программное обеспечение, запускаемое из операционной системы Windows. Программа работает непосредственно с пользователем, устанавливая необходимые связи для проведения расчета.

Представленный программный продукт был зарегистрирован (свидетельство о регистрации программы для ЭВМ №2012617588 от 22.08.2012) и внедрен в учебный процесс на кафедре «Проектирование и технология электронных средств» Ульяновского государственного тех-

нического университета и на производстве в ОАО «Ульяновское конструкторское бюро приборостроения». Исследования показали высокую точность программы при расчете светотехнических и электрических характеристик при проектировании ТПЭЛ индикатора и её эффективность при расчете оптимальной конструкции индикатора.

Представленные методы и разработанный на их основе программный продукт обеспечивают автоматизацию конструкторского проектирования ТПЭЛ индикаторов. Полученные в результате выполнения данной работы выводы и результаты могут быть использованы в лабораториях и конструкторских бюро, занимающихся проектированием и исследованием электролюминесцентных источников излучения.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Евсевичев, Д.А. Методы и средства структурно-параметрического синтеза тонкопленочных электролюминесцентных индикаторов в автоматизированном проектировании / Д.А. Евсевичев, О.В. Максимова; под редакцией профессора М.К. Самохвалова. Ульяновск : УлГТУ, 2014. 92 с.
- 2. Максимова, О.В. Анализ процессов проектирования и технологии наноструктурированных тонкопленочных электролюминесцентных индикаторных устройств / О.В. Максимова, М.К. Самохвалов, С.М. Максимов // Вестник Московского государственного областного университета, серия «Физика и математика», М.: МГОУ, 2013 г. №3. С.74-78.
- 3. Максимова, О.В. САПР тонкопленочных электролюминесцентных индикаторов / О.В. Максимова, Д.А. Евсевичев // Вестник Московского государственного областного университета, серия «Физика и математика», М.: МГОУ, 2012 г. №2. С.131-135.
- 4. Акимов, С.В. Компьютерные модели для автоматизированного структурно-параметрического синтеза / С.В. Акимов // Компьютерное моделирование 2004: Труды 5-й международной конференции. Часть 1 СПб.: Нестор, 2004, С. 191-197.
- Максимова, О.В. Математическое обеспечение САПР тонкопленочных электролюминесцентных индикаторов при решении задач синтеза конструкций / О.В. Максимова, М.К. Самохвалов // Вестник Московского государственного областного университета, серия «Физика и математика», М.: МГОУ, 2012 г. №1. С.77-85.
- 6. Evsevichev, D. The CAD System of the Thin Film Electroluminescent Display: collection of scientific papers / D. Evsevichev, O. Maksimova, M. Samokhvalov // The 11th International Meeting on Information Display (IMID 2011). KINTEX, Seoul, Korea, 2011. P. 768-769.
- 7. Максимова, О.В. Задачи автоматизации моделирования яркости и светоотдачи тонкопленочных электролюминесцентных конденсато-

- ров / М.К. Самохвалов, С.М. Максимов // Автоматизация процессов управления. Ульяновск.: НПО "Марс". 2(36). 2014. С. 98-105.
- 8. Максимова, О.В. Разработка средств автоматизации конструирования тонкопленочных электролюминесцентных индикаторов / О.В. Максимова, Д.А. Евсевичев, М.К. Самохвалов, С.М. Максимов // Актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП-2014: Материалы 11 международной научно-технической конференции, г. Саратов, 25-26 сентября, 2014 г. Саратов: ООО «Буква», С. 66-71.

УДК 533.9 (075.8)

### Б.М. Маркеев

Московский государственный областной университет

# КВАЗИЛИНЕЙНАЯ ТЕОРИЯ СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ В СЛАБОМ СВЧ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Аннотация. В работе, используя усреднение по хаотическим фазам, обосновано квазилинейное кинетическое уравнение для неустойчивой, слабоионизованной, неизотермической плазмы, помещенной в СВЧ электрическое поле. Столкновения учитываются посредством интеграла столкновений Больцмана.

*Ключевые слова*: квазилинейное кинетическое уравнение, интеграл столкновений Больцмана, СВЧ электрическое поле.

### B. Markeev

Moscow State Regional University

## QUASILINEAR THEORY OF COLLISIONAL PLASMA IN A WEAK MICROWAVE ELECTRIC FIELD

Abstract. In this paper, using the average over the random phases justified quasi-linear kinetic equation for unstable and weakly ionized, non-isothermal plasma placed in a microwave electric field. Collisions accounted for by the Boltzmann collision integral.

*Keywords*: quasi-linear kinetic equation of the Boltzmann collision integral, microwave electric field.

Рассмотрим пространственно изотропную плазму, помещенную в однородное электрическое поле  $\overrightarrow{E}(t)$ = $E_0 \sin \omega_0 t$ . Поле считается слабым, так скорость осцилляции электронов мала по сравнению с их тепловой

скоростью, частота  $\omega_0$  близка к электронной ленгмюровской частоте  $\omega_{Le}$  и значительно превосходит частоты столкновений заряженных частиц. Пусть в начальный момент плазма была слабоионизованной, неизотермической, а величина внешнего электрического поля превосходила пороговое значение [1]. Ограничиваясь рамками квазилинейного приближения [2], рассмотрим динамику развития столкновительной ионнозвуковой диссипативной неустойчивости и ее влияния на состояние плазмы.

Состояние слаботурбулентной плазмы можно рассматривать на основе кинетического уравнения Больцмана, в котором члены порядка малости по амплитуде возмущения.

$$\{\hat{L}_{e}f_{e} + \frac{e_{e}}{m_{e}}\delta\vec{E}\frac{\partial\delta f_{e}}{\partial\vec{v}} - \hat{S}_{en}f_{e}\} + \{\hat{L}_{e}\delta f_{e} + \frac{e_{e}}{m_{e}}\delta\vec{E}\frac{\partial f_{e}}{\partial\vec{v}} - \hat{S}_{en}\delta f_{e}\} = 0. \quad (1)$$

Здесь  $\hat{S}_{en}$  — оператор столкновений электронов с нейтралами, который можно представить в виде:

$$\hat{S}_{en}f_e = -\int d\vec{v}_n d\Omega w \sigma(w, v) \{f_e f_n - f'_e f'_n \},$$

где  $w = |v_e - v_n|$  - относительная скорость,  $\sigma(w, \upsilon)$  – дифференциальное сечение рассеяния,  $\upsilon$  – угол рассеяния,  $\upsilon$ , наконец,

$$\hat{L}_e = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} + \frac{e_e}{m_e} \vec{E}_0 \sin \omega_0 t \frac{\partial}{\partial \vec{v}}$$

- полная производная вдоль траектории частиц. Остальные обозначения общепринятые.

Решая (1) в линейном приближении и используя уравнение Пуассона, получаем дисперсионное соотношение низкочастотных колебаний плазмы во внешнем СВЧ поле,

$$\sum_{s} \Phi_{k}^{(s)} I_{s-n} + \frac{\delta \varepsilon_{i}^{(0)}}{1 + \delta \varepsilon_{e}^{(n)}} \Phi_{k}^{(0)} I_{-n} = 0$$
 (2)

с помощью которого получим возмущение функции распределения электронов

$$\begin{split} \delta f_e &= \sum_{\vec{k},n} \frac{e_e}{m_e} \Phi_k^{(0)} I_{-n} \frac{\delta \epsilon_i^{(0)} \exp\left\{i \vec{k} \vec{z}_0 - i(n\omega_0 + \omega_k)t\right\}}{\left(1 + \delta \epsilon_e^{(n)}(k)\right) \left(n\omega_0 + \omega_k - \vec{k} \vec{v}_0\right)} * \\ &\quad * \left\{1 + i Re \hat{S} \frac{1}{n\omega_0 + \omega - \vec{k} \vec{v}_0}\right\} \vec{k} \frac{\partial f_e}{\partial \vec{v}_0} \end{split} \tag{3}$$

Здесь  $I_m(a)$  – функция Бесселя от аргумента  $a=\vec{k}\vec{z}_E=\frac{\vec{k}\vec{v}_E}{\omega_0};\;\vec{v}_0=\vec{v}-\vec{v}_E\cos\omega_0t;\;\vec{z}_0=\vec{z}\cdot\vec{z}_E\sin\omega_0t;\;\omega_k=\omega_k'-i\gamma_k,\;\omega_k'$  и  $\gamma_k$  – частота и инкремент неустойчивых колебаний,  $\Phi_k^{(m)}$  - представляет собой член разложения неравновесного потенциала в ряд:

$$\Phi = \sum_{m} \Phi_{k}^{(m)} \exp\{i \left[\vec{k}\vec{z} - (m\omega_{0} + \omega_{k})t\right]\},$$

а  $\delta\epsilon_a^{(n)}(\omega,k) = \delta\epsilon_a^{(n)}(\omega_k + n\omega_a k)$  — парциальная диэлектрическая проницаемость частиц сорта a=e,i.

Представим электронную функцию распределения в виде:

$$f_{e(\nu_0} t) = \sum_n f_e^{(n)}(\nu_{0,} t) \exp\{-in\omega_0 t\},$$
 (4)

где характерное время изменения функции  $f_e^{(n)}(\nu_0,t)$  значительно больше обратного инкремента нарастания неустойчивости. Ввиду того, что в начальный момент в разложении (4) отсутствовали ненулевые гармоники, их можно считать малыми в течение достаточно длительного промежутка времени. Учитывая это обстоятельство, после подстановки (3) в (1) и усреднения кинетического уравнения, получим квазилинейное уравнение для n-ой гармоники (по частоте внешнего поля) электронной функции распределения

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t}f_{e}^{(n)}\big(\nu_{0,t}\big)e^{-in\omega_{0}t} &= -i(\frac{e_{e}}{m_{e}})^{2}\frac{\partial}{\partial\nu_{0i}}\sum_{s}\int\ d\vec{k}\ *\\ & *\frac{|\delta\epsilon_{i}^{(0)}|^{2}k_{i}k_{j}\exp\{-in\omega_{0}t\}|\Phi_{k}^{(0)}(t)|^{2}I_{n-s}(a)I_{s}(a)}{\left(1+\delta\epsilon_{e}^{(n-s)}(\omega_{-k,}-k)\right)\!\left(1+\delta\epsilon_{e}^{(s)}(\omega_{k,}k)\right)}\ *\\ & *\left\{1+iRe\ \hat{S}\frac{1}{S\omega_{0}+\omega_{k}-k\nu_{0}}\right\}\frac{\partial}{\partial\nu_{0j}}f_{e}^{(0)}+\hat{S}_{en}f_{e}^{(n)}\exp\{-in\omega_{0}t\} \end{split} \label{eq:energy_energy_energy} \tag{5}$$

Уравнение (5) учитывает обратное воздействие неустойчивых низкочастотных колебаний на электронную функцию распределения. При его выводе существенно использовалось соотношение (2). Квазилинейное уравнение (5) обобщает соответствующее уравнение работы для плазмы, помещенной в сильное СВЧ поле, на случай слабых полей и учитывает столкновения частиц в слабоионизованной плазме.

Заметим, что квазилинейное уравнение для функции распределения ионов совпадает с соответствующим уравнением для плазмы в отсутствие СВЧ поля, т.к. взаимодействием последнего с ионной компонентной пренебрегается. Более того, для исследования квазилинейного процесса развития неустойчивых ионно-звуковых колебаний в использовании уравнения для ионов нет необходимости.

В квазилинейном приближении (5) дополняется уравнением теории для неравновесного потенциала

$$\frac{\partial}{\partial t} \left| \Phi_k^{(0)} \right|^2 = -2\gamma_k \left| \Phi_k^{(0)} \right|^2. \tag{6}$$

Уравнения (5), (6) образуют полную систему, решение которой представляет значительные трудности.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Маркеев Б.М. Спектры колебаний слабоионизованной столкновительной плазмы. Вестник МГОУ. Сер. «Физика-Математика», 2013.№3, с. 78-81
- 2. Франк-Каменецкий Д.А. Лекции по физике плазмы.- Издательский Дом «Интеллект», 2008.- 280 с.

УДК 669.0176: 621.74

Ю.А. Балакин<sup>1</sup>, С.Л. Захаров<sup>2</sup>, Х.Б. Юнусов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ, Московский государственный университет технологий и управления (МГУТУ) им. К.Г. Разумовского <sup>2</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева.

<sup>3</sup>Московский государственный областной университет.

# РАЗРАБОТКА НОВОЙ ТЕОРИИ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ПРОЦЕССЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Аннотация: Рассмотрено краткое описание основных положений новой теории внешних воздействий на процессы в конденсированных средах. Основное внимание уделено процессам на границе раздела фаз и сопровождающихся фазовыми переходами в металлах и сплавах. Разработаны новые методы, учитывающие внешние воздействия на эти процессы в жидких и затвердевающих средах. Методом неравновесной термодинамики исследованы малоизученные процессы релаксации и диссипации внешней энергии в расплавах. Впервые выявлена взаимосвязь количества внешней энергии, необходимого для устойчивой кристаллизации единицы объема расплава и структурой металла в твердом состоянии. Ключевые слова: теория, метод, внешнее воздействие, процесс, термодинамика, кристаллизация, металл.

# Yu. Balakin<sup>1</sup>, S. Zaharov<sup>2</sup>, Kh. Yunusov<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Moscow State University of Technologies and Management named after K.G. Razumovskiy. <sup>2</sup>D.Mendeleev University of Chemical Technology of Russia <sup>3</sup>Moscow State Regional University

# THE DEVELOPMENT OF A NEW THEORY OF EXTERNAL INFLUENCES ON THE PROCESSES IN CONDENSED MATTER

Abstract: Brief description of the main provisions of the new theory of external influences on the processes in condensed matter. The main attention is paid to the processes at the phase boundary and associated phase transitions in metals and alloys. Developed new methods that take into account external influences on these processes in liquid and solidified environments. Method of non-equilibrium thermodynamics is investigated insufficiently known processes of relaxation and dissipation of energy in the melt. For the first time revealed the relationship of the amount of external energy required for continuous crystallization of a unit volume of the melt and the metal structure in the solid state. Keywords: theory, method, external impact, process, thermodynamics, crystallization, metal.

Развитие прогрессивных технологий в металлургии и литейном производстве все более опирается на достижения фундаментальных и прикладных наук, а также применение в производстве методов внешних воздействий (ВнВ) на жидкие и затвердевающие металлы.

Накопленные по этой проблеме массивы теоретических и опытных знаний требуют анализа и синтеза на новом качественном уровне общей концепции ВнВ на различные процессы передела шихты в отливку. Создание наукоемких и энергосберегающих технологий на основе новой теории ВнВ на литейные процессы позволит получить качественную металлопродукцию и успешно конкурировать на рынках сбыта [1].

Целью данной работы является краткое изложение новой теории ВнВ на процессы кристаллизации, диспергирования, рафинирования и высокотемпературной обработки расплавов, а также отражение принципа структурной наследственности в рассматриваемой теоретической концепции.

Авторами творчески развита методическая база описания ВнВ на процессы подготовки расплава и формирования кристаллической структуры литых заготовок. Предложена гамма новых методов на основе синтеза понятий и закономерностей различных фундаментальных наук: термодинамики, статистической физики, механики сплошных сред, физики металлов, металловедения и др. [1, 2, 3].

Разработаны фундаментальные и прикладные представления о влиянии внешней энергии (ВЭ) различных физических полей: акустического,

электрического, магнитного и т.п. на все стадии процесса кристаллизации металлов. Выражаясь языком Л.Д.Ландау, классическая теория кристаллизации металлов «передумана» и модернизирована с учетом ВнВ на процессы в жидких и затвердевающих средах [13].

Таким образом, были получены ответы на основные вопросы теории кристаллизации: как зарождаются и растут кристаллы, каков объем твердой фазы выделяется из расплава и с какой скоростью это происходит при введении в расплав дополнительной ВЭ.

Впервые выявлена взаимосвязь количества ВЭ, необходимого для устойчивой кристаллизации единицы объема расплава и структурой металла в твердом состоянии. В этой закономерности находит отражение явление структурной наследственности в системе «твердое-жидкое-твердое», если рассматривать наследственность в неорганической природе как высший комплекс свойств материи, приобретенный за счет воздействия на нее внешних факторов [6].

На основе синтеза методов квазиравновесной термодинамики и кинетостатики Даламбера авторами впервые получена обобщенная формулировка второго закона Лапласа, учитывающая влияние угла наклона вектора силы ВнВ на поверхностные процессы при гомогенной и гетерогенной кристаллизации металлов [4].

Разработаны оригинальные математические модели (ММ) процесса диспергирования металлов и сплавов под влиянием ВнВ. Расчеты по моделям, на примере вибрационной обработки расплавов показали, что упругие колебания существенно влияют на явление смачивания включений в расплаве, значительно улучшая его, активируя частицы неизоморфные расплаву, интенсифицируя процесс затвердевания и приводя к получению мелко- и супермелкозернистой структуры литых металлов и сплавов [11].

Таким образом, в рамках новой теории нашли подтверждение фундаментальный принцип структурного соответствия Данкова-Конобеевского, известные экспериментальные результаты Добаткина В.Н. и Эскина Г.И., свидетельствуя о достоверности рассматриваемой концепции ВВ [10].

Методом неравновесной термодинамики исследованы малоизученные процессы релаксации и диссипации ВЭ в расплавах. Получены оригинальные фундаментальные соотношения Онсагера и диссипативной функции, характеризующие взаимосвязь релаксации и диссипации ВЭ от единого комплекса физико-химических процессов на границе расплавзародыш твердой фазы. Это – адсобция, температура и концентрация жидкого металла на межфазной границе и по мере удаления от нее в расплав [7].

Теоретические разработки позволили объяснить экспериментально обнаруженное авторами явление влияния вектора вибровозмущающей силы на структуру разных по свойствам металлов и рассчитать парамет-

ры устройства для виброобработки расплавов, защищенное патентом  $P\Phi$  [4, 14].

На основе метода кинетостатики Даламбера разработана оригинальная ММ виброрафинирования расплавов. ММ позволяет оценить влияние поверхностных сил на границе раздела газ-расплав-включение, высоты литейной формы и направления в пространстве вектора силы вибрации на процесс всплывания пузырьков газа, флотирующих твердые включения в расплаве. Предложены технологические рекомендации, повышающие технико-экономические показатели вибрационного рафинирования расплавов [1].

Феноменологический метод термодинамики необратимых процессов модернизирован для моделирования параметров высокотемпературной обработки (ВТО) расплавов: температуры перегрева и времени выдержки расплава в перегретом состоянии до его гомогенизации [8, 9].

Проведены расчеты данных параметров для металлов с плотноупакованными структурами кристаллических решеток типа ОЦК, ГЦК и ГПУ в твердом состоянии. Они незначительно отличаются друг от друга, что указывает на вероятно одинаковый механизм данного процесса. Определены технологические рекомендации по ВТО расплавов распространенных в производстве металлов [8].

Выявлена практически полная аналогия выражения критического размера зародыша твердой фазы при кристаллизации расплава и величины твердой частицы при ВТО жидкого металла. Это свидетельствует об отражении известного принципа структурной наследственности в формализме новой теории ВнВ при описании фазовых переходов в металлах и сплавах и, следовательно, о достоверности разработанной теоретической концепции ВнВ на литейные и металлургические процессы [9].

Разработанная теория ВнВ на процессы в конденсированных средах успешно применена для описания процесса модифицирования жаропрочных сплавов на основе никеля, в частности, такими прогрессивными модификаторами как ультрадисперсные порошки карбидов (УДПК), а также комбинированной обработки расплавов сталей вибрацией и модифицированием. Эти факты являются прямым подтверждением истинности положений разработанной теории, т.к. на основе формализма теории и из него непосредственно вытекают практические положения технологии модифицирования и комбинированной обработки расплавов [5].

Основы теории доложены на пятом съезде РАЛ РФ и ряде международных и российских конференций, а также опубликованы в монографии, сборнике статей и в рецензируемых журналах [1, 5].

Таким образом, разработанные теоретические основы ВнВ на процессы в конденсированных средах можно рассматривать как вклад в развитие физической теории конденсированного состояния, в частности жидкости, а также как новое направление в области прикладных наук: теории внепечной обработки металлов и теории литейных процессов.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Балакин Ю.А. Теоретические основы внешних воздействий на процесс кристаллизации металлов. М.: Изд-во «Буки Веди», 2014, 148 С
- 2. Балакин Ю.А., Гладков М.И., Савченко Е.Г. Теоретические основы внешних воздействий на жидкие и затвердевающие металлы //Труды пятого съезда литейщиков России. М.: Радуница, 2001, С. 9-12.
- 3. Балакин Ю.А., Гладков М.И., Чалый Р.М. Кинетика зародышеобразования при внешнем воздействии на кристаллизующийся металл//Труды пятого съезда литейщиков России. М.: Радуница, 2001, С. 12-14.
- 4. Балакин Ю.А., Гладков М.И. Влияние направления вибрации на межфазные процессы при кристаллизации металлов// Электрометаллургия стали, №11, 2004, С.17-23.
- 5. Балакин Ю.А., Гладков М.И. Выбор модификаторов при внешнем воздействии на затвердевающий металл: Сборник статей. Изд-во: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014, 58 с.
- 6. Балакин Ю.А., Гладков М.И. О взаимосвязи расхода энергии внешнего воздействия и структуры затвердевающего металла//Металлы РАН, 2001, №3.С.20-25.
- 7. Балакин Ю.А., Гладков М.И. Термодинамический анализ процессов релаксации и диссипации энергии внешнего воздействия в кристаллизующемся металле //Электрометаллургия, 2012,№1, С. 18-23.
- 8. Балакин Ю.А., Гладков М.И. Термодинамический анализ высокотемпературной обработки расплавов металлов (часть 1)// Электрометаллургия, №12, 2007.С.27-31.
- 9. Балакин Ю.А., Гладков М.И. Термодинамический анализ высокотемпературной обработки расплавов металлов (часть 2)// Электрометаллургия, №3,2008, С.28-32.
- 10. Воздействие мощного ультразвука на межфазную поверхность металлов / О.В. Абрамов, В.Ф. Казанцев, Г.И. Эскин и др.; под ред. В.И. Добаткина. М.: Наука, 1986. 280 С.
- 11. Гладков М.И., Балакин Ю.А., Никифоровский В.А. Математическое моделирование процесса диспергирования структуры кристаллизующихся металлов // Литейное производство. 1990. № 10. С. 9.
- 12. Ландау Л.Ф., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Механика, М.: Наука, 1965, т.1, с.35.
- 13. Патент № 2087251 РФ. Способ вибрационной обработки кристаллизующегося металла и устройство для его осуществления / М.И. Гладков, Л.И. Гофеншефер, Ю.А. Балакин и др. Опубл. в В И № 23. 20.08.97.

УДК 534.286

### Д.Л. Богданов, Э.В. Геворкян, М.В. Шевчук Московский государственный областной университет

# ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ, ТЕМПЕРАТУРЫ И ЧАСТОТЫ НА АКУСТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ РАСТВОРА НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ ЖК-1282

Аннотация. Исследованы зависимости коэффициента поглощения и скорости ультразвука в нематическом жидком кристалле (НЖК) ЖК-1282 при изменяющихся термодинамических параметрах состояния (Р, Т) на различных частотах ультразвука.

*Ключевые слова:* жидкий кристалл, раствор, ультразвук, давление, акустические параметры, температурно-частотная зависимость.

# D. Bogdanov, E. Gevorkyan, M. Shevchuk Moscow State Regional University

# THE EFFECTS OF PRESSURE, TEMPERATURE AND FREQUENCY ON THE ACOUSTIC PARAMETERS OF NEMATIC LIQUID CRYSTAL SOLUTION LC-1282

*Abstract*. The dependencies of the coefficient of absorption and the velocity of ultrasound in the nematic liquid crystal LC-1282 on pressure, temperature and frequency are investigated.

*Key words:* liquid crystal, solution, ultrasound, pressure, acoustic parameters, temperature - frequency dependence.

Постоянно растущий интерес к экспериментальным и теоретическим исследованиям свойств жидких кристаллов (ЖК) обусловлен их необычными свойствами и широким применением в приборостроении в качестве рабочих тел в устройствах отображения информации, оптических модуляторах, системах хранения информации и различного рода датчиках [1]. Изучение диссипативных свойств ЖК необходимо для их промышленного применения, а также является эффективным средством исследования их внутренней структуры. В этой связи акустический метод, позволяющий исследовать упругие и диссипативные свойства НЖК, не искаженные граничными эффектами, является наиболее эффективным способом получения информации о свойствах НЖК в зависимости от P, T - термодинамических параметров состояния на различных частотах ультразвука.

Исследованный в данной работе раствор, ЖК-1282, отличается очень широким температурным интервалом (253,1 - 335,1 K) существования нематической мезофазы, который дает возможность изучать ее диссипативные свойства и в регулярной области (вдали от фазовых переходов).

Для проведения эксперимента была сконструирована установка, позволяющая проводить измерения зависимости коэффициента поглощения и скорости ультразвука в НЖК от температуры и давления.

В экспериментальной установке можно выделить три основных узла: приемно-передающий электронный тракт, блок регистрации и первичной обработки исследуемых электрических сигналов, акустическая камера с системой термостатирования и гидравлическим прессом.

Приемно-передающий электронный тракт состоит из устройства передающего формирования радиоимпульсов, приемного пьезопреобразователей и приемно-преобразующего устройства. Блок первичной обработки исследуемых электрических сигналов состоит из персонального компьютера и адаптеров, позволяющих осуществлять связь между внешними цифровыми приборами и персональным компьютером. Для визуального контроля и наблюдения электрических сигналов используется осциллограф. Режим связи компьютера с внешними цифровыми приборами устанавливается программным образом в зависимости от характера проводимого эксперимента. Вывод информации из персонального компьютера производится на принтер в виде осцилограмм или таблиц. Результаты первичной обработки эксперимента используются для дальнейших расчетов и анализа с применением более мощных персональных компьютеров.

Акустическая камера с нематическим жидким кристаллом находится в термостате. Температура поддерживается на заданном уровне электронным устройством - терморегулятором. В качестве термочувствительного элемента использован алмазный терморезистор высокой точности, который расположен вблизи нагревателя. Информация с датчика давления также поступает для обработки в персональный компьютер.

Измерения проводились на частотах 1,23; 5,9; 45 МГц акустическим методом, который дает возможность изучить влияние частоты ультразвука f и термодинамических параметров состояния (давления P, температуры T) на упругие и диссипативные свойства НЖК.

Исследование температурной зависимости коэффициента поглощения ультразвука на квадрат частоты  $\alpha/f^2$  в нематической фазе в неориентированном образце ЖК-1282 при различных давлениях показало наличие минимума при температуре  $T_{min}$ = 313 К при атмосферном давлении (рис. 1). Из-за трудностей измерения поглощения вблизи  $T_{\rm c}$ , значения  $\alpha/f^2$  при T= $T_{\rm c}$  получены экстраполяцией со стороны обеих фаз. В изотропной фазе (ИЖ) вдали от точки просветления поглощение слабо зависит от температуры, но при приближении к области перехода НЖК-ИЖ оно

резко возрастает, проходя через максимум вблизи температуры просветления  $T_{\rm c}$ .

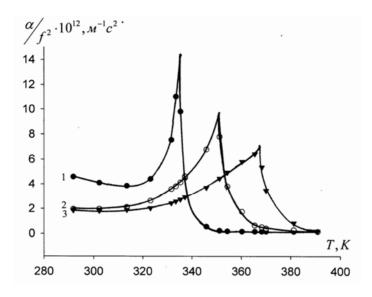


Рис. 1. Температурная зависимость  $\alpha/f^2$  в неориентированном образце ЖК-1282 на частоте ультразвука f=5,9 М $\Gamma$ ц при значениях давления P (М $\Pi$ а): 1-0,1; 2-50; 3-100.

Максимумы на кривых зависимостей  $\alpha(T)/f^2$  с ростом давления плавно уменьшаются, смещаясь в сторону более высоких температур (рис. 1).

Выполненные исследования температурной зависимости коэффициента поглощения ультразвука  $\alpha/f^2$  в нематической фазе при атмосферном давлении (рис. 2) на различных частотах ультразвука показывают, что с уменьшением частоты ультразвука наблюдается резкое увеличение максимумов зависимости  $\alpha(T)/f^2$  в окрестности температуры просветления.

Установлено, что в области НЖК-ИЖ перехода для исследованного НЖК наблюдается значительное отклонение от классического закона поглошения.

Ввиду малости величины анизотропии скорости ультразвука (около 1,5 м/с) важными представляются исследования в неориентированном образце ЖК-1282. Повышение давления сопровождается увеличением скорости ультразвука в неориентированном образце в нематической фазе (рис. 3). С ростом температуры кривая зависимости скорости ультразвука от давления смещается в область более высоких давлений.

В исследованном диапазоне частот скорость ультразвука монотонно уменьшается при повышении температуры в нематической фазе (рис. 3),

и в области фазового перехода наблюдается минимум скорости, глубина которого быстро уменьшается с ростом частоты.

Отмеченные выше особенности поведения акустических параметров вблизи температуры просветления связаны с изменением в этой области релаксационного спектра и резким «замедлением» процессов релаксации параметра ориентационного порядка и его флуктуаций [4, 5].

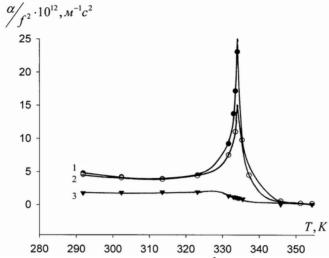


Рис. 2. Температурная зависимость  $\alpha/f^2$  в неориентированном образце ЖК-1282 при атмосферном давлении на частотах ультразвука (МГц): 1 - 1,23; 2 - 5,9; 3 - 45

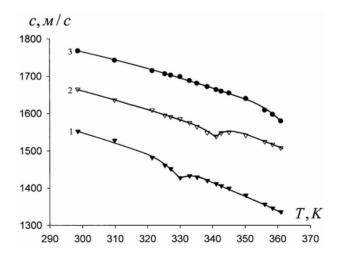


Рис. 3. Зависимость скорости ультразвука c от температуры Т при значениях давления P (МПа): 1-10, 2-40, 3-80

Очевидная асимметрия максимумов коэффициента поглощения ультразвука обусловлена вкладом процесса релаксации параметра ориентационного порядка, существующим, в отличие от флуктуационного, только со стороны нематической фазы.

Следует отметить, что ультразвуковые методы регистрации оказываются удобным средством для исследования жидкокристаллических соединений при высоких давлениях. Они выгодно отличаются от других методов тем, что позволяет исключить влияние граничных эффектов, так как измерения проводятся в достаточно больших объемах образцов ЖК. Эти методы не только весьма удобены при проведении эксперимента в автоклавных условиях, но и довольно точны. (Относительная погрешность измерения скорости распространения ультразвука составляет 0,10 % - 0,14 %, а относительная погрешность определения величины  $\alpha/f^2$  составляет 1,15 %.) Вместе с ультразвуковыми и диэлектрическими измерениями во внешних изменяющихся магнитных и электрических полях [2 - 5] они составляют основу комплексного экспериментального изучения динамики жидких кристаллов.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Де Жен П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
- 2. Богданов Д.Л., Геворкян Э.В., Лагунов А.С. Акустические свойства жидких кристаллов во вращающемся магнитном поле. //Акустический журнал. -1980. т. 26, № 1. -С. 28-34.
- 3. Геворкян Э.В., Богданов Д.Л., Кузнецов В.С. Акустические свойства жидких кристаллов в изменяющихся магнитных и электрических полях и вращательная вязкость. //Вестник Московского государственного областного университета. –Серия «Физика Математика».-2007.-№2.-С.54-58.
- 4. Геворкян Э.В. Акустические свойства смектических жидких кристаллов. //Применение ультраакустики к исследованию вещества, Москва. ВЗМИ. Вып. 30. 1980. С. 89-99.
- 5. Хабибуллаев П.К., Геворкян Э.В., Лагунов А.С. Реология жидких кристаллов. Ташкент: Фан. 1992. 300 с.

# РАЗДЕЛ III. ТЕХНОЛОГИИ И МЕТОДИКИ ОБУЧЕНИЯ

УДК 519.16

### Л.И. Фёдоров

Государственный университет управления

# ГЕНЕРАТОР ПЕРЕСТАНОВОК ТРАНСПОЗИЦИЕЙ СОСЕДНИХ ЭЛЕМЕНТОВ В МАТНСАD

Аннотация. В статье рассматривается алгоритм генерации перестановок и приводится текст программы, работающей в среде МАТНСАD, приводятся примеры использования данного алгоритма в некоторых учебных задачах.

*Ключевые слова*: перестановка, мобильность перестановки, направление перестановки, транспозиция, алгоритм, программа.

### L. Fedorov

State University of Management

# GENERATOR OF PERMUTATIONS BY TRANSPOSITION OF NEIGHBORING ELEMENTS IN MATHCAD

*Abstract.* The article explains the algorithm for generating permutations, and the text of the program that is running in an environment MATHCAD, there are examples of the use of this algorithm in some learning tasks.

*Keywords*: Permutation, mobility changes the direction of the permutation, transposition, algorithm, program mobility permutation, the direction of the permutation

Опыт использования MathCad в учебных целях при параллельном изучении разделов курса математики и информатики отражен в литературе [1] и безусловно заслуживает внимания. Цель данной работы дать по возможности доступное для учащихся и преподавателей информатики описание данного алгоритма генерирования перестановок транспозицией только соседних элементов и реализация этого алгоритма в среде MathCad. Это позволит с успехом применять его при изучении разделов дискретной математики и линейной алгебры, где он может быть использован при переборе вариантов. Алгоритм с транспозицией соседних элементов имеет реализации в С, Руthon, Java и др. Хорошее

описание алгоритма и реализация (без представления исходного кода) дается в [2].. Реализация данного алгоритма в среде MathCad является частью указанной цели , так как программный код в этой среде хорошо согласуется с используемым в литературе псевдокодом для описания алгоритмов [3,4].

**Об** алгоритме: Дано целое положительное число  $\Pi$ , этот алгоритм генерирует список перестановок  $\{1, ..., \Pi\}$ , то есть, получив на входе  $\Pi$  = 3, этот алгоритм выдаст:

Permutation (3) = 
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 & 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & 1 & 2 & 3 & 1 \\ 3 & 2 & 2 & 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

Авторы [5] при описании алгоритма использовали термины направление и мобильность чисел в перестановке.

### Направление

Вначале числа располагаются в порядке возрастания, и каждому из элементов изначально не присваивается направлении влево(Left) . Символ <= перед каждым номером ниже указывает на направление, связанное с этим числом

Само число и символ справа или слева от числа будет обозначать, что его направление Right или соответстенно Left В приведенном ниже примере, направление номер 3 является Right.

### Мобильность

Этот алгоритм использует термин мобильность целого числа. Целое число называется мобильным, если к числу на его направлении примыкает число меньшее, чем это число. Если целое находится на правой колонке и имеет направление вправо, то это не мобильное число. Если целое находится на крайней левой колонке, и имеет направление влево, это не мобильное.

### Алгоритм

- I. Разместить цифры из диапазона  $1 \dots N$  в порядке возрастания и присвоить каждому направление влево Left .
- II. Найти наибольшее мобильное целое и поменять его с соседним элементом на его направлении без изменения направления любого из этих двух.
- III. При этом, если наибольшее мобильное целое достигло места, где это число уже не мобильно, то приступить к поиску следующего наибольшего мобильного целого.
- IV. После каждой транспозиции проверить, есть ли число, большее, чем текущее мобильное целое. Если есть одно или несколько тако-

вых, то изменить направление у всех из них. (смотрите пример для n=4, приводимый ниже).

Алгоритм останавливается, когда нет более мобильных целых чисел.

### Алгоритм в действии

Теперь 3 больше не мобильно, так как оно находится в крайней левой колонке и имеет направление влево. Поэтому следует переходить к следующему наибольшему мобильному числу, которым является 2.

Теперь, число [3] изменило свое направление в связи с этапом (IV) алгоритма . Когда <=[2] местами с <=[1], алгоритм проверяет (не только среди мобильных), есть ли номер больше, чем [2] Поэтому <=[3] направление изменилось на [3]= >

Алгоритм с этого момента продолжается с [3]=>, так как оно снова стать наибольшим мобильным целым.

Алгоритм завершен, так как ни одно из чисел больше не мобильно. Причины, почему они не являются мобильными следующие:

<=[2] больше не мобильно, так как оно в самом левом столбце и имеет направление влево.

[1]=> больше не мобильно, так как нет номера на его направлении меньшего, чем оно само.

[3]=> больше не мобильно, так как оно в правой колонке и имеет направление вправо.

Поэтому алгоритм завершает работу, выдав 6 перестановок.

Реализация алгоритма в MathCad приведена ниже.

Этап поиска наибольшего мобильного числа реализован как подпрограмма FindM.

Глобальные константы Left и Right равны соответственно 1 и 0 и введены для большей читаемости программы.

Permutation  $(n) := | for i \in 1... n$ 

```
(V_i \leftarrow i \quad D_i \leftarrow Left)
                                                           m \leftarrow FindM(n, V, D)
                                                           A \leftarrow V
                                                           while m \neq 0
                                                                   if Dm = Left
                                                                     otherwise
                                                                              \left| \begin{array}{cccc} \left( \, \mathtt{r} \leftarrow \mathtt{v}_{\mathtt{m}} & \mathtt{v}_{\mathtt{m}} \leftarrow \mathtt{v}_{\mathtt{m}+1} & \mathtt{v}_{\mathtt{m}+1} \leftarrow \mathtt{r} \, \, \right) \right.
                                                                               \left(\,\mathtt{r} \leftarrow \mathtt{D}_{m} \quad \mathtt{D}_{m} \leftarrow \mathtt{D}_{m+1} \quad \mathtt{D}_{m+1} \leftarrow \mathtt{r}\,\right)
                                                                              m \leftarrow m + 1
                                                                      for i \in 1... n
                                                                          \mathtt{if}\ v_{\mathtt{i}} > v_{\mathtt{m}}
                                                                                   D_i \leftarrow Right if D_i = Left
                                                                                   D_i \leftarrow Left otherwise
                                                                     A \leftarrow augment(A, V)
                                                                     m \leftarrow FindM(n, V, D)
                                                          return A
FindM(n,V,D) := | MaxIndex \leftarrow 0
                                            \texttt{MaxValue} \leftarrow -1
                                             \quad \text{for } i \in 1 \dots \ n
                                                     continue if (i = 1 \land D_i = Left) \lor (i = n \land D_i = Right)
                                                                \texttt{if} \ V_{\texttt{i}-\texttt{1}} < v_{\texttt{i}} \land \texttt{MaxValue} \leq v_{\texttt{i}} \quad \texttt{if} \ \texttt{D}_{\texttt{i}} = \texttt{Left}
                                                                         MaxIndex \leftarrow i
                                                                        MaxValue \leftarrow V_i
                                                                \texttt{if} \ V_{\texttt{i}+1} < V_{\texttt{i}} \land \texttt{MaxValue} \leq V_{\texttt{i}} \quad \texttt{if} \ D_{\texttt{i}} = \texttt{Right}
                                                                        MaxIndex \leftarrow i
                                                                        MaxValue \leftarrow V_i
                                            return MaxIndex
```

Проиллюстрируем работу алгоритма с n = 4.

```
    <=[1] <=[2] <=[3] <=[4] <=[4] движется влево</li>
    <=[1] <=[2] <=[4] <=[3]</li>
    <=[1] <=[4] <=[2] <=[3]</li>
    <=[4] больше не мобильно</li>
```

<=[4] больше не мобильно, так как оно в находится самом левом столбце и указывает влево.

Осуществляется транспозиция  $\leq [3]$  с  $\leq [2]$ , а направление [4] меняется и становится снова мобильным.

[4]=> больше не мобильно, так как оно в правой позиции и его направление вправо.

Осуществляется транспозиция  $\leq [3]$  с  $\leq [1]$ , и изменяется направление [4] к  $\leq [-4]$ 

<=[4] больше не мобильно, так как оно располагается на левом конце и его направление влево

<=[3] стал не мобильным, так как нет никаких чисел меньших, чем оно на его направлении.

Осуществляется транспозиция <=[2] с <=[1] и нужно

- (a) изменить направление [4] на [4]=>
- (б) изменить направление [3] на [3]=>

Когда числа поменялись, направление всех чисел, которые больше, чем это число должно быть изменено.

[4] => больше не мобильно, так как оно на правой колонке и указывает вправо.

Осуществляется транспозиция [3]=> c <=[2] , а 4 изменяет направление .

Осуществляется транспозиция [3]=> c <=[1] и изменение <=[4] на [4]=> .

Все числа не мобильны и, следовательно, алгоритм завершается после того как сгенерируется 4! = 24 перестановки.

В [6] для генерации с помощью транспозиции соседних элементов вместо поиска нибольшего мобильного производится вычисление места и направления транспозиции. Приводим этот вариант алгоритма на MathCad'e. Он показывает лучшие характеристики по времени.

```
\begin{array}{lll} \mbox{Perm}\; (n) := & \mbox{for} & i \in 1 \dots n \\ & & \mbox{$\left(P_i \leftarrow i \ C_i \leftarrow 1 \ PR_i \leftarrow true \,\right)$} \\ & \mbox{$C_n \leftarrow 0$} \\ & \mbox{$A \leftarrow P$} \\ & i \leftarrow 1 \\ & \mbox{while} & i < n \\ & & \mbox{$\left(i \leftarrow 1 \ x \leftarrow 0 \,\right)$} \\ & \mbox{while} & \mbox{$C_i = n - i + 1$} \\ & \mbox{$\left(P_i \leftarrow -PR_i \right)$} \\ & \mbox{$C_i \leftarrow 1$} \\ & \mbox{$x \leftarrow x + 1$} & \mbox{if} & \mbox{$PR_i$} \\ & \mbox{$\left(i \leftarrow i + 1\right)$} \\ & \mbox{$i \leftarrow i + 1$} \\ & \mbox{$i \leftarrow i + 1$} \\ & \mbox{$i \leftarrow n - i + 1 - C_i + x$} & \mbox{otherwise} \\ & \mbox{$\left(w \leftarrow P_k \ P_k \leftarrow P_{k+1} \ P_{k+1} \leftarrow w \,\right)$} \\ & \mbox{$C_i \leftarrow C_i + 1$} \\ & \mbox{$A \leftarrow augment}\; (A, P) \\ & \mbox{return} & \mbox{$A$} \end{array}
```

В этом варианте булевская переменная PR для каждого і в диапазоне от 1 до п задает направление. Переменная Сі задает позицию элемента 1 относительно блоков чисел, которых единица разделяет.

Генератор перестановок может быть использован в задачах, в которых нужен перебор вариантов, например в задаче коммивояжера, задаче о назначениях. В учебных целях он может быть использован для вычисления определителя матриц. В MathCad вычисление определителя матрицы может быть записано либо формулой

Determinant (a) := 
$$\sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{n}!} \left[ (-1)^{\mathbf{k}+1} \cdot \prod_{\mathbf{i}=1}^{\mathbf{n}} \mathbf{a}_{\mathbf{i}, \left(\mathbf{p}^{\langle \mathbf{k} \rangle}\right)_{\mathbf{i}}} \right]$$
 либо в виде вычисляемой функции Determinant (a) := 
$$\begin{array}{c|c} \mathbf{n} \leftarrow \mathbf{rows} \ (\mathbf{a}) \\ \mathbf{p} \leftarrow \mathbf{Perm} \ (\mathbf{n}) \\ \boldsymbol{\Sigma} \leftarrow \mathbf{0} \\ \mathbf{for} \quad \mathbf{k} \in \mathbf{1} \dots \quad \mathbf{n}! \\ & \Pi \leftarrow \mathbf{1} \\ \mathbf{for} \quad \mathbf{i} \in \mathbf{1} \dots \quad \mathbf{n} \\ & \Pi \leftarrow \Pi \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \\ & \boldsymbol{\Sigma} \leftarrow \boldsymbol{\Sigma} + (-1)^{\mathbf{k}+1} \cdot \boldsymbol{\Pi} \\ \mathbf{return} \quad \boldsymbol{\Sigma} \end{array}$$

Для вычисления перманента матрицы можно использовать функцию:

Перманент (a) := 
$$\begin{array}{c|c} \mathbf{n} \leftarrow \mathbf{rows} \ (\mathbf{a}) \\ \mathbf{p} \leftarrow \mathbf{Perm} \ (\mathbf{n}) \\ \Sigma \leftarrow \mathbf{0} \\ \mathbf{for} \quad \mathbf{k} \in \mathbf{1} \dots \quad \mathbf{n}! \\ & \Pi \leftarrow \mathbf{1} \\ \mathbf{for} \quad \mathbf{i} \in \mathbf{1} \dots \quad \mathbf{n} \\ & | \mathbf{j} \leftarrow \left( \mathbf{p}^{\left\langle \mathbf{k} \right\rangle} \right)_{\mathbf{i}} \\ & | \mathbf{if} \quad \mathbf{a}_{\mathbf{i}}, \, \mathbf{j} = \mathbf{0} \\ & | \Pi \leftarrow \mathbf{0} \\ & | \mathbf{continue} \\ \Sigma \leftarrow \Sigma + \Pi \\ \mathbf{return} \quad \Sigma \end{array}$$

Примечание:

Строго говоря, реализация генератора перестановок в той форме, которая представлена, нельзя назвать Генератором. По принятой терминологии генератор строится из трех функций — GetFirst, IsLast и Getnext, используемых в конструкции цикла-

Получается, что использование UseP происходит внутри генератора. В нашем случае перестановки создаются сразу в полном объеме, как это реализовано в рассмотренных вариантах и примерах с определителем и перманентом матрицы.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Плис А.И., Сливина Н.А. Mathcad: математический практикум для экономистов и инженеров .: Финансы и статистика, 1999. 656 стр.
- 2. http://tropenhitze.wordpress.com/2010/01/25/steinhaus-johnson-trotter-permutation-algorithm-explained-and-implemented-in-java/ Steinhaus Johnson Trotter permutation algorithm explained and implemented in Java.
- 3. Кормен Т. Лейзерсон Ч. Ривест Р. Штайн К. Алгоритмы. Построение и анализ. Издательство. Вильямс, 2007 год.
- 4. А. Левитин Название: Алгоритмы: введение в разработку и анализ Издательство: Вильямс Год: 2006
- 5. Steinhaus, Hugo (1964), One hundred problems in elementary mathematics, New York: Basic Books, pp. 49–50
- 6. В. Липский Название: Комбинаторика для программистов Издательство: Мир Год: 1988

УДК 37.022

# П.Д. Рабинович

Московский государственный областной университет

СОЗДАНИЕ МОТИВИРУЮЩЕЙ ИНТЕРАКТИВНОЙ СРЕДЫ РАННЕГО ЛИЧНОСТНОГО И ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО САМООПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕТЕЙ И ПОДРОСТКОВ, РАЗВИТИЯ У НИХ МНОЖЕСТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА, ИНТЕРЕСА К ЕСТЕСТВЕННЫМ НАУКАМ И НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОМУ ТВОРЧЕСТВУ

Аннотация. В статье рассматриваются вопросы формирования мотивирующей интерактивной среды раннего личностного и профессионального самоопределения детей и подростков, развития у них множе-

ственного интеллекта, интереса к научно-техническому творчеству и рукомеслу, как компоненты Техносферы образовательной организации. Представляется архитектура мотивирующей интерактивной среды, назначение и примерный состав ее функциональных модулей, подходы к организации образовательного процесса с ее использованием.

Ключевые слова: Техносфера образовательной организации, дополнительное образование, STEM, FabLab, образовательные информационные технологии, цифровые лаборатории, музей науки, цифровое производство, 3D.

### P. Rabinovich

Moscow State Regional University

# CREATING OF MOTIVATION INTERACTIVE ENVIRONMENT FOR EARLY PERSONAL

# AND PROFESSIONAL SELF-DETERMINATION OF KIDS AND TEENAGERS, DEVELOPMENT THEIR MULTI-INTELLECT AND INTEREST IN SCIENCE AND SCIENTIFIC AND TECHNICAL CREATIVITY

Abstract. The article presents the formation of a motivating interactive environment for early personal and professional self-determination of kids and teenagers, development of their multi-intellect, interest in scientific and technical creativity and craft as components of Technosphere of educational organization. It describes the architecture of motivating interactive environment, purpose and approximate composition of its functional modules, approaches to the organization of educational process using this motivating interactive environment.

*Keywords:* Technosphere of educational organization, additional education, STEM, FabLab, educational technology, digital lab, a science museum, digital production, 3D.

Актуальность тематики настоящей статьи обусловлена необходимостью развития в Российской Федерации наукоемких технологий, создания высокотехнологичного производств, восстановления и создания промышленных предприятий, создания центров компетенций и точек технологических прорывов по приоритетным направлениям науки и техники [17]. Ключевыми задачами является формирование современной системы непрерывной подготовки квалифицированных инженерных кадров, осуществление прикладных и фундаментальных исследований в области естественных, физико-математических и технических наук в условиях низкой мотивации детей и подростков к исследовательской и научнотехнической деятельности, а также невысокой популярности инженерных и специальностей [10, 11].

Эффективным инструментом решения вышеуказанной задачи представляется создание в общеобразовательных организациях интегрированной мотивирующей среды интеллектуального развития, формирования инженерного мышления, научно-технического творчества, рукомесла и эффективного личностного и профессионального самоопределения обучающихся (далее - «Среда»).

Среда является развитием авторской концепции «Техносфера образовательной организации» [12, 13, 14].

Методическую основу представляемого подхода составляют:

- системно-деятельностный подход, основанный на теоретических положениях концепции Л.С. Выготского, А.Н. Леонтьева, Д.Б. Эльконина, П.Я. Гальперина, заложенный в Федеральные государственные образовательные стандарты нового поколения, и, ориентированный на практическую учебно-познавательную деятельность обучающихся, формирование подрастающего поколения, как основы нового среднего класса, с множественным интеллектом, мотивированного на приобретение и развитие компетентности к изменению компетенций, научно-техническое творчество и рукомесло [4];
- концепция открытого персонального образования, как передового направления дополнительного образования, способствующего пробуждению мотивации к инновационному поведению [6];
- принципы конвергентного естественно-научного и инженерного образования [9].

Прототипами практической реализации Среды являются международные инициативы STEM, FabLab, TechShop, Museum of Science и другие [1, 2, 3, 5].

Создаваемая Среда позволяет проводить комплекс непрерывных образовательных мероприятий (в детском саду, начальной, основной и средней школе), способствующих изучению обучающимися компьютерных и естественных наук, инженерного дела, физики и математики. Уже с дошкольного возраста дети имеют возможность наглядно изучать свойства и явления природы, самостоятельно проводить экспериментальные опыты в игровой форме, развивать умения ставить перед собой цель и достигать ее. Образовательный процесс направлен на помощь в приобретении школьниками навыков 21-го века: командной работы, коммуникации, управления проектами, генерации идей. Обеспечивается развитие интересов и способностей обучающихся, на основе передачи им знаний и опыта познавательной и творческой деятельности, а также понимание ими смысла основных научных понятий и законов, взаимосвязи между ними, формирование представлений о физической картине мира. В частности для выполнения требований нового ФГОС по физике необходимо предоставить возможность ученику самостоятельно исследовать и анализировать разнообразные физические явления и свойства объектов, объяснить принципы работы и характеристики приборов и устройств.

Образовательный процесс строится в соответствии с возрастными особенностями и персональным целеполаганием обучающихся на принципах «обучение через игру» (Edutainment), «обучение как открытие», «обучение как исследование», «вовлечение в процесс познания» и «Lego-конструирование своего будущего». Активно используются сетевые формы образования и реализации распределённых проектов («исследовательский центр», «конструкторское бюро» и др.).

Среда нацелена на формирование важных компетенций обучающихся, таких как:

- понимание концепций, операций и отношений,
- навыки гибкого и аккуратного выполнения операций;
- способность формулировать, представлять и решать проблемы;
- логическое мышление, рефлексия, объяснение и аргументация;
- склонность рассматривать предмет как разумный, полезный и ценный наряду с верой в свою эффективность.

Основными образовательными направлениями являются: занимательное / углубленное изучение физики, математики и других дисциплин естественно-научного цикла, инженерная графика, информационные технологии, цифровое проектирование и конструирование, робототехника, 3D-визуализация и предметное погружение, прототипирование, нанотехнологии, основы электротехники и мехатроники и др.

Формирование Среды осуществляется по функционально-модульному принципе, обеспечивая возможность группам обучающихся во время одного занятия заниматься различными проектами и выполнять индивидуальные задания (в соответствии с индивидуальной образовательной траекторией). Функциональный модуль — это совокупность оборудования, программного обеспечения, образовательного контента, предназначенных для выполнения конкретных функциональных задач по направлениям деятельности Среды. Функциональный модуль может размещаться в отдельном помещении, а также совместно с другими функциональными модулями.

Функциональные модули ориентированы на индивидуальную работу обучающихся или работу в малых группах (до 5-6 обучающихся), однако предусмотрена возможность и для фронтального представления информации, проведения демонстрационных экспериментов и контроля знаний.

Среда формируется следующими основными функциональными модулями:

- развивающие модули (лаборатории) дошкольного образования,
- интерактивный «музей науки» интерактивные экспонаты, занимательные эксперименты,
- профильные лаборатории по физике, химии, биологии, экологии, физиологии и др.,
  - лаборатория образовательной робототехники,
  - лаборатория основ мехатроники автоматизации производствен-

ных процессов и производств,

- лаборатория основ электротехники и электроники,
- лаборатория инженерной графики,
- лаборатория 3D-визуализации и предметного погружения (3D кинотеатр, виртуальная видеостудия и пр.),
- цифровое производство (3D моделирование, прототипирование, опытное и мелкосерийное производство),
- рукомесло (столярные, слесарные, швейные и пр. мастерские для ручного труда).

Наличие в составе Среды производственных функциональных модулей позволяет обучающимся заниматься промышленным дизайном, программированием, конструированием и прототипированием, организовать собственное мелкосерийное производство и реализовать технологические проекты, сделать «почти все» из «практически ничего». Создаются условия для привлечения в общеобразовательную организацию представителей науки, студенчества, обучающихся других школ для совместного выполнения инновационных проектов, быстрого перехода от идей к их практической реализации, решения технологических и коммерческих задач, привлечения инвестиций и внебюджетных средств.

Одной из ключевых особенностей Среды является ее мультифункциональность и вариативность, что позволяет на практике реализовать непрерывность познавательного и образовательного процессов.

Таблица 1 Непрерывность познавательного и образовательного процессов

Образователь- ное направле- ние	Уровни образования				
	Дошкольное образование	Начальное образова- ние	Общее об- разование	Среднее об- разование	
Инженерная графика	Рисование Мульти- пликция	Рисование Мульти- пликация	Геометрия Черчение	3D проекти- рование	
Образователь- ная робототех- ника	Конструи- рование	Основы програм- мирования	Визуальное програм- мирование, изучение языков програм- мирования	Профес- сиональное програм- мирование	
Занимательная наука	Игровое уча- стие	Игровое участие	Тематиче- ские лекции по разделам, проектная деятель- ность	Тематиче- ские лекции по разделам, проектная деятельность	

Углубленное изучение есте- ственных наук	Игровые занятия по направлени- ям	Кружковые занятия по направлениям	Выполнение мета- предметных проектов	Проектная и иссле- довательская деятельность
Проектно- исследователь- ская работа	Игровые опыты и эксперимен- ты	Простейшие самостоя- тельные мини- проекты	Выполнение мета- предметных проектов	Участие в сетевых ис- следованиях и проектах
Основы электротехники и электроники	Игровое уча- стие	Основы ро- бототех- ники	Основы ро- бото- техники	Выполнение мета- предметных проектов
Цифровое творчество	Мультипли- ка-ция	Мультипли- кация Визуальное програм- мирование	Проектная деятель- ность	Выполнение мета- предметных проектов
Многомерная визуализация, моделирование и прототипирование	Мультипли- кация	Простейшие самостоя- тельные мини- проекты	Проектная деятель- ность, ин- женерия	Проектная деятель- ность, инже- нерия

В качестве примеров, кратко рассмотрим некоторые функциональные модули Среды.

«Интерактивный музей наук». Модуль состоит из интерактивных экспонатов, которые позволяют познакомить детей во внеурочное время с базовыми математическими и физическими законами, необычными оптическими явлениями в необычной и увлекательной форме. Модуль является образцом синтеза методов популяризации науки и современных педагогических технологий. Главная идея интерактивного музея —вовлечение посетителей во взаимодействие с экспонатами [18]. Модуль также может иметь сенсорную зону, предназначенную для отдыха, расслабления и развития, в которой находятся различные приборы, создающие светоцветовые и звуковые эффекты.

«Экспериментальная лаборатория дошкольника». Модуль предназначен для раннего знакомства с основами математики, физики на примере простейших экспериментов с предметами, окружающими детей в обычной жизни, способствует формированию мотивации к обучению, познанию, стимулирует интерес к исследовательской деятельности. Возможность проводить опыты самостоятельно под руководством мультипликационного героя с помощью настоящих датчиков позволит маленькому исследователю познакомиться с различными физическими явлениями в игровой увлекательной форме. Модуль призван научить ребенка проводить измерения и сформировать представление о природе и смысле измеряемой величины.

«Цифровые лаборатории для школьников». Модуль представляет собой профильные лаборатории по физике, химии, математике и другим предметам естественно-научного цикла, оснащенные современным цифровым интерактивным и мультимедийным оборудованием [15]. В состав лабораторий входят тематические комплекты по основным естественно-научным направлениям (энергетика, экология, физиология, электроника), которые служат базой для проведения экспериментальных внеурочных занятий школьников. Модуль предназначен для проведения демонстраций, экспериментов и практикумов по изучению объектов живой и неживой природы, процессов и явлений альтернативных и возобновляемых источников энергии, также развития экологического мышления и экологически безопасной деятельности.

«Цифровое моделирование». Модуль способствует формированию познавательной самостоятельности учащихся профильных классов в обучении математике средствами математического моделирования различных процессов на основе проблемного и наглядно-модельного обучения. Освоение обучающимися системы математических знаний, необходимы для изучения смежных школьных дисциплин и практической деятельности, формирование представлений о математике как форме описания и методе познания действительности, а не только для анализа уже готовых математических моделей (оптимальное планирование, 3D моделирование, объектное моделирование, основы системного анализа и статистики, формализация и моделирование и др.)

«Образовательная робототехника». Модуль предназначен для поэтапного создания роботов из элементов конструктора с возможностью подключения программируемого процессора и сенсорных элементов для построения автоматизированных установок и антропоморфных компонентов на основе открытого электронного стандарта на платформе Arduino [18]. Использование модуля положительно повлияет на развитие логического и пространственного мышления, развитие которых связано с построением причинно-следственных связей в процессе программирования, обеспечивает междисциплинарные и метапредметные связи.

«Компьютерный дизайн и 3D прототипирование». Модуль предоставляет инструментарий для создания многомерных электронных образовательных ресурсов, веб-дизайна, цифровой живописи и анимации. Обеспечивает возможность создания многомерных опытных образцов разработанных моделей с помощью специализированного программного обеспечения и устройства быстрого воспроизведения прототипов. Позволяет получить на практике базовые навыки и широкое представление о таких современных и востребованных на рынке труда профессиях (3D-дизайнер, визуализатор, проектировщик 3D-моделей), разрабатывать собственные 2D и 3D модели, реализовывать виртуальные модели в виде ре-

альных физических объектов, создавать рабочие прототипы устройств и механизмов на основе разработанных электронных моделей, создавать конструктивные элементы (для авто-, авиа- и судо- моделирования, элементы для робототехнических комплексов), создавать наглядные пособия (например, модели физических и биологических объектов, примеры атомарных и молекулярных структур и пр.).

«Визуализация процессов и взаимодействия». Позволяет консолидировать и демонстрировать результаты учебной, проектной и исследовательской деятельности с применением интерактивных средств и многомерного представления электронных образовательных ресурсов. Обеспечивает коллективное и дистанционное взаимодействие участников образовательного процесса в реальном времени [16]. Предоставляет возможности хранения и совместного доступа к образовательным ресурсам и результатам учебной, исследовательской и проектной деятельности.

Создание в общеобразовательных организациях интегрированной мотивирующей среды интеллектуального развития, формирования инженерного мышления, научно-технического творчества, рукомесла и эффективного личностного и профессионального самоопределения обучающихся позволяет достичь следующих основных эффектов и результатов для различных целевых аудиторий.

- 1. Для обучающихся и их родителей:
- обеспечение мотивации к изучению предметов естественнонаучного цикла и занятий научно-техническим творчеством,
- получение углубленных знаний по физике, математике и других предметам естественно-научного цикла, по основам инженерной графики и инженерным специальностям,
- формирование практических навыков проектной и исследовательской деятельности, конструирования, программирования, моделирования, прототипирования,
- формирование практических навыков выдвижения идей и гипотез, публичных выступлений и защиты результатов исследований,
  - формирование активной жизненной позиции,
- возможность раннего личностного и профессионального самоопределения и целенаправленного получения средне-специального и высшего профессионального образования,
- повышение самостоятельности и инициативности обучающихся в получении новых знаний и компетенций,
- минимизация рисков и последствий виртуализации сознания обучающихся за счет привлечения их к развивающей профессиональной деятельности;
  - 2. Для образовательной организации:
- возможность увеличения вариативности образовательных программ (элективные курсы, профильные программы и пр.),
  - возможность привлечения дополнительного контингента,

- возможность привлечения высококвалифицированных специалистов для работы с обучающимися,
- возможность реализации сетевых образовательных программ с организациями общего, среднего и высшего профессионального образования.
- возможность сотрудничества с индустриальными партнерами по выполнению их заказов на исследования и разработки,
- возможность привлечения внебюджетных средств за счет оказания населению платных услуг дополнительного образования, реализации профильных образовательных программ для обучающихся других общеобразовательных организаций, а также распространению передовых образовательных практик и повышению квалификации педагогических работников.
  - 2. Для системы образования в целом:
  - появление точек роста и технологических прорывов,
- накоплении новых образовательных практик и возможность их распространения в другие образовательные организации,
- повышение эффективности бюджетных расходов на оснащение образовательных организаций («деньги в обмен на обязательства»),
  - создание конкурентной образовательной среды,
- заинтересованность высших учебных заведений и промышленных предприятий в сотрудничестве для подготовки высококвалифицированных х кадров на системной целевой основе,
- повышение качества и престижности естественно-научного и инженерного образования.

**Заключение**. Таким образом, Среда позволяет школьникам реализовывать собственные проекты не только в рамках личных увлечений, но и сделать его основой развития собственных профессиональных навыков.

Российские университеты активно привлекают талантливых и деятельных школьников посредством организации и проведения различных конкурсов и олимпиад. Например, уже много лет существует проект «Шаг в будущее» на базе МГТУ им. Н. Э. Баумана, в котором требуется выполнить инженерно-исследовательский проект и принять участие в физической и математической олимпиаде, а также Всероссийский конкурс научных работ школьников проектов «Юниор» на базе НИЯУ МИФИ, интернет-олимпиада по физике («Барсик») физического факультета Санкт-Петербургского университета, в которой проверяют навыки планирования экспериментальной деятельности школьников. Такие конкурсы проходят при поддержке крупных международных корпораций и фондов (Intel, Google, Росатом, Сколково и др.) с целью привлечения обучающихся к науке и инженерной деятельности, тем самым «взращивая» инженеров завтрашнего дня.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1. European Society for Engineering Education. Brussels, 2014. Режим доступа: http://www.sefi.be
- 2. International Federation of Engineering Education Societies (IFEES). Brussels. Режим доступа: http://www.ifees.net
- 3. Jones-Garmil K. The wired museum: Emerging technology and changing paradigms. Washington: American Association of Museums, 1997.
- 4. Асмолов А.Г., Володарская И.А., Салмина Н.Г., Бурменская Г.В., Карабанова О.А. Культурно-историческая системно-деятельностная парадигма проектирования стандартов школьного образования // Вопросы психологии. 2007.- №4.
- 5. Асмолов А.Г. Рабинович П.Д. Пространство развития. Где зарождается интеллектуальное творчество? // «Учительская газета», №17 от 29 апреля 2014
- 6. Асмолов А.Г. Мотивирующий мир: стратегия развития открытого персонального образования как основной тренд общества знаний в сетевом столетии. Тезисы выступления. III международный форум «Евразийский образовательный диалог», г.Ярославль, 2014
- 7. Под ред. А.Г. Асмолова. Мотивация к техническому творчеству детей и подростков. М.: Федеральный институт развития образования, 2011
- 8. Гарднер Г. Структура разума: теория множественного интеллекта. М.: ООО «И.Д. Вильямс», 2007
- 9. Ковальчук М.В. Конвергенция наук и технологий прорыв в будущее // Российские нанотехнологии, том 6, № 1-2 2011
- 10. Ливанов Д.В. Официальное открытие Международного семинара по вопросам инноваций и реформированию инженерного образования // OLD.MISIS.RU. Москва, 2011. Режим доступа: http://old.misis.ru/ru/4556/ctl/Details/mid/9959/ItemID/5980 (дата обращения 18.01.2014)
- 11. Первый Всемирный доклад ЮНЕСКО по инженерным наукам: нехватка инженеров – угроза развитию // UNESCO.ORG. Франция, 2010. Режим доступа: http://unesdoc.unesco.org/images/0018/001897/189753e.pdf (дата обращения 25.01.2014)
- 12. Рабинович П.Д. Как зарождается техносфера // М.: Образовательная политика, №1 (57) 2012
- 13. Рабинович П.Д. Модель информационно-образовательной среды современного образовательного учреждения // М.: Информатика и образование, № 9, 2012
- 14. Рабинович П.Д. Модель Техносферы образовательного учреждения // М.: Информатика и образование, №2, 2013

- 15. Царьков И.С., Чеботарев П.Н. Урок в цифровом кабинете физики в технологии «1 ученик 1 компьютер» // М.: Информатика и образование, №2, 2013
- 16. Царьков И.С., Чеботарев П.Н. Опыт эффективного использования современной икт-инфраструктуры средней школы // М.: Информатика и образование, №2, 2013
- 17. Указ Президента РФ от 07.07.2011 №899 "Об утверждении приоритетных направлений развития науки, технологий и техники в Российской Федерации и перечня критических технологий Российской Федерации".
- Поваляев О.А. «Школьный STEM центр реализация концепции развития инженерного образования» // пленарный доклад на Всероссийская научно-практическая конференция «Пропедевтика формирования инженерной культуры учащихся в условиях модернизации российского образования», 4-5 декабря 2014

# НАШИ АВТОРЫ

Амелюшкин И.А. – аспирант, младший научный сотрудник Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н. Е. Жуковского (г. Жуковский Московской области); e-mail: amelyushkin\_ivan@mail.ru

Балакин Юрий Александрович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры стандартизации и инженерно-компьютерной графики Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева (г. Москва); e-mail: Ur.balakin@mail.ru

Бедрикова Екатерина Алексеевна – аспирант кафедры математического анализа и геометрии Московского государственного областного университета; e-mail: bedrikova@mail.ru

Богданов Дмитрий Леонидович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики Московского государственного областного университета; e-mail: <u>kaf-obfiz@mgou.ru</u>

Богомолова Лидия Дмитриевна – научный сотрудник Научноисследовательского института ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова; e-mail: klyde1995@mail.ru

Галиуллин Рафаэль Анварович – ООО «РезонансЪ»; e-mail: rafael.anvarovich@gmail.com

Геворкян Эдвард Вигенович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры общей физики Московского государственного областного университета; e-mail: <u>kaf-obfiz@mgou.ru</u>

Гелиев Александр Валикоевич – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н. Е. Жуковского (г. Жуковский Московской области); е-mail: alexander.geliev@mail.ru

Евсевичев Денис Александрович – кандидат технических наук, младший научный сотрудник кафедры проектирования и технологии электронных

средств Ульяновского государственного технического университета; e-mail: denistk\_87@mail.ru

Ефремов Владимир Петрович – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Объединенного института высоких температур РАН (г. Москва); e-mail: <a href="mailto:dr.efremov@gmail.com">dr.efremov@gmail.com</a>

Жачкин Владимир Арефьевич – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры общей физики Московского государственного областного университета; e-mail: V\_Zhachkin@mail.ru

Захаров Станислав Леонидович – доктор технических наук, доцент, профессор кафедры стандартизации и инженерно-компьютерной графики Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева (г. Москва); e-mail: staszaharov@yandex.ru

Зиборов Вадим Серафимович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Объединенного института высоких температур РАН (г. Москва); e-mail: <u>vziborov@rambler.ru</u>

Калинин М.В. – ассистент Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (г. Москва); e-mail: <a href="mailto:mrzvlks@gmail.com">mrzvlks@gmail.com</a>

Кузнецов Вадим Михайлович – Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева (г. Москва); e-mail: vadim.kuznetsov.37@mail.ru

Кузнецов Михаил Михайлович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета; e-mail: <u>kaf-tfiz@mgou.ru</u>

Латышев Анатолий Васильевич – доктор физико-математических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, заведующий кафедрой математического анализа и геометрии Московского государственного областного университета; e-mail: kaf-matan@mgou.ru

Максимов Сергей Михайлович – аспирант кафедры проектирования и технологии электронных средств Ульяновского государственного технического университета; e-mail: maximovsm@yandex.ru

Максимова Оксана Вадимовна – кандидат технических наук, доцент кафедры проектирования и технологии электронных средств Ульяновского государственного технического университета; e-mail: first32007@yandex.ru

Матвеев С.В. – Московский физико-технический институт (государственный университет); e-mail: <u>kaf-tfiz@mgou.ru</u>

Маркачев Юрий Евгеньевич – ведущий инженер Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н.Е. Жуковского (г. Жуковский Московской области); e-mail: yuri\_markachev@mail.ru

Маркеев Борис Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры вычислительной математики и методики преподавания информатики Московского государственного областного университета; e-mail: <a href="mailto:kaf-vmmpi@mgou.ru">kaf-vmmpi@mgou.ru</a>

Рабинович Павел Давидович – кандидат технических наук, доцент, проректор по развитию Московского государственного областного университета; e-mail: Pavel@rabinovitch.ru

Рябченков В.В. – кандидат физико-математических наук, начальник комплекса Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»; e-mail: <a href="mailto:shkhttrv@gmail.com">shkhttrv@gmail.com</a>;

Стасенко Альберт Леонидович – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н.Е. Жуковского (г. Жуковский Московской области), заместитель заведующего кафедрой общей физики Московского физико-технического института (государственный университет); e-mail: stasenko@serpantin.ru

Смотрова Лилия Владимировна – аспирант кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета; e-mail: <u>kaf-tfiz@mgou.ru</u>

Тарасова Валентина Васильевна – ассистент физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова; e-mail: e-mail: klyde1995@mail.ru

Терешкина К. Б. – Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева (г. Москва), Институт химической физики имени Н.Н. Семёнова РАН (г. Москва); e-mail: ksenia.tereshkina@gmail.com

Фёдоров Леонид Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информационных систем Государственного университета управления (г. Москва); e-mail: fakul-fm@mgou.ru.

Фортов Владимир Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор, академик РАН, директор Объединенного института высоких температур РАН (г. Москва); e-mail: fortov@jiht.ru

Хмелев Андрей Борисович – студент Московского физико-технического института (государственный университет); e-mail: andrejhmelev@gmail.com

Шарафутдинов Ильдар Закирович – аспирант, инженер-исследователь лаборатории газовой динамики Научно-исследовательского института математики и механики Санкт-Петербургского государственного университета; e-mail: shiaz@yandex.ru

Шевчук Михаил Валерьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры вычислительной математики и методики преподавания информатики Московского государственного областного университета; e-mail: shevchukmv@gmail.com

Шувалов П.В. – кандидат физико-математических наук, ассистент Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»; e-mail: <a href="mailto:shuvalov.pavel@gmail.com">shuvalov.pavel@gmail.com</a>

Шумова Валерия Валерьевна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Объединенного института высоких температур РАН (г. Mockba); e-mail: <a href="mailto:shumova@ihed.ras.ru">shumova@ihed.ras.ru</a>

Юнусов Худайназар Бекназарович – доктор технических наук, кандидат химических наук, доцент, профессор кафедры теоретической и прикладной химии Московского государственного областного университета; e-mail: Unn59@mail.ru