

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УДК 51+53  
ББК 22.1+22.3  
Ф94

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА  
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ**

*IX Международная школа-конференция  
для студентов, аспирантов и молодых ученых  
(Уфа, 3 - 7 октября 2016 г.)*

**СБОРНИК ТРУДОВ**

**МАТЕМАТИКА. ФИЗИКА. ХИМИЯ**

**Научные статьи**

УФА  
РИЦ БашГУ  
2016

*Сборник издан при финансовой поддержке РФФИ  
(проект № 16-31-10240\_мол\_г)  
и за счет внебюджетных средств БашГУ*

**Редакционная коллегия:**

д-р физ.-мат. наук, профессор **Б.Н. Хабибуллин** (отв. редактор);  
д-р физ.-мат. наук, профессор **Е.Г. Екомасов**;  
канд. хим. наук, доцент **В.В. Чернова**;  
ст. преп. **Л.А. Габдрахманова**;  
асп. **А.М. Юрьева**

**Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании:** IX Международная школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых (г. Уфа, 3-7 октября 2016 г.): сборник трудов. Математика. Физика. Химия / отв. ред. Б.Н. Хабибуллин. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2016. - 205 с.

ISBN 978-5-7477-4283-3

В сборнике трудов помещены научные статьи участников IX Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании» 2016 г. Научные статьи воспроизводятся с представленных авторами оригиналов.

УДК 51,53  
ББК 22.1+22.3

ISBN 978-5-7477-4283-3

© БашГУ, 2016 г.

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE  
RUSSIAN FEDERATION  
BASHKIR STATE UNIVERSITY

UDC 51+53  
BBK 22.1+22.3  
F94

**FUNDAMENTAL MATHEMATICS  
AND ITS APPLICATIONS IN NATURAL  
SCIENCE**

**The IX International school-conference  
for students, graduate students and young scientists  
(Ufa, 3 – 7 October 2016)**

**MATHEMATICS. PHYSICS. CHEMISTRY**

**Book of Abstracts**

**U F A  
BSU Publishing center  
2016**

The collection was published with the financial support of the Russian  
Foundation for Fundamental Research (RFFR)  
(Grant № 16-31-10240)  
and extrabudgetary funds of the BSU

***Editorial team:***

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor **B.N. Khabibullin**  
(*Executive editor*);

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor **E.G. Ekomasov**;  
Candidate of Chemical Sciences, assistant professor **V.V. Chernova**;  
Senior Lecturer **L.A. Gabdrakhmanova**;  
Post-graduate student **A.M. Yurieva**

Fundamental mathematics and its applications in Natural sciences: IX  
International school-conference for students, post-graduate students, and young  
scientists (Ufa, 3 – 7 October 2016) Book of Abstracts. Mathematics. Physics.  
Chemistry / exec. ed. B.N. Khabibullin. - Ufa: BSU Publishing center, 2016. -  
205 p.

ISBN 978-5-7477-4283-8

The collection contains the articles of participants of the IX International  
school-conference for students, post-graduates, and young scientists  
«Fundamental mathematics and its applications in Natural sciences». Abstracts  
are reproduced from originals provided by the authors.

ISBN 978-5-7477-4283-8

UDC 51+53  
BBK 22.1+22.3

© BSU, 2016

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ  
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНЫХ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ КРАЕВЫХ  
ЗАДАЧ

Арисова О. Г. (Уфа, БашГУ)

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим одномерные эллиптические задачи вида:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}(-k(x)\frac{du}{dx}) &= f(x), \\ 0 \leq x \leq 1, u(0) &= u(1) = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

С условиями сопряжения типа идеального контакта.

$$\begin{aligned} [u] &= u_2 - u_1 = 0, \\ [W \cdot n] &= (W, n)_+ - (W, n)_- = -(k\frac{du}{dx})_+ + (k\frac{du}{dx})_- = 0, \\ k^{(+)}\frac{du_2}{dx} &= k^{(-)}\frac{du_1}{dx}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $W(x) = -k(x)\frac{du}{dx}$  - поток вещества  $k(x)$  - коэффициент диффузии.

Задача (1), (2) называется задачей с условиями сопряжения типа идеального контакта [1].

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД КОНЕЧНЫХ  
ОБЪЕМОВ

Построим сетку:  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = h/2$ ,  $x_i = x_{i-1} + h$ ,  $i = 2, 3, \dots, N-1$ ,  $x_N = 1 - \frac{h}{2}$ ,  $x_{N+1} = 1$ , где  $h = 1/N$  - это шаг сетки. Пусть  $V_i = (x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}})$ , где  $x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - \frac{h}{2}$ ,  $x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{h}{2}$  - конечные объемы, обозначим через  $x_\xi$  точку, где функция  $k(x)$  терпит разрыв. Запишем уравнение баланса на отрезке  $x_{i-\frac{1}{2}} < x_\xi < x_{i+\frac{1}{2}}$ :

$$W_{i+0.5} - W_{i-0.5} = h\varphi_i, \quad \text{где } \varphi_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x)dx, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3)$$

а  $W = -ku'$ . Выразим  $u'$ :  $u' = -\frac{W}{k}$ . Проинтегрируем получившееся равенство по  $x$  от  $x_i$  до  $x_{i+1}$  [2],[3]:

$$-(u_{i+1} - u_i) = - \int_{x_i}^{x_{i+1}} u'dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{W(x)}{k(x)} dx \quad (4)$$

Предположим, что функция  $W(x) \in C^2(x = \xi)$ , тогда её можно разложить в ряд Тейлора в точке  $x_{i+\frac{1}{2}}$ :

$$W(x) = W_{i+\frac{1}{2}} + (x - x_{i+\frac{1}{2}})\frac{\partial W_{i+\frac{1}{2}}}{\partial x} + \frac{(x - x_{i+\frac{1}{2}})^2}{2} \frac{\partial^2 W(\eta)}{\partial x^2}$$

где  $\eta \in (x_i, x_{i+1})$ . Также разложим функцию  $W(x)$  в точке  $x_{i-\frac{1}{2}}$ :

$$W(x) = W_{i-\frac{1}{2}} + (x - x_{i-\frac{1}{2}})\frac{\partial W_{i-\frac{1}{2}}}{\partial x} + \frac{(x - x_{i-\frac{1}{2}})^2}{2} \frac{\partial^2 W(\eta)}{\partial x^2}$$

где  $\eta \in (x_{i-1}, x_i)$ .

Заменяя первую производную  $W_{i+\frac{1}{2}}$  в точке  $x_{i+\frac{1}{2}}$  и  $W_{i-\frac{1}{2}}$  в точке  $x_{i-\frac{1}{2}}$  конечной разностью, получим следующую аппроксимацию уравнения (3):

$$-(u_{i+1} - u_i) = W_{i+\frac{1}{2}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{k(x)} + \frac{W_{i+0.5} - W_{i-0.5}}{h} \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{(x - x_{i+\frac{1}{2}})}{k(x)} dx + O(h^3) \quad (5)$$

$$-(u_i - u_{i-1}) = W_{i-\frac{1}{2}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} + \frac{W_{i+0.5} - W_{i-0.5}}{h} \cdot \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{(x - x_{i-\frac{1}{2}})}{k(x)} dx + O(h^3) \quad (6)$$

Или, по-другому

$$-k_{i+\frac{1}{2}} \cdot \frac{u_{i+1} - u_i}{h} = W_{i+\frac{1}{2}} + a_{i+\frac{1}{2}}(W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}})^+ + \psi_i, \quad (7)$$

$$-k_{i-\frac{1}{2}} \cdot \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = W_{i-\frac{1}{2}} + a_{i-\frac{1}{2}}(W_{i+\frac{1}{2}} - W_{i-\frac{1}{2}})^- + \psi_i, \quad (8)$$

где  $\psi_i = O(h^2)$ , коэффициенты  $k$  и  $a$  выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} k_{i+\frac{1}{2}} &= \left( \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{k(x)} \right)^{-1}; \\ a_{i+\frac{1}{2}} &= k_{i+\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{h^2} \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{(x - x_{i+\frac{1}{2}})}{k(x)} dx; \\ k_{i-\frac{1}{2}} &= \left( \frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} \right)^{-1}; \\ a_{i-\frac{1}{2}} &= k_{i-\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{h^2} \cdot \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{(x - x_{i-\frac{1}{2}})}{k(x)} dx. \end{aligned} \quad (9)$$

Отбросим остаточный член  $\psi_i$  в (7). Введем следующие обозначения:  $y_i$ - аппроксимация исходного потока  $u_i$ , а приближенные значения  $W_i$  обозначим через  $F_{i+\frac{1}{2}}^-$ ,  $F_{i-\frac{1}{2}}^+$ , где знаки  $\pm$  означают значение потока справа и слева соответственно. Отметим, что исходные потоки являются непрерывными, а аппроксимирующие потоки могут иметь разные значения  $F_{i\pm\frac{1}{2}}^\pm$ . Таким образом из (7) получаем:

$$-k_{i+\frac{1}{2}} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} = F_{i+\frac{1}{2}}^- + a_{i+\frac{1}{2}} (F_{i+\frac{1}{2}}^- - F_{i-\frac{1}{2}}^+), \quad (10)$$

$$-k_{i-\frac{1}{2}} \frac{y_i - y_{i-1}}{h} = F_{i-\frac{1}{2}}^+ + a_{i-\frac{1}{2}} (F_{i+\frac{1}{2}}^- - F_{i-\frac{1}{2}}^+), \quad (11)$$

Уравнения (3),(10),(11) аппроксимируют уравнение (1) с локальной погрешностью метода  $O(h^2)$ . Схему (3) (10),(11) назовем модифицированный метод конечных объемов.

Далее вычтем (11) из (10), тогда

$$(1 + a_{i+\frac{1}{2}} - a_{i-\frac{1}{2}})(F_{i+\frac{1}{2}}^- - F_{i-\frac{1}{2}}^+) = -k_{i+\frac{1}{2}} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + k_{i-\frac{1}{2}} \frac{y_i - y_{i-1}}{h}. \quad (12)$$

Объединяя (12) с аппроксимацией исходного уравнения (3), имеем

$$-(1 + a_{i+\frac{1}{2}} - a_{i-\frac{1}{2}})^{-1} \cdot \frac{1}{h} \left( k_{i+\frac{1}{2}} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - k_{i-\frac{1}{2}} \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \right) = \varphi_i. \quad (13)$$

С другой стороны из (10) и (11):

$$\begin{aligned} W_{i+\frac{1}{2}}^- &= \frac{-k_{i+\frac{1}{2}} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} (1 - a_{i-\frac{1}{2}}) - k_{i-\frac{1}{2}} \frac{y_i - y_{i-1}}{h} (a_{i+\frac{1}{2}})}{(1 + a_{i+\frac{1}{2}} - a_{i-\frac{1}{2}})}, \\ W_{i-\frac{1}{2}}^+ &= \frac{k_{i+\frac{1}{2}} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} a_{i-\frac{1}{2}} - k_{i-\frac{1}{2}} \frac{y_i - y_{i-1}}{h} (1 + a_{i-\frac{1}{2}})}{(1 + a_{i+\frac{1}{2}} - a_{i-\frac{1}{2}})}. \end{aligned} \quad (14)$$

Схема (14) аппроксимирует поток со вторым порядком точности, независимо от расположения разрыва коэффициента  $k(x)$ .

Пусть теперь  $\xi$  точка, в которой функция  $k(x)$  терпит разрыв, имеет вид  $\xi = x_i + \theta h$  для некоторого  $i$  и  $0 \leq \theta \leq 1$ . Рассмотрим частные случаи этой схемы.

$$\begin{aligned} k_{i+\frac{1}{2}} &= \left( \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{dx}{k(x)} \right)^{-1} = \left( \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_\xi} \frac{dx}{k(x)} + \frac{1}{h} \int_{x_\xi}^{x_{i+1}} \frac{dx}{k(x)} \right)^{-1} = \\ &= \left[ \frac{\theta}{2} \left( \frac{1}{k_i} + \frac{1}{k_{\xi-0}} \right) + \frac{1-\theta}{2} \left( \frac{1}{k_{\xi+0}} + \frac{1}{k_{i+1}} \right) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (15)$$

При вычислении интеграла здесь и в дальнейшем мы использовали формулу трапеций, то есть определенный интеграл от линейной функции равен полусумме значений функции на концах интервала интегрирования, умноженной на длину интервала интегрирования. Параметр  $\theta$ :  $\frac{\xi - x_i}{h} = \theta$ ;  $1 - \theta = \frac{\xi - x_{i+1}}{h}$ .

Аналогично находим  $k_{i-\frac{1}{2}}$ :

$$\begin{aligned} k_{i-\frac{1}{2}} &= \left( \frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} \right)^{-1} = \left( \frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_\xi} \frac{dx}{k(x)} + \frac{1}{h} \int_{x_\xi}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} \right)^{-1} = \\ &= \left[ \frac{-1+\theta}{2} \left( \frac{1}{k_{i-1}} + \frac{1}{k_{\xi-0}} \right) - \frac{\theta}{2} \left( \frac{1}{k_{\xi+0}} + \frac{1}{k_i} \right) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (16)$$

Параметр  $\theta$ :  $\frac{x_i - \xi}{h} = -\theta$ ;  $-1 + \theta = \frac{\xi - x_i}{h}$ . Причем  $k_{\xi-0}$  и  $k_{\xi+0}$  известны из условия сопряжения.

Теперь рассмотрим второй интеграл в (9):

$$a_{i+\frac{1}{2}} = k_{i+\frac{1}{2}} \frac{1}{h^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{k(x)} dx \Rightarrow \frac{1}{h^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{k(x)} dx =$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{h^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{k(x)} dx &= \frac{1}{h^2} \left( \int_{x_i}^{x_\xi} \frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{k(x)} dx + \int_{x_\xi}^{x_{i+1}} \frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{k(x)} dx \right) = \\ &= \frac{1}{h^2} \left( \frac{\theta h}{2} \left( \frac{x_i - x_{i+\frac{1}{2}}}{k_i} + \frac{\xi - 0 - x_{i+\frac{1}{2}}}{k_{\xi-0}} \right) \right) + \\ &+ \frac{1}{h^2} \left( \frac{(1-\theta)h}{2} \left( \frac{\xi + 0 - x_{i+\frac{1}{2}}}{k_{\xi+0}} + \frac{x_{i+1} - x_{i+\frac{1}{2}}}{k_{i+1}} \right) \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

Учитывая, что

$$\begin{aligned} x_i - x_{i+\frac{1}{2}} &= x_i - x_i - \frac{h}{2} = -\frac{h}{2}; x_{i+1} - x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + h - x_i - \frac{h}{2} = \frac{h}{2}; \\ \xi - 0 - x_{i+\frac{1}{2}} &= x_i + \theta h - x_i - \frac{h}{2} = h(\theta - 0.5) \\ \xi + 0 - x_{i+\frac{1}{2}} &= x_i + \theta h - x_i - \frac{h}{2} = h(\theta - 0.5), \end{aligned}$$

получаем:

$$a_{i+\frac{1}{2}} = k_{i+\frac{1}{2}} \frac{\theta}{2} \left( \frac{\theta - 0.5}{k_{\xi-0}} - \frac{0.5}{k_i} \right) + \frac{1-\theta}{2} \left( \frac{\theta - 0.5}{k_{\xi+0}} + \frac{0.5}{k_{i+1}} \right). \quad (17)$$

Аналогичное выражение получаем для  $a_{i-\frac{1}{2}}$ :

$$a_{i-\frac{1}{2}} = k_{i-\frac{1}{2}} \frac{1}{h^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{x - x_{i-\frac{1}{2}}}{k(x)} dx \Rightarrow \frac{1}{h^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{x - x_{i-\frac{1}{2}}}{k(x)} dx =$$

при  $x_{i-1} - x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - h - x_i + \frac{h}{2} = -\frac{h}{2}$ ;  $x_i - x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - x_i + \frac{h}{2} = \frac{h}{2}$ ;  
 $\xi - 0 - x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - \theta h - x_i + \frac{h}{2} = h(-\theta + 0.5)$ ;  $\xi + 0 - x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - \theta h - x_i + \frac{h}{2} = h(-\theta + 0.5)$ .

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{h^2} \left( \frac{-1 + \theta h}{2} \left( \frac{x_{i-1} - x_{i-\frac{1}{2}}}{k_i} + \frac{\xi - 0 - x_{i-\frac{1}{2}}}{k_{\xi-0}} \right) \right) - \\ &- \frac{1}{h^2} \left( \frac{(\theta)h}{2} \left( \frac{\xi + 0 - x_{i-\frac{1}{2}}}{k_{\xi+0}} + \frac{x_i - x_{i-\frac{1}{2}}}{k_i} \right) \right) + O(h^2). \\ a_{i-\frac{1}{2}} &= k_{i-\frac{1}{2}} \frac{\theta}{2} \left( \frac{\theta + 0.5}{k_{\xi-0}} - \frac{0.5}{k_{i-1}} \right) + \frac{1-\theta}{2} \left( \frac{\theta + 0.5}{k_{\xi+0}} + \frac{0.5}{k_i} \right). \quad (18) \end{aligned}$$

если коэффициент  $k(x)$  - кусочно-постоянный, то эти формулы точные и имеют вид:

$$k_{i+\frac{1}{2}} = \left( \frac{\theta}{k_i} + \frac{1-\theta}{k_{i+1}} \right)^{-1}, k_{i-\frac{1}{2}} = \left( \frac{\theta-1}{k_{i-1}} + \frac{\theta}{k_i} \right)^{-1}, \quad (19)$$

$$a_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1\theta(1-\theta)(k_i - k_{i+1})}{2(1-\theta)k_i + \theta k_{i+1}}, a_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1\theta(\theta-1)(k_i + k_{i-1})}{2(\theta-1)k_i + \theta k_{i-1}}. \quad (20)$$

Если же  $\xi$  - середина отрезка  $[x_i; x_{i+1}]$ , то есть  $\xi = x_{i+\frac{1}{2}}$ , тогда  $\theta = \frac{1}{2}$  и из (19)-(20) имеем:

$$k_{i+\frac{1}{2}} = 2 \left( \frac{1}{k_i} + \frac{1}{k_{i+1}} \right)^{-1}, k_{i-\frac{1}{2}} = 2 \left( -\frac{1}{k_{i-1}} + \frac{1}{k_i} \right)^{-1}, \quad (21)$$

$$a_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1(k_i - k_{i+1})}{4(k_i + k_{i+1})}, a_{i-\frac{1}{2}} = -\frac{1(k_i + k_{i-1})}{4(-k_i + k_{i-1})}, \quad (22)$$

## ЧИСЛЕННЫЙ ПРИМЕР

Задача с условиями сопряжения типа идеального контакта (1), (2) при  $k_1 = 0.01$ ,  $k_2 = 0.001$ , для  $\xi = 0.87$ ,  $n = 20$ . Коэффициенты были подобраны так, что функция  $u$  имеет следующий вид:

$$u(x) = \begin{cases} k_1(x(i)) \cdot \sin\left(\frac{\pi \cdot x(i)}{2}\right), & \text{если } x \in [0, \xi), \\ k_2(x(i)) \cdot \sin\left(\frac{\pi \cdot x(i)}{2}\right), & \text{если } x \in (\xi, 1]. \end{cases}$$

Шаг	точное значение	ММКО	Невязка	МКО	Невязка
0.0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.1	0.000016	0.000006	0.000009	0.075344	0.075329
0.2	0.000062	0.000021	0.000040	0.070991	0.070930
0.3	0.000136	0.000046	0.000090	0.065264	0.065127
0.4	0.000235	0.000081	0.000154	0.058379	0.058144
0.5	0.000354	0.000125	0.000228	0.050564	0.050211
0.6	0.000485	0.000179	0.000307	0.042048	0.041563
0.7	0.000624	0.000241	0.000382	0.033062	0.032438
0.8	0.000761	0.000313	0.000448	0.023831	0.023070
0.9	0.000889	0.000393	0.000496	0.014573	0.013684
1.0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

Для  $n = 40$ :

Шаг	точное значение	ММО	Невязка	МКО	Невязка
0.0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.1	0.000016	0.000005	0.000010	0.033651	0.033636
0.2	0.000062	0.000020	0.000041	0.028707	0.028645
0.3	0.000136	0.000045	0.000091	0.024201	0.024065
0.4	0.000235	0.000080	0.000155	0.020036	0.019801
0.5	0.000354	0.000124	0.000230	0.016163	0.015809
0.6	0.000485	0.000178	0.000308	0.012556	0.012071
0.7	0.000624	0.000240	0.000383	0.009208	0.008584
0.8	0.000761	0.000312	0.000449	0.006119	0.005358
0.9	0.000889	0.000392	0.000497	0.003294	0.002405
1.0	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.:Наука 1971.
- [2] Самарский А. А. Введение в численные методы. М.:Наука. 1987.
- [3] Рояк М. Э., Соловейчик Ю. Г. Сеточные методы решения краевых задач математической физики. Н.: НГТУ, 1998.

УДК 517.9

## ВАЖНЕЙШИЕ СВОЙСТА РЕЗОЛЬВЕНТЫ ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА-БЕЛЬТРАМИ

Атнагулов А. И. (Уфа, БГАУ)

### Введение

Работа посвящена исследованию спектральных свойств возмущения оператора Лапласа-Бельтрами  $Hu = H_0u + Vu = -\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta \frac{\partial u}{\partial\theta}) - \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} + Vu$ . А именно, доказательству формулы регуляризованного следа Гельфанда - Левитана для оператора Лапласа - Бельтрами, возмущённого оператором умножения на функцию  $\nu(\omega)$ ,  $\omega \in S^2$ . Впервые формула следа для оператора Лапласа - Бельтрами, возмущённого нечётной функцией  $\nu(\omega) \in C^\infty(S^2)$  была получена в 1993-1996 годах в работах [1],[2](хотя задача была поставлена И. М. Гельфандом в 1962 году). Отметим, что для метода, применяемого в этих работах, условие нечётности функции  $\nu(\omega)$  и принадлежности классу  $C^\infty(S^2)$  является существенным. Следующее продвижение в этой задаче было сделано в работах [3]-[5], основанных на одном способе суммирования второй поправки теории возмущений. В которых для любой функции (не обязательно нечётной)  $\nu(\omega)$  конечной гладкости получена классическая формула следа Гельфанда - Левитана, причем в работе [5]  $\nu(\omega) \in C^2(S^2)$ .

Для дальнейшего ослабления требований на возмущения  $\nu(\omega)$ , как оказалось, необходимо более подробное исследование свойств ядра  $R_0(\omega, \omega_0, \lambda)$  резольвенты оператора Лапласа - Бельтрами, ядра  $R_{0n}(\omega, \omega_0, \lambda)$  приведённой резольвенты. На основе этих исследований и методике работы [5] формула следа для оператора Лапласа - Бельтрами получена для возмущений  $\nu(\omega)$  из класса  $W_2^1(S^2)$ .

Отметим, что параграфы 1 и 2 посвящены развёрнутому изложению результатов работы [6]. Также необходимо понятие регуляризованного следа. Его подробно изучили Кордюков Ю.А. и Павленко В.А. в работе [7].

### § 1. Представление ядра $R_0(\omega, \omega_0, \lambda)$ резольвенты оператора Лапласа-Бельтрами

Хорошо известно, что ядро  $R_0(\omega, \omega_0, \lambda)$  резольвенты  $R_0(\lambda) = (H_0 - \lambda)^{-1}$  оператора  $H_0$  (Лапласа-Бельтрами) в  $L^2(S^2)$  равно

$$R_0(\omega, \omega_0, \lambda) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1)P_n(\cos\alpha)}{n(n+1) - \lambda}, \quad (1.1)$$

где  $\alpha$  — угол между векторами  $\omega, \omega_0 \in S^2$ ,  $P_n(\cos \alpha)$  — полином Лежандра, а  $P_n(\omega, \omega_0) = \frac{2n+1}{4\pi} P_n(\cos \alpha)$  есть ядро ортогонального проектора  $P_n$ , проектирующего на собственное подпространство, соответствующее собственному числу  $\lambda_n = n(n+1)$  оператора  $H_0$ , причем кратность  $\lambda_n$  равна  $2n+1$ .

С другой стороны, известно, что последовательность

$$f_n(\alpha) = \sqrt{n+1/2} \sqrt{\sin \alpha} P_n(\cos \alpha), n = 0, 1, \dots \quad (1.2)$$

образует ортонормированный базис из собственных функций задачи Дирихле обыкновенного дифференциального оператора  $Mf(\alpha) = -f''(\alpha) - (4 \sin^2 \alpha)^{-1} f(\alpha)$  в пространстве  $L_2[0, \pi]$ , причем  $Mf_n(\alpha) = (n+1/2)^2 f_n(\alpha)$ ,  $\mu_n = (n+1/2)^2$ .

Так что, согласно (1.2), ядро  $G(\alpha, \alpha_0, z)$  интегрального оператора  $G(z) = (M - z)^{-1}$  представляется в виде:

$$\begin{aligned} G(\alpha, \alpha_0, z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f_n(\alpha) f_n(\alpha_0)}{\mu_n - z} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1/2) \sqrt{\sin \alpha \sin \alpha_0} P_n(\cos \alpha) P_n(\cos \alpha_0)}{(n+1/2)^2 - z} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Откуда, полагая,

$$\Gamma(\alpha, \alpha_0, z) = (\sin \alpha \sin \alpha_0)^{-1/2} G(\alpha, \alpha_0, z), \quad (1.4)$$

и, учитывая, что  $P_n(1) = 1$ , получим:

$$\Gamma(\alpha, 0, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1/2) P_n(\cos \alpha)}{(n+1/2)^2 - z} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1) P_n(\cos \alpha)}{n(n+1) - (z-1/4)} \quad (1.5)$$

Сравнивая (1.1) и (1.5) между собой, мы приходим к следующим утверждениям.

**Лемма 1.** Для всех  $\omega, \omega_0 \in S^2$  и  $\lambda \notin \{n(n+1)\}_{n=0}^{\infty}$  ядро  $R_0(\omega, \omega_0, \lambda)$  представляется в виде:

$$R_0(\omega, \omega_0, \lambda) = \frac{1}{2\pi} \Gamma(\alpha, 0, \lambda + 1/4) \quad (1.6)$$

Сформулируем основной результат данного параграфа.

**Теорема 1.** Для всех вещественных  $\lambda$ ,  $\lambda \notin \{n(n+1)\}_{n=0}^{\infty}$  ядро  $R_0(\omega, \omega_0, \lambda)$  представляется в виде

$$R_0(\omega, \omega_0, \lambda) = \frac{1}{2\pi \sqrt{\sin \alpha}} [u_2(\alpha, \lambda + 1/4) - A(\lambda + 1/4) u_1(\alpha, \lambda + 1/4)], \quad (1.7)$$

где

$$A(z) = \frac{1}{2} \left[ \frac{u_2'(\frac{\pi}{2}, z)}{u_1'(\frac{\pi}{2}, z)} + \frac{u_2(\frac{\pi}{2}, z)}{u_1(\frac{\pi}{2}, z)} \right] \quad (1.8)$$

## § 2. Представление ядра $R_{0n}(\omega, \omega_0, \lambda)$ приведенной резольвенты

Представление ядра  $R_0(\omega, \omega_0, \lambda)$  в виде (1.7) позволяет вычислить ядро приведенной резольвенты в терминах оператора  $H_0$  функций  $u_k(\alpha, z)$ , а также их производных по переменной  $z$

$$\varphi_k(\alpha, z) = \frac{\partial}{\partial z} u_k(\alpha, z), \quad \psi_k(\alpha, z) = \frac{\partial}{\partial z} \varphi_k(\alpha, z) \quad (k = 1, 2)$$

в точке  $\alpha = \frac{\pi}{2}$ . Спектр оператора  $H_0$  совпадает с полюсами функции  $A(\lambda + \frac{1}{4})$  ( $A(z)$ ), то есть нулями функции  $u_1(\frac{\pi}{2}, \lambda + \frac{1}{4})$  и  $u_1'(\frac{\pi}{2}, \lambda + \frac{1}{4})$ , причем нетрудно убедиться, что

$$u_1(\frac{\pi}{2}, \lambda_n + \frac{1}{4}) = 0, \quad n = 2k + 1, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1)$$

$$u_1'(\frac{\pi}{2}, \lambda_n + \frac{1}{4}) = 0, \quad n = 2k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

Пусть также  $\varphi_k^0(\alpha, z) = \frac{\partial}{\partial z} u_k^0(\alpha, z)$ ,  $\psi_k(\alpha, z) = \frac{\partial}{\partial z} \varphi_k(\alpha, z)$  ( $k = 1, 2$ ), тогда функции  $\varphi_k(\alpha, z)$  и  $\psi_k(\alpha, z)$  на отрезке  $[0, \frac{\pi}{2}]$  являются решениями вольтерровых уравнений. Основной результат параграфа это следующая теорема.

**Теорема 2.** Пусть  $z_n = \lambda_n + \frac{1}{4}$ . Ядра  $P_n(\omega, \omega_0) = \frac{(2n+1)P_n(\cos \alpha)}{4\pi}$  и  $R_{0n}(\omega, \omega_0, \lambda_n)$  представляются в виде

$$P_n(\omega, \omega_0) = \frac{(2n+1)u_1(\alpha, z_n)}{4\pi \sqrt{\sin \alpha}}$$

и

$$R_{0n}(\omega, \omega_0, \lambda_n) = \frac{1}{2\pi \sqrt{\sin \alpha}} \left[ u_2(\alpha, z_n) - \frac{2n+1}{2} \varphi_1(\alpha, z_n) - a_n u_1(\alpha, z_n) \right],$$

где при  $n = 2k + 1$

$$a_n = \frac{u_2'(\frac{\pi}{2}, z_n)}{2u_1'(\frac{\pi}{2}, z_n)} + \frac{(2n+1)\varphi_2(\frac{\pi}{2}, z_n)}{2u_2(\frac{\pi}{2}, z_n)} - \frac{(2n+1)^2\psi_1(\frac{\pi}{2}, z_n)}{4u_2(\frac{\pi}{2}, z_n)},$$

а при  $n = 2k$

$$a_n = \frac{u_2(\frac{\pi}{2}, z_n)}{2u_1(\frac{\pi}{2}, z_n)} + \frac{(2n+1)\varphi_2'(\frac{\pi}{2}, z_n)}{2u_2'(\frac{\pi}{2}, z_n)} - \frac{(2n+1)^2\psi_1'(\frac{\pi}{2}, z_n)}{4u_2'(\frac{\pi}{2}, z_n)}.$$

Справедливы леммы.

**Лемма 2.** *Существуют постоянные  $c_0 > 0$  и  $c_1 > 0$ , не зависящие от  $z$  и  $\alpha$ , такие, что для всех  $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}]$ ,  $z > 0$ ,  $k = 1, 2$*

$$u_k(\alpha, z) = u_k^0(\alpha, z) + \omega_k(\alpha, z) \quad (2.3)$$

Причем

$$|u_k^0(\alpha, z)| \leq c_0 z^{-1/4} \quad |\omega_k(\alpha, z)| \leq c_1 z^{-3/4} \alpha$$

**Лемма 3.** *Для всех  $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}]$ ,  $z > 0$ ,  $k = 1, 2$*

$$\varphi_k^0(\alpha, z) = \frac{\alpha}{2z} u_k^0(\alpha, z) - \frac{1}{4z} u_k^0(\alpha, z) \quad (2.4)$$

**Лемма 4.** *Для всех вещественных  $z > 0$  и  $k = 1, 2$*

$$\max_{0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}} |\varphi_k^0(\alpha, z)| \leq c_0 |z|^{-3/4},$$

где  $c_0 > 0$  — постоянная, не зависящая от  $z$ .

**Лемма 5.** *При  $k = 1, 2$  для всех  $\alpha > 0$  и  $z > 0$*

$$\begin{aligned} \psi_k^0(\alpha, z) &= \frac{\partial}{\partial z} u_k^0(\alpha, z) = -\frac{1}{z} u_k^0(\alpha, z) - \frac{\alpha^2}{4z} u_k^0(\alpha, z) = \\ &= \left( \frac{1}{4z^2} - \frac{\alpha^2}{4z} \right) u_k^0(\alpha, z) - \frac{\alpha}{4z^2} u_k^0(\alpha, z) \end{aligned} \quad (2.5)$$

**Лемма 6.** *При  $k = 1, 2$  для всех  $\alpha > 0$  и  $z > 0$*

$$\varphi_k^0(\alpha, z) = \frac{\partial}{\partial \alpha} u_k^0(\alpha, z) = -\frac{1}{4z} u_k^0(\alpha, z) - \left( \frac{1}{8\alpha z} + \frac{\alpha}{2} \right) u_k^0(\alpha, z). \quad (2.6)$$

**Лемма 7.** *При  $k = 1, 2$  для всех  $\alpha > 0$  и  $z > 0$*

$$\psi_k^0(\alpha, z) = \frac{\partial}{\partial \alpha} u_k^0(\alpha, z) = \left( \frac{1}{16\alpha z^2} - \frac{\alpha}{4z} \right) u_k^0(\alpha, z) - \frac{\alpha^2}{4z} u_k^0(\alpha, z). \quad (2.7)$$

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Садовничий В. А., Дубровский В. В. Классическая формула регуляризованного следа для собственных чисел оператора Лапласа-Бельтрами с потенциалом на сфере // Докл. АН СССР, 1991, Т 319, №1, С. 61–62.
- [2] Подольский В. Е. Формула регуляризованного следа оператора Лапласа-Бельтрами с нечетным потенциалом на  $S^2$  // Матем. заметки, 1994, Т 56, №1, С. 71–77.
- [3] Фазуллин З. Ю. регуляризованного следа оператора Лапласа-Бельтрами // Международная конференция по комплексному анализу и смежным вопросам. Тезисы докладов Нижний Новгород, 1997, С. 80–81.
- [4] Фазуллин З. Ю., Садовничий В. А. Формула первого регуляризованного следа для возмущения оператора Лапласа-Бельтрами // Дифференциальные уравнения, 2001, том 37 №3, С. 402–409
- [5] Фазуллин З. Ю., Садовничий В. А. Асимптотика собственных чисел и формула следа возмущения оператора Лапласа на сфере  $S^2$  // Матем. заметки, 2005, том 77, выпуск 3, С. 434–448
- [6] Фазуллин З. Ю., Садовничий В. А., Атнагулов А. И. Свойства резольвенты оператора Лапласа-Бельтрами на двумерной сфере и формула следов // Докл. АН, 20011, Т 441, №2, С. 174–176.
- [7] Кордюков Ю. А., Павленко В. А. Сингулярные интегральные операторы на многообразии с отмеченным подмногообразием // Уфимск. матем. журн., 6:3 (2014), 35–71



ПОСТРОЕНИЕ ФОРМУЛЫ ПРОДОЛЖЕНИЯ ДЛЯ  
ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С  
ПОТЕНЦИАЛОМ РИССА

Белевцов Н. С. (Уфа, УГАТУ)

Введение

В последние годы аппарат дробного интегро-дифференцирования находит все более широкое применение в качестве эффективного средства описания физических, химических и биологических процессов в сложных неупорядоченных и неоднородных средах. Примерами могут служить процессы переноса в турбулентной плазме, диффузии радионуклидов в геологических формациях и т.д.

Естественным расширением понятия дробной производной на многомерный случай является потенциал Рисса [1], общий вид которого записывается как

$$R^\alpha \varphi = \frac{1}{\gamma_n(\alpha)} \int_{R^n} \frac{\varphi(y)}{|x-y|^{n-\alpha}} dy, \quad (1)$$

где  $\gamma_n(\alpha)$  - известная постоянная.

В последние годы потенциал Рисса активно используется в математических моделях, описывающих физические процессы с аномальной кинетикой. Например, уравнение

$$u_t = \Delta (R^\alpha u), \quad u = u(x, y, t), \quad (2)$$

где  $\Delta$  - оператор Лапласа, описывает процессы аномального диффузионного переноса.

Методы аналитического решения дифференциальных уравнений с потенциалами Рисса все еще недостаточно разработаны. Одним из эффективных подходов к построению решений уравнений с производными целого порядка является использование методов современного группового анализа. Однако до сих пор эти методы не применялись для дробно-дифференциальных уравнений с потенциалом Рисса. Первым шагом на этом пути является построение формулы продолжения для группы точечных преобразований на потенциал Рисса, что и является целью данной работы.

Рассмотрим однопараметрическую группу точечных преобразований вида

$$\bar{x} = \varphi(x, y, u, a), \quad \bar{y} = \psi(x, y, u, a), \quad \bar{u} = \Theta(x, y, u, a).$$

Для вывода формул продолжения будем следовать подходу, впервые продемонстрированному в работе [2]. Пусть инфинитезимальное преобразование для однопараметрической группы точечных преобразований имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{x} &\approx x + a\xi^1(x, y, u(x, y)), \\ \bar{y} &\approx y + a\xi^2(x, y, u(x, y)), \\ \bar{u} &\approx u + a\eta(x, y, u(x, y)). \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \xi^1(x, y) &= \left. \frac{\partial \varphi(x, y, u, a)}{\partial a} \right|_{a=0}, \\ \xi^2(x, y) &= \left. \frac{\partial \psi(x, y, u, a)}{\partial a} \right|_{a=0}, \\ \eta(x, y) &= \left. \frac{\partial \Theta(x, y, u, a)}{\partial a} \right|_{a=0}. \end{aligned}$$

Для упрощения записи обозначим

$$f[x, y] = f(x, y, u(x, y)).$$

Рассмотрим инфинитезимальное преобразование потенциала Рисса в двумерном случае, т.е.:

$$R^\alpha \bar{u}(\bar{x}, \bar{y}) \approx \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{u}(\bar{\mu}, \bar{\nu})}{((\bar{x} - \bar{\mu})^2 + (\bar{y} - \bar{\nu})^2)^{\frac{2-\alpha}{2}}} d\bar{\mu} d\bar{\nu}. \quad (3)$$

Здесь

$$\bar{\mu} \approx \mu + a\xi^1[\mu, \nu], \quad \bar{\nu} \approx \nu + a\xi^2[\mu, \nu], \quad \bar{u} \approx u + a\eta[\mu, \nu].$$

Рассмотрим преобразование подынтегрального выражения. Числитель преобразуется следующим образом:

$$\bar{u}(\bar{\mu}, \bar{\nu}) \approx u(\mu, \nu) + a\eta[\mu, \nu].$$

Вычислим якобиан замены переменных:

$$J(\mu, \nu) \approx \frac{\partial(\bar{\mu}, \bar{\nu})}{\partial(\mu, \nu)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial \mu} & \frac{\partial \bar{\nu}}{\partial \mu} \\ \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial \nu} & \frac{\partial \bar{\nu}}{\partial \nu} \end{vmatrix} = 1 + aD_\mu(\xi^1) + aD_\nu(\xi^2).$$

Таким образом

$$d\bar{\mu}d\bar{\nu} \approx 1 + aD_\mu(\xi^1) + aD_\nu(\xi^2).$$

Рассмотрим теперь преобразование знаменателя подынтегрального выражения:

$$\begin{aligned} ((\bar{x} - \bar{\mu})^2 + (\bar{y} - \bar{\nu})^2)^{\frac{2-\alpha}{2}} &\approx ((x + a\xi^1[x, y] - \mu - a\xi^1)^2 + \\ &+ (y + a\xi^2[x, y] - \nu - a\xi^2)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}} = ((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}} \times \\ &\times \left( 1 + 2a \frac{(x - \mu)(\xi^1[x, y] - \xi^1) + (y - \nu)(\xi^2[x, y] - \xi^2)}{(x - \mu)^2 + (y - \nu)^2} \right)^{\frac{2-\alpha}{2}}. \end{aligned}$$

Подставляя преобразованные подынтегральные выражения в интеграл (3), получим:

$$\begin{aligned} R^\alpha \bar{u}(\bar{x}, \bar{y}) &\approx \\ &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(u + a\eta) (1 + aD_\mu(\xi^1)) (1 + aD_\nu(\xi^2)) (1 + 2ak)^{\frac{\alpha-2}{2}}}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}}} d\mu d\nu = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(u + a\eta) (1 + aD_\mu(\xi^1) + aD_\nu(\xi^2)) (1 + a(\alpha - 2)k)}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}}} d\mu d\nu, \end{aligned}$$

где

$$k = \frac{(x - \mu)(\xi^1[x, y] - \xi^1) + (y - \nu)(\xi^2[x, y] - \xi^2)}{(x - \mu)^2 + (y - \nu)^2}.$$

Преобразуем полученный интеграл, пренебрегая членами порядка  $o(a)$ . Имеем

$$\begin{aligned} R^\alpha \bar{u}(\bar{x}, \bar{y}) &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(u + a\eta) (1 + aD_\mu(\xi^1) + aD_\nu(\xi^2)) (1 + a(\alpha - 2)k)}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}}} d\mu d\nu = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u + a\eta + auD_\mu(\xi^1) + auD_\nu(\xi^2)}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}}} d\mu d\nu + \\ &+ a(\alpha - 2) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(x - \mu)(\xi^1[x, y] - \xi^1) + (y - \nu)(\xi^2[x, y] - \xi^2)}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{4-\alpha}{2}}} d\mu d\nu. \end{aligned} \quad (4)$$

Заметим, что:

$$\begin{aligned} a \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{uD_\mu(\xi^1)}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}}} d\mu d\nu &= \\ &= a \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u_\mu \xi^1}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}}} d\mu d\nu + \\ &+ a(\alpha - 2) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(x - \mu)\xi^1}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{4-\alpha}{2}}} d\mu d\nu. \end{aligned} \quad (5)$$

С учетом (4) инфинитезимальное преобразование примет вид

$$\begin{aligned} R^\alpha \bar{u}(\bar{x}, \bar{y}) &= R^\alpha u + aR^\alpha \eta - a \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u_\mu \xi^1 + u_\nu \xi^2}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{2-\alpha}{2}}} d\mu d\nu + \\ &+ a(\alpha - 2) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(x - \mu)\xi^1 + u(y - \nu)\xi^2}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{4-\alpha}{2}}} d\mu d\nu + \\ &+ a(\alpha - 2) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(x - \mu)(\xi^1[x, y] - \xi^1) + (y - \nu)(\xi^2[x, y] - \xi^2)}{((x - \mu)^2 + (y - \nu)^2)^{\frac{4-\alpha}{2}}} d\mu d\nu = \\ &= R^\alpha u + a(R^\alpha(\eta - \xi^1 u_x - \xi^2 u_y) + \xi^1 D_x R^\alpha u + \xi^2 D_y R^\alpha u). \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом была доказана следующая

**Теорема 3.** *Инфинитезимальное преобразование потенциала Рисса порядка  $\alpha$  для функции  $u(x, y)$  может быть представлено в виде*

$$R^\alpha \bar{u}(\bar{x}, \bar{y}) = R^\alpha u(x, y) + a\zeta_\alpha[x, y],$$

где  $\zeta_\alpha[x, y]$  определяется формулой продолжения

$$\zeta_\alpha[x, y] = R^\alpha(\eta - \xi^1 u_x(x, y) - \xi^2 u_y(x, y)) + D_x R^\alpha u(x, y) + D_y R^\alpha u(x, y).$$

Когда же рассматривается  $n$ -мерное пространство, справедлива следующая

**Теорема 4.** *Инфинитезимальное преобразование потенциала Рисса порядка  $\alpha$  для функции  $u(x_1, \dots, x_n)$  может быть представлено в виде*

$$R^\alpha \bar{u}(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n) = R^\alpha u(x_1, \dots, x_n) + a\zeta_\alpha[x_1, \dots, x_n],$$

где  $\zeta_\alpha[x_1, \dots, x_n]$  определяется формулой продолжения

$$\zeta_\alpha[x_1, \dots, x_n] = R^\alpha(\eta - \xi^1 u_{x_1}(x_1, \dots, x_n) - \dots - \xi^2 u_{x_n}(x_1, \dots, x_n) + D_{x_1} R^\alpha u(x_1, \dots, x_n) + \dots + D_{x_n} R^\alpha u(x_1, \dots, x_n)).$$

Её доказательство абсолютно аналогично доказательству теоремы 1.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. – Минск: Наука и техника, 1987.
- [2] Газизов Р. К., Касаткин А. А., Лукащук С. Ю. Уравнения с производными дробного порядка: замены переменных и нелокальные симметрии. Уфимск. матем. журн., 2012, Т. 4, В. 4, С. 54–68.

УДК 517.53 : 517.537.72

#### ФОРМУЛА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОРЯДКА СУММЫ РЯДА ДИРИХЛЕ, СХОДЯЩЕГОСЯ В ПОЛУПЛОСКОСТИ

Гайсина Г. А. (Уфа, БашГУ)

Целые функции являются непосредственным обобщением многочленов. Если

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n \quad (1)$$

– целая функция, по принципу максимума модуля, имеем

$$M_f(r) \stackrel{\text{def}}{=} \max_{|z|=r} |f(z)| = \max_{|z| \leq r} |f(z)|.$$

Так что  $M_f(r)$  – неубывающая на  $[0, \infty)$  функция, причем если  $f(z) \neq \text{const}$ , то  $M_f(r)$ , строго возрастая, стремится к  $+\infty$  при  $r \rightarrow \infty$ . Для многочлена  $f$  степени  $n$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\ln M_f(r)}{\ln r} = n.$$

Для целых трансцендентных функций (т. е. функций, отличных от многочлена) отношение  $\frac{\ln M_f(r)}{\ln r}$  стремится к  $\infty$ . Поэтому рост  $\ln M_f(r)$  сравнивают не с  $\ln r$ , а с более быстро растущими функциями, например, со степенными. Поступая таким образом, в 1896 г. Э. Борель пришел к понятию порядка  $\rho$  целой функции, полагая

$$\rho = \overline{\lim}_{r \rightarrow \infty} \frac{\ln \ln M_f(r)}{\ln r}.$$

Было показано, что порядок целой функции (1) равен

$$\rho = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{n \ln n}{\ln |1/a_n|}.$$

Пусть функция  $f$ , определенная рядом (1), аналитична только в круге  $D(0, 1) = \{z: |z| < 1\}$  (в этом случае радиус сходимости ряда (1) равен единице). Будем предполагать, что функция  $f$  не ограничена в  $D(0, 1)$ . Так что  $M_f(r) \uparrow \infty$  при  $r \uparrow 1$ . Порядком  $\rho$  неограниченной аналитической в круге  $D(0, 1)$  функции  $f$  называется величина

$$\rho = \overline{\lim}_{r \uparrow 1} \frac{\ln \ln M_f(r)}{-\ln(1-r)}.$$

Как известно (см., например в [1] – [3]),

$$\frac{\rho}{\rho + 1} = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln^+ \ln^+ |a_n|}{\ln n}, \quad a^+ = \max(a, 0).$$

Если положить  $z = e^{-s}$  ( $s = \sigma + it$ ), то имеем:

$$F(s) = f(e^{-s}) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-ns}. \quad (2)$$

Так как при указанной замене полуплоскость  $\Pi_0 = \{s = \sigma + it : \sigma > 0\}$  отображается в единичный круг  $D(0, 1)$ , то

$$M(\sigma) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{|t| < \infty} |F(\sigma + it)| = M_f(r),$$

где  $\sigma > 0, r = e^{-\sigma} < 1$ . Проверяется, что  $-\ln(1 - r) \sim -\ln \sigma$  при  $r \uparrow 1$  (при этом, очевидно,  $\sigma \downarrow 0$ ). Учитывая это, имеем:

$$\rho = \rho_F \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\lim}_{\sigma \downarrow 0} \frac{\ln \ln M(\sigma)}{-\ln \sigma}.$$

Таким образом, порядок  $\rho$  функции  $f$  в  $D(0, 1)$  равен характеристике  $\rho_F$  роста ряда Тейлора-Дирихле (2). Ее называют обычным порядком<sup>1</sup> или просто порядком функции  $F$ . Это наблюдение приводит к понятию порядка общего ряда Дирихле, сходящегося лишь в некоторой полуплоскости.

Пусть  $\Lambda = \{\lambda_n\} (0 < \lambda_n \uparrow \infty)$  – произвольная последовательность вещественных чисел, удовлетворяющая условию

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln n}{\lambda_n} = 0. \quad (3)$$

Предположим, что область сходимости ряда Дирихле

$$F(s) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\lambda_n s} \quad (4)$$

есть полуплоскость  $\Pi_0$ . В силу условия (3), ряд (4) сходится в  $\Pi_0$  абсолютно, и потому его сумма  $F$  аналитична в этой полуплоскости [5]. Здесь

<sup>1</sup>В отличие от так называемого порядка  $\rho_R$  по Ритту (R-порядка) в полуплоскости  $\Pi_0$  [4]:

$$\rho_R = \overline{\lim}_{\sigma \downarrow 0} \frac{\ln \ln M(\sigma)}{|\sigma|^{-1}}.$$

изучается рост функции  $F$  в зависимости от поведения коэффициентов  $a_n$  ряда (4), поэтому естественно предположить, что  $M_F(\sigma) \rightarrow \infty$  при  $\sigma \downarrow 0$ , где

$$M_F(\sigma) = \sup_{|t| < \infty} |F(\sigma + it)| (\sigma > 0).$$

Класс всех таких функций  $F$ , представленных рядами Дирихле (4), обозначим  $D_0(\Lambda)$ . Величина

$$\rho_F = \overline{\lim}_{\sigma \downarrow 0} \frac{\ln \ln M_F(\sigma)}{-\ln \sigma}$$

называется порядком суммы ряда Дирихле (4). Именно так порядок определяется, например, в работах [6] – [10]. В [11], [12] порядок функции  $F \in D_0(\Lambda)$  определяется по формуле

$$\rho_F = \overline{\lim}_{\sigma \downarrow 0} \frac{\ln \ln M_F(\sigma)}{-\ln(1 - e^{-\sigma})},$$

что, очевидно, совпадает с выше введенным порядком. В перечисленных работах [7] – [9], [11], [12] без доказательства приводится формула

$$\frac{\rho_F}{\rho_F + 1} = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln^+ \ln^+ |a_n|}{\ln \lambda_n}, \quad (5)$$

справедливость которой утверждается в них лишь при некоторых дополнительных ограничениях на показатели  $\lambda_n$  и коэффициенты  $a_n$  ряда (4). Эти ограничения весьма разные, порой очень жесткие. Так, в [11], [12] предполагается, что последовательность  $\Lambda$  имеет конечную верхнюю плотность, т. е.

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{\lambda_n} = D < \infty.$$

Это условие, как будет видно, слишком сильное. С другой стороны, в [9] утверждается, что формула (5) верна при выполнении условий

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln n}{\lambda_n} = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln |a_n|}{\lambda_n} = 0. \quad (6)$$

Как известно, лишь при этих требованиях формула (5) не верна [10]. В статье [6] формула (5) доказана, но при

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln n}{\ln \lambda_n} = \gamma < \infty. \quad (7)$$

Оказывается, это условие может быть существенно ослаблено (см. ниже).

Обозначим

$$\alpha = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln \ln n}{\ln \lambda_n}. \quad (8)$$

Как видно из (3),  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Далее, положим

$$\mu = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln^+ \ln^+ |a_n|}{\ln \lambda_n}. \quad (9)$$

В статье [7] утверждается, что если  $\alpha$  фиксировано, а параметр  $\mu$  удовлетворяет требованию  $\mu \geq \alpha$ , то  $\mu = \frac{\rho_F}{\rho_F + 1}$ , т. е. верна формула (5). Полное доказательство этого утверждения приведено в [13]. Недостатком этого результата является то, что условие  $\alpha \leq \mu$  при фиксированном  $\Lambda$  содержит дополнительное ограничение на коэффициенты  $a_n$  ряда Дирихле (4). Поэтому формула для порядка  $\rho_F$  может не иметь места для какой-то функции  $F$  из класса  $D_0(\Lambda)$ . Поэтому естественно ставить вопрос о существенности условия  $\mu \geq \alpha$  для справедливости формулы (5). Цель статьи – дать ответ на этот вопрос.

Равенство  $\mu = \frac{\rho_F}{\rho_F + 1}$  доказано в [10] при  $\alpha = 0$ . Это условие слабее условия (7). Действительно, если  $\gamma < \infty$ , то

$$\alpha = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln n}{\ln \lambda_n} \cdot \frac{\ln \ln n}{\ln n} = 0.$$

С другой стороны, для последовательности  $\{\lambda_n\}$ ,  $\lambda_n = \ln^2(n+1)$ , имеем:  $\alpha = 1/2$ , но  $\gamma = \infty$ . При этом, очевидно,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln n}{\lambda_n} = 0.$$

В [10] показано еще следующее: существует последовательность  $\Lambda$  с  $\alpha > 0$ , существует функция  $F \in D_0(\Lambda)$ , для которой  $\mu \neq \frac{\rho_F}{\rho_F + 1}$ .

Оказывается, условие  $\alpha = 0$  на самом деле является необходимым: для любой последовательности  $\Lambda$  такой, что  $\alpha > 0$ , существует функция  $F \in D_0(\Lambda)$ , для порядка  $\rho_F$  которой формула (5) не верна [14]. Таким образом, справедлива

**Теорема 5.** *Для того, чтобы для любой функции  $F \in D_0(\Lambda)$  порядок  $\rho_F$  вычислялся по формуле*

$$\frac{\rho_F}{\rho_F + 1} = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln^+ \ln^+ |a_n|}{\ln \lambda_n},$$

*необходимо и достаточно, чтобы*

$$\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln \ln n}{\ln \lambda_n} = 0.$$

Достаточность теоремы 1 доказана в [10]. При этом формула верна и для случая  $\rho_F = \infty$ .

Пусть  $\mu(0 \leq \mu \leq 1)$ ,  $\alpha(0 \leq \alpha \leq 1)$  заданные числа. Через  $D_0(\mu, \alpha)$  обозначим подкласс класса  $D_0(\Lambda)$  рядов Дирихле (4), коэффициенты  $a_n$  которых удовлетворяют равенству (9), а показатели  $\lambda_n$  – равенству (8). Как было сказано выше (см. [14]) при  $\alpha \leq \mu$  порядок  $\rho_F$  любой функции  $F \in D_0(\mu, \alpha)$  может быть вычислен при помощи формулы (5).

Отметим, что ограничения  $0 \leq \mu \leq 1$  и  $0 \leq \alpha \leq 1$  следуют из равенств (6). Для  $\mu = 1$  формула (5) верна, так как в этом случае  $\alpha \leq \mu$ . При этом  $\mu = \frac{\rho_F}{\rho_F + 1} = 1$ , т. е.  $\rho_F = \infty$ . Поэтому в дальнейшем будем предполагать, что  $\mu < 1$ . Будет показано, что для любых чисел  $\alpha(0 \leq \alpha \leq 1)$ ,  $\mu(0 \leq \mu < 1)$  таких, что  $\mu < \alpha$ , всегда существует функция  $F \in D_0(\mu, \alpha)$ , для которой порядок  $\rho_F$  не может быть найден по формуле (5). Это будет означать, что справедлива

**Теорема 6.** *Пусть заданы  $\mu(0 \leq \mu < 1)$ ,  $\alpha(0 \leq \alpha \leq 1)$ . Для того, чтобы порядок  $\rho_F$  любой функции  $F \in D_0(\mu, \alpha)$  вычислялся по формуле (5), необходимо и достаточно, чтобы  $\alpha \leq \mu$ .*

Достаточность данной теоремы доказана в [13].

Необходимость условия  $\alpha \leq \mu$ . Пусть  $\mu < \alpha$ . Это означает, что для любого  $\varepsilon > 0$  найдется последовательность  $\{n_m\}$  натуральных чисел  $n_m, n_m \uparrow \infty$  такая, что

$$\beta_1 \leq \frac{\ln \ln n_m}{\ln \lambda_{n_m}} \leq \beta_2 (m \geq 1), \quad (10)$$

где  $\beta_1 = \alpha - \varepsilon, \beta_2 = \alpha + \varepsilon$  ( $0 < \varepsilon < \alpha$ ).

Фиксируя последовательность  $\{n_m\}$ , построим соответствующий пример функции  $F \in D_0(\mu, \alpha)$ . Для этого выберем коэффициенты  $a_n$  и показатели  $\lambda_n$  ряда Дирихле вида (4) специальным образом, но удовлетворяющим соответственно условиям (8) и (9).

Положим  $a_n = \exp[(\ln n_m)^{\frac{\mu}{\alpha}}]$  ( $0 \leq \mu \leq \alpha$ ),  $n_m \leq n < n_{m+1}$  ( $m \geq 1$ ) (показатели  $\lambda_n$  ряда (4) выберем позже). Ясно, что для ряда (4) с такими коэффициентами область сходимости (и абсолютной сходимости) есть  $\Pi_0$  [5]. Обозначая для выбранных таким образом коэффициентов  $a_n$

$$\nu = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln^+ \ln^+ |a_n|}{\ln \lambda_n},$$

убедимся, что  $\nu = \mu$ . Действительно, пусть  $n_m \leq n < n_{m+1}$ . Тогда

$$\frac{\ln \ln |a_n|}{\ln \lambda_n} = \frac{\mu \ln \ln n_m}{\alpha \ln \lambda_n} \leq \frac{\mu \ln \ln n_m}{\alpha \ln \lambda_{n_m}}.$$

Учитывая (10), отсюда получаем, что  $\nu \leq \frac{\mu}{\alpha}(\alpha + \varepsilon)$ . Так как  $\varepsilon > 0$  – любое, то  $\nu \leq \mu$ . С другой стороны,

$$\nu \geq \overline{\lim}_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln^+ \ln^+ |a_n|}{\ln \lambda_{n_m}} = \frac{\mu}{\alpha} \overline{\lim}_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln \ln n_m}{\ln \lambda_{n_m}}.$$

Следовательно, учитывая левую оценку в (10), отсюда получаем, что  $\nu \geq \frac{\mu}{\alpha}(\alpha - \varepsilon)$ , т. е.  $\nu \geq \mu$ . Таким образом, действительно  $\nu = \mu$ .

Если бы порядок  $\rho_F$  ряда Дирихле

$$F(s) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\lambda_n s} \quad (s = \sigma + it, \sigma > 0) \quad (11)$$

вычислялся бы по формуле (5), имели бы

$$\rho_F = \frac{\mu}{1 - \mu}. \quad (12)$$

Убедимся, что при подходящем выборе показателей ряда (11) это не так. Действительно, так как  $a_n > 0$ , то имеем

$$M_F(\sigma) = \sup_{|t| < \infty} |F(\sigma + it)| \geq |F(\sigma)| = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\lambda_n \sigma} \quad (\sigma > 0).$$

Следовательно,

$$M_F(\sigma) \geq \sum_{n=n_m}^{2n_m} a_n e^{-\lambda_n \sigma} \geq n_m \exp[(\ln n_m)^{\frac{\mu}{\alpha}} - \lambda_{2n_m} \sigma]. \quad (13)$$

Положим теперь  $\lambda_n = (\ln n)^{\frac{1}{\alpha}}$  ( $n \geq 2$ ). Тогда для последовательности  $\Lambda = \{\lambda_n\}$  условие (8) выполнено, а  $\lambda_{2n_m} = (\ln 2n_m)^{\frac{1}{\alpha}}$ . Таким образом, из (13) получаем

$$\ln M_F(\sigma) \geq \ln n_m + (\ln n_m)^{\frac{\mu}{\alpha}} - (\ln 2n_m)^{\frac{1}{\alpha}} \sigma \quad (\sigma > 0). \quad (14)$$

Выберем  $\sigma = \sigma_m$  как решение уравнения

$$(\ln n_m)^{\frac{\mu}{\alpha}} = (\ln 2n_m)^{\frac{1}{\alpha}} \sigma. \quad (15)$$

Так как  $(\ln 2n_m)^{\frac{1}{\alpha}} = (1 + o(1))(\ln n_m)^{\frac{1}{\alpha}}$  при  $m \rightarrow \infty$ , то из (15) следует, что при  $m \rightarrow \infty$

$$\frac{1}{\sigma} = (1 + o(1))(\ln n_m)^{\frac{1-\mu}{\alpha}}. \quad (16)$$

Таким образом, учитывая (15), (16) из (14) получаем, что при  $m \rightarrow \infty$

$$\ln M_F(\sigma_m) \geq \ln n_m = (1 + o(1)) \left( \frac{1}{\sigma} \right)^{\frac{\alpha}{1-\mu}}.$$

Это означает, что  $\rho_F \geq \frac{\alpha}{1-\mu}$ . Но, согласно (12),  $\rho_F = \frac{\mu}{1-\mu}$ . Значит, если учесть предыдущую оценку, то

$$\frac{\mu}{1-\mu} \geq \frac{\alpha}{1-\mu} \quad (0 \leq \mu < 1),$$

что противоречит предположению  $\mu < \alpha$ .

Пример построен.

*Замечание.* Пусть  $D(0, 1)$  – круг сходимости степенного ряда (1). Для ряда Тейлора-Дирихле

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-ns}$$

обычный порядок  $\rho_F$  совпадает с порядком  $\rho$  функции  $f$  вида (1). Так как в данном случае  $\lambda_n = n$ , то

$$\alpha = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln \ln n}{\ln \lambda_n} = 0,$$

и поэтому из теоремы 1 как следствие вытекает упомянутая в самом начале формула Говорова – Мак-Лейна – Шереметы для вычисления порядка  $\rho$  функции  $f$ , заданной в круге  $D(0, 1)$  рядом (1).

В заключение автор благодарит лектора по спецкурсам «Целые функции» и «Ряды Дирихле» профессора А. М. Гайсина за постановку задачи и предоставленные источники по теме исследования.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Говоров Н. В. О связи между ростом функции, аналитической в круге и коэффициентами ее степенного разложения // Труды Новочеркасск. политехн. ин-та. 1959. Т. 100. С. 101–115.
- [2] Мак-Лейн Г. Асимптотические значения голоморфных функций. М.: Мир, 1966.
- [3] Шеремета М. Н. О связи между ростом целых или аналитических в круге функций нулевого порядка и коэффициентами их степенных разложений // Изв. вузов. Математика. 1968. № 6. С. 115–121.

- [4] *Гайсин А. М.* Оценка роста функции, представленной рядом Дирихле, в полуполосе // Матем. сб. 1982. Т. 117 (159). № 3. С. 412–424.
- [5] *Леонтьев А. Ф.* Целые функции. Ряды экспонент. М.: Наука, 1983.
- [6] *Дагене Е. Я.* О центральном показателе ряда Дирихле // Литовск. матем. сб. 1968. Т. 8. № 3. С. 504–521.
- [7] *Бойчук В. С.* О росте абсолютно сходящихся в полуплоскости рядов Дирихле // В кн.: Математический сборник. К.: Наукова думка, 1976. С. 238–240.
- [8] *Галь Ю. М., Шеремета М. Н.* О росте аналитических в полуплоскости функций, заданных рядами Дирихле // ДАН Украинской ССР. Серия «А». Физико-математические и технические науки. 1978. № 12. С. 1065–1067.
- [9] *Yu Chia-Yung* Sur la croissance et la répartition des valeurs des series de Dirichlet quine convergent que dans un demi-plan // C. R. Sci. 1979. AV 288. № 19. A891–A893.
- [10] *Гайсин А. М.* О росте функции, представленной рядом Дирихле, вблизи прямой сходимости // Исследования по теории аппроксимации функций. Уфа: Башкирский филиал АН СССР. 1981. С. 5–13.
- [11] *Krishna Nandan* On the maximum terms and maximum modulus analytic functions represented by Dirichlet series // Ann. Polon. Math. 1973. 28. P. 213–222.
- [12] *Krishna Nandan* On the lower order of analytic functions represented by Dirichlet series // Rev. roum. math. pures et appl. 1976. 21. № 10. P. 1361–1368.
- [13] *Гайсин А. М.* Поведение суммы ряда Дирихле вблизи границы области регулярности. Дисс. канд. физ.-мат. наук. Уфа, 1982.
- [14] *Гайсина Г. А.* Об одном обобщении формулы Н. В. Говорова – Мак-Лейна – М. Н. Шереметы для вычисления порядка // Вестник Башкирского университета. 2016. Т. 21. № 3. С. 556–559.

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СУШКИ ЗЕРНА

Павленко В. А. (Уфа, БГАУ)

### Введение

В большинстве случаев зерно (зерновка) находится в равновесии на дне лотка в горизонтальном состоянии. Но в некоторых случаях переработки, сушки или транспортировки зерновки могут оказаться в наклонном положении, касаясь одновременно боковой стенки и дна транспортирующего лотка. Если силы трения достаточны по величине, то зерновка будет находиться в равновесном состоянии, в противном случае она из равновесия выйдет. Задача данной работы - установить условия равновесия зерновок пшеницы и ржи в наклонном положении.

Для решения поставленной задачи применялся расчетный аналитический метод исследования. Была разработана расчетная схема, составлялись и решались аналитические уравнения равновесия твердого тела под действием плоской системы сил, учитывались силы трения, действующие на зерновку со стороны дна и боковой стенки поддона. Контур зерновки описывали эллиптической кривой с полуосями  $a$  и  $b$ .

### § 1. Составление расчётной схемы

Зерновка весом  $\vec{G}$ , большая ось которой наклонена под углом  $\alpha$  к вертикали, касается дна и боковины лотка соответственно в точках  $P_1$  и  $P_2$ . Нормальные реакции на зерновку в этих точках  $\vec{N}_1$  и  $\vec{N}_2$ , силы трения  $F_{TP_1}$  и  $F_{TP_2}$  направлены против направлений возможного движения точек касания по поверхностям лотка. На схеме  $\vec{v}_1$  и  $\vec{v}_2$  — возможные скорости точек  $P_1$  и  $P_2$  зерновки при потере состояния равновесия;  $C_v$  — мгновенный центр скоростей при таком движении;  $\delta\vec{S}_1$ ,  $\delta\vec{S}_2$ ,  $\delta\vec{S}_C$  — возможные перемещения соответственно точек  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $C$  приложения сил.

Пусть  $xOy$  — декартовы оси координат, связанные с лотком;  $x'Oy'$  — наклонные оси, параллельные главным осям  $x''Cy''$  зерновки.

## § 1. Условия равновесия зерновки

От возможного скольжения по лотку зерновку удерживают силы трения. Но по мере увеличения наклона зерновки, начиная с определенного угла  $\alpha$ , состояние ее равновесия нарушится. При скольжении по дну и боковине лотка силы трения будут иметь максимально большие значения, определяемые законом Кулона:  $F_{TP_1} = \mu N_1$ ,  $F_{TP_2} = \mu_2 N_2$ , где  $\mu$  — коэффициент трения скольжения зерна по стальному листу.

Составим уравнения равновесия зерновки в ее предельном состоянии. Спроектируем силы на координатные оси  $Ox$  и  $Oy$  и получим:

$$\begin{cases} -F_{TP_1} + N_2 = 0 \\ F_{TP_2} - mg + N_1 = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Отсюда получаем:

$$N_1 = \frac{mg}{\mu^2 + 1}, \quad N_2 = \frac{\mu mg}{\mu^2 + 1}. \quad (2)$$

Составим для зерновки уравнение принципа возможных перемещений. При повороте зерновки вокруг оси  $C_V$  на малый угол  $\delta\alpha$  сумма элементарных работ активных сил системы на ее малом перемещении при равновесии будет равна:

$$mg \cdot \delta \cdot \delta\alpha - F_{TP_1} \cdot P_1 C_V \cdot \delta\alpha - F_{TP_2} \cdot P_2 C_V \cdot \delta\alpha \leq 0. \quad (3)$$

После подстановки выражений сил трения получим условие равновесия зерновки

$$\frac{\mu^2 \cdot C_V P_2}{\mu^2 + 1} + \frac{\mu \cdot C_V P_1}{\mu^2 + 1} - \delta > 0. \quad (4)$$

Для проведения расчетов по полученной зависимости (4) необходимо знать размеры  $C_V P_1$ ,  $C_V P_2$  и  $\delta$ . Для определения плеч были выполнены математические (геометрические) вычисления.

## § 2. Вычисление плеч действующих сил

Для краткости изложения некоторые промежуточные математические выкладки опущены. Выразим плечи  $C_V P_1$ ,  $C_V P_2$  и  $\delta$  через  $a$ ,  $b$  и  $\alpha$ . Уравнение кривой второго порядка имеет вид:

$$cx^2 + dy^2 + 2exy + 2mx + 2ny + r = 0. \quad (5)$$

С учетом того, что прямые  $x = 0$  и  $y = 0$  являются касательными в точках  $P_2(0, y_0)$  и  $P_1(x_0, 0)$  соответственно, выражаем коэффициенты уравнения (5) через  $x_0$  и  $y_0$ . Получаем:

$$c = y_0^2, \quad d = x_0^2, \quad m = -x_0 y_0^2, \quad n = -x_0^2 y_0, \quad r = x_0^2 y_0^2.$$

Выполним преобразование поворота координатных осей, перейдем от осей  $xOy$  к осям  $x'Oy'$ . После подстановок  $x = x' \cos \alpha - y' \sin \alpha$ ;  $y = y' \cos \alpha + x' \sin \alpha$  в уравнение (5) получим:

$$\begin{aligned} & x'^2(c \cos^2 \alpha + d \sin^2 \alpha + e \sin 2\alpha) + y'^2(d \cos^2 \alpha + c \sin^2 \alpha - e \sin 2\alpha) + \\ & + x'y'(d \sin 2\alpha - c \sin 2\alpha + 2e(\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha)) + 2x'(m \cos \alpha + n \sin \alpha) + \\ & + 2y'(n \cos \alpha - m \sin \alpha) + r = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Приведем уравнение (6) эллипса к каноническому виду. Для этого положим в (6) коэффициент при  $x'y'$  равным нулю и будем рассматривать только случай  $\alpha \neq \frac{\pi}{4}$ , соответствующий положению зерновки на рисунке 1. Убедимся, что для этого случая  $e = 0.5(x_0^2 - y_0^2) \tan 2\alpha$ .

С обозначениями

$$c_1 = c \cos^2 \alpha + d \sin^2 \alpha + e \sin 2\alpha, \quad d_1 = d \cos^2 \alpha + c \sin^2 \alpha - e \sin 2\alpha$$

$$c_2 = m \cos \alpha + n \sin \alpha, \quad d_2 = n \cos \alpha - m \sin \alpha$$

уравнение эллипса (6) приводится к виду:

$$c_1 \left( x' + \frac{c_2}{c_1} \right)^2 + d_1 \left( y' + \frac{d_2}{d_1} \right)^2 = \frac{c_2^2}{c_1} + \frac{d_2^2}{d_1} - r. \quad (7)$$

Выполним процедуру параллельного переноса осей, перейдем к системе осей координат  $x''C'y''$ . Для этого положим:

$$x'' = x' + \frac{c_2}{c_1}, \quad y'' = y' + \frac{d_2}{d_1}.$$

Таким образом, получаем следующее уравнение эллипса:

$$\frac{x''^2}{a^2} + \frac{y''^2}{b^2} = 1,$$

где

$$a^2 = \frac{s}{c_1}, \quad b^2 = \frac{s}{d_1}, \quad s = \frac{c_2^2}{c_1} + \frac{d_2^2}{d_1} - r.$$



Получается система уравнений:

$$\begin{cases} a^2 c_1 = b^2 d_1 \\ a^2 c_1^2 d_1 = c_2^2 d_1 + c_1 d_2^2 - c_1 d_1 r \end{cases} \quad (8)$$

Решение системы (8) имеет вид:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\sqrt{u_2^2 - 4u_1 u_3} - u_2}{2u_1}}, \quad y_0 = h \sqrt{\frac{\sqrt{u_2^2 - 4u_1 u_3} - u_2}{2u_1}},$$

где

$$h = \sqrt{\frac{b^2 \cos^2 \alpha - a^2 \sin^2 \alpha + 0.5(a^2 + b^2) \tan 2\alpha \sin 2\alpha}{a^2 \cos^2 \alpha - b^2 \sin^2 \alpha + 0.5(a^2 + b^2) \tan 2\alpha \sin 2\alpha}},$$

$$u_1 = b^2 h^2 (h \sin \alpha - \cos \alpha)^2 + a^2 h^2 (h \cos \alpha + \sin \alpha)^2,$$

$$u_2 = -a^4 (h^2 \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha + 0.5(h^2 - 1) \tan 2\alpha \sin 2\alpha)^2,$$

$$u_3 = -a^2 (h^2 \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha + 0.5(h^2 - 1) \tan 2\alpha \sin 2\alpha).$$

Координаты центра эллипса:

$$C \left( -\frac{c_2}{c_1} \cos \alpha + \frac{d_2}{d_1} \sin \alpha, -\frac{c_2}{c_1} \sin \alpha - \frac{d_2}{d_1} \cos \alpha \right)$$

Окончательно искомые плечи в уравнении равновесия (4) будут равны:

$$C_V P_1 = h \sqrt{\frac{\sqrt{u_2^2 - 4u_1 u_3} - u_2}{2u_1}}; \quad C_V P_2 = \sqrt{\frac{\sqrt{u_2^2 - 4u_1 u_3} - u_2}{2u_1}};$$

$$\delta = \sqrt{\frac{\sqrt{u_2^2 - 4u_1 u_3} - u_2}{2u_1}} + \frac{c_2}{c_1} \cos \alpha - \frac{d_2}{d_1} \sin \alpha$$

### § 3. Анализ полученных результатов

Неравенство (4) было решено с помощью пакета Mathcad. Данные для зёрен мы брали из источника [1]. Получено, что зерновки пшеницы и ржи выходят из состояния равновесия при наклоне 37...38 градусов.

### § 4. Дальнейшие перспективы

В дальнейшем планируется изучить изменение давления, температуры, влагосодержания с течением времени. Это описывается системой дифференциальных уравнений с частными производными, решение которых трудоёмко. Решать эти уравнения придётся либо с помощью численных алгоритмов, либо изучить асимптотику. Для некоторых случаев изменение выше приведённых параметров с течением времени описывается с помощью оператора Лапласа-Бельтрами. Асимптотика такого оператора уже изучена. См, например, [2]. Так что это является сложной, но интересной задачей.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Бадретдинов И. Д.* Совершенствование пневматической системы машин предварительной очистки зернового вороха. // И.Д. Бадретдинов: автореферат дис. канд. тех. наук. – Уфа, 2011 20с.
- [2] *Фазуллин З. Ю., Садовничий В. А., Атнагулов А. И.* Свойства резольвенты оператора Лапласа-Бельтрами на двумерной сфере и формула следов // Докл. АН, 20011, Т 441, №2, С. 174–176.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЗМУЩЕНИЙ ЗВУКОВОЙ ВОЛНЫ  
НА ИНВАРИАНТНОМ РЕШЕНИИ МОДЕЛИ РАНГА 2  
ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТИПА

Сираева Д. Т. (Уфа, УГАТУ)

**Введение**

Рассматриваются уравнения газовой динамики [1]:

$$\begin{aligned} \vec{u}_t + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + \rho^{-1} \nabla p &= 0, \\ \rho_t + (\vec{u} \cdot \nabla) \rho + \rho \operatorname{div} \vec{u} &= 0, \\ p_t + (\vec{u} \cdot \nabla) p + \rho f_\rho \operatorname{div} \vec{u} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\vec{u}(t, \vec{x})$  – вектор скорости частицы;  $\rho(t, \vec{x})$  – плотность,  $S(t, \vec{x})$  – энтропия,  $p(t, \vec{x})$  – давление связаны уравнением состояния  $p = f(\rho) + g(S)$ .

Уравнения (1) инвариантны при действии группы преобразований:

$$\begin{aligned} \vec{x}' &= \vec{x} + \vec{a} \quad (\text{переносы по пространству}), \\ t' &= t + a_0 \quad (\text{перенос по времени}), \\ \vec{x}' &= O\vec{x}, \vec{u}' = O\vec{u}, OO^T = 1, \det O = 1 \quad (\text{вращения}), \\ \vec{x}' &= \vec{x} + t\vec{b}, \vec{u}' = \vec{u} + \vec{b} \quad (\text{Галилеевы переносы}), \\ t' &= tc, \vec{x}' = c\vec{x} \quad (\text{равномерное растяжение}), \\ p' &= p + a_0 \quad (\text{перенос по } p), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\vec{x} = (x, y, z)$ ,  $\vec{x}' = (x', y', z')$ ,  $\vec{u} = (u, v, w)$ ,  $\vec{u}' = (u', v', w')$ ,  $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ ,  $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)$ ,  $a_0$  – постоянная. Группе преобразований (2) соответствует двенадцатимерная алгебра Ли  $L_{12}$  с базисом:

$$\begin{aligned} X_1 &= \partial_x, \quad X_2 = \partial_y, \quad X_3 = \partial_z, \\ X_4 &= t\partial_x + \partial_u, \quad X_5 = t\partial_y + \partial_v, \quad X_6 = t\partial_z + \partial_w, \\ X_7 &= y\partial_z - z\partial_y + v\partial_w - w\partial_v, \\ X_8 &= z\partial_x - x\partial_z + w\partial_u - u\partial_w, \\ X_9 &= x\partial_y - y\partial_x + u\partial_v - v\partial_u, \quad X_{10} = \partial_t, \\ X_{11} &= t\partial_t + x\partial_x + y\partial_y + z\partial_z, \quad Y_1 = \partial_p. \end{aligned} \quad (3)$$

Оптимальная система неподобных подалгебр алгебры Ли  $L_{12}$  построена в работе [2].

§ 1. Инвариантная подмодель ранга 2

Рассматривается двумерная подалгебра с номером 2.36 из оптимальной системы неподобных подалгебр [2]:

$$X_3 + X_4 = \partial_z + t\partial_x + \partial_u, \quad X_1 + Y_1 = \partial_x + \partial_p. \quad (4)$$

Инварианты подалгебры (4) имеют вид:

$$t, y, u - z, v, w, \rho, p - x + tz. \quad (5)$$

Инварианты (5), содержащие зависимые функции, назначаются новыми функциями  $u_1, v_1, w_1, \rho, p_1$  от инвариантов  $t, y$ . Представление инвариантного решения имеет вид:

$$u = v_1 + z, v = u_1, w = w_1, \rho, p = p_1 + x - tz. \quad (6)$$

Подстановка (6) в (1) дает инвариантную подмодель ранга 2:

$$\begin{aligned} Du_1 + \rho^{-1} p_{1y} &= 0, \quad Dv_1 = -w_1 - \rho^{-1}, \\ Dw_1 &= t\rho^{-1}, \quad D\rho + \rho u_{1y} = 0, \quad Dp_1 + \rho f_\rho u_{1y} = tw_1 - v_1, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $D = \partial_t + u_1\partial_y$ .

Вводится замена независимых переменных:  $t = t(\xi, \eta)$ ,  $y = y(\xi, \eta)$  таким образом, чтобы  $D = \partial_\xi$ , то есть  $\xi, \eta$  – лагранжевы переменные. В этом случае справедливы равенства:

$$D = \partial_\xi = t_\xi \partial_t + x_{1\xi} \partial_{x_1} \Rightarrow x_{1\xi} = u_1, t_\xi = 1 \Rightarrow t = \xi + \eta.$$

Якобиан обратной замены  $\xi = \xi(t, y)$ ,  $\eta = \eta(t, y)$  имеет вид  $I = x_{1\eta} - x_{1\xi} \neq 0$ . Справедливы равенства между производными:

$$\xi_y = -t_\eta I^{-1}, \xi_t = y_\eta I^{-1}, \eta_y = I^{-1}, \eta_t = -y_\xi I^{-1}.$$

Инвариантная подмодель (7) принимает вид:

$$\begin{aligned} y_{\xi\xi} + \frac{p_{1\eta} - p_{1\xi}}{\rho(y_\eta - y_\xi)} &= 0, \\ v_{1\xi} &= -w_1 - \rho^{-1}, \quad w_{1\xi} = (\xi + \eta)\rho^{-1}, \quad \rho_\xi + \rho(\ln(y_\eta - y_\xi))_\xi = 0, \\ p_{1\xi} + \rho f_\rho(\ln(y_\eta - y_\xi))_\xi &= (\xi + \eta)w_1 - v_1. \end{aligned} \quad (8)$$

Из четвертого уравнения системы (8) следует интеграл:

$$\rho(y_\eta - y_\xi) = R(\eta) > 0. \quad (9)$$

Три последних уравнения системы (8) дают интеграл:

$$p_1 = f(\rho) - w_1 - (\xi + \eta)v_1 + Q(\eta). \quad (10)$$

Система (8), учитывая интегралы (9), (10), принимает вид:

$$v_{1\xi} + w_1 + V = 0, w_{1\xi} = (\xi + \eta)V, \quad (11)$$

$$u_{1\xi} + RV_\xi = u_{1\eta}, -Ru_{1\xi} + g'V_\xi = g'V_\eta - w_{1\eta} - (\xi + \eta)(v_{1\eta} + w_1) + Q',$$

где  $V = \rho^{-1}$ ,  $f(\rho) = g(V)$ ,  $f'(\rho) = -g'_V V^2 > 0$ . Система (11) типа Коши при  $g' + R^2 \neq 0$ . Если функция  $g(V)$  линейная, то система (11) линейная с переменными коэффициентами и неоднородная, что облегчает ее исследование.

## § 2. Точное решение уравнений газовой динамики

Система (11) в случае:

$$g' + R^2 = 0, R = R(\eta) \Rightarrow V = V(\eta)$$

переопределена

$$\begin{aligned} u_{1\xi} &= u_{1\eta}, \quad v_{1\xi} = -w_1 - V, \quad w_{1\xi} = (\xi + \eta)V, \\ -Ru_{1\xi} &= -R^2V' - w_{1\eta} - (\xi + \eta)(v_{1\eta} + w_1) + Q'. \end{aligned} \quad (12)$$

Интегрированием по  $\xi$  последних трех уравнений в (12) определяются функции

$$\begin{aligned} v_1 &= -\frac{1}{6}\xi^3V - \frac{1}{2}\xi^2\eta V - \xi(V + W) + V_1(\eta), \\ w_1 &= \frac{1}{2}\xi^2V + \xi\eta V + W(\eta), \end{aligned} \quad (13)$$

$$u_1 = \frac{1}{5}A_4\xi^5 + \frac{1}{4}A_3\xi^4 + \frac{1}{3}A_2\xi^3 + \frac{1}{2}A_1\xi^2 + A_0\xi + U_1(\eta),$$

$$\text{где } A_4 = -\frac{1}{6}R^{-1}V', \quad A_3 = -\frac{2}{3}\eta V'R^{-1},$$

$$A_2 = \left(-\frac{1}{2}V' - W' + \eta V - \frac{1}{2}\eta^2V'\right)R^{-1}, \quad (14)$$

$$A_1 = ((1+\eta)^2V + V_1' + W - \eta W')R^{-1}, A_0 = (-Q' + W' + \eta V_1' + \eta W)R^{-1} + RV'.$$

Функции  $V, R, Q, W, V_1, U_1$  от одной переменной  $\eta$  подлежат дальнейшему определению. В силу первого уравнения системы (12) и выражения для  $u_1$  из (13) следуют равенства:

$$A_4 = A_{40}, A_3 = 4A_{40}\eta + A_{30}, A_2 = 6A_{40}\eta^2 + 3A_{30}\eta + A_{20},$$

$$A_1 = 4A_{40}\eta^3 + 3A_{30}\eta^2 + 2A_{20}\eta + A_{10},$$

$$A_0 = A_{40}\eta^4 + A_{30}\eta^3 + A_{20}\eta^2 + A_{10}\eta + A_{00},$$

$$U_1 = \frac{1}{5}A_{40}\eta^5 + \frac{1}{4}A_{30}\eta^4 + \frac{1}{3}A_{20}\eta^3 + \frac{1}{2}A_{10}\eta^2 + A_{00}\eta + U_{10},$$

где  $A_{i0}, U_{10}$  – постоянные,  $i = 0, 1, 2, 3, 4$ . Эти выражения для  $A_i$  сравниваются с выражениями из (14):

$$V' = -6RA_{40}, A_{30} = 0, RA_{20} = \frac{1}{2}V'(\eta^2 - 1) - W' + \eta V,$$

$$(1 + \eta^2)V + V_1' + W - \eta W' = (4A_{40}\eta^3 + 2A_{20}\eta + A_{10})R, \quad (15)$$

$$-Q' + W' + \eta V_1' + \eta W + R^2V' = (A_{40}\eta^4 + A_{20}\eta^2 + A_{10}\eta + A_{00})R.$$

Система (15) определяет функции  $V, W, R, Q, V_1$  в двух взаимоисключающих случаях  $A_{40} = 0$  и  $A_{40} \neq 0$ . Далее рассматривается случай  $A_{40} = 0$ , тогда  $V = V_0, R = R_0$ . Условие  $R = R(\eta)$  нарушено. Из уравнений (11) все равно следует представление решения (13), где

$$V = V_0, R = R_0, W = \frac{1}{2}\eta^2V_0 - \eta R_0A_{20} + W_0,$$

$$V_1 = -\frac{1}{6}V_0\eta^3 + R_0A_{20}\eta^2 + (R_0A_{10} - W_0 - V_0)\eta + V_{10},$$

$$Q = Q_0 + W_0 - R_0(A_{00} + A_{20})\eta.$$

Тогда из представления (6) определяется частное решение уравнений газовой динамики

$$u = z - t\left(\frac{1}{6}t^2 + 1\right)V_0 - tW_0 + V_{10} + \left(y - \frac{1}{12}A_{20}t^4 - \frac{1}{6}A_{10}t^3 -$$

$$-\frac{1}{2}A_{00}t^2 - U_{10}t - x_{10}\right)(tA_{20} + A_{10})V_0^{-1},$$

$$v = \frac{1}{3}A_{20}t^3 + \frac{1}{2}A_{10}t^2 + A_{00}t + U_{10},$$

$$w = \frac{1}{2}V_0t^2 + W_0 - V_0^{-1}A_{20}\left(y - \frac{1}{12}A_{20}t^4 - \frac{1}{6}A_{10}t^3 - \frac{1}{2}A_{00}t^2 -$$

$$-U_{10}t - x_{10}), \quad \rho = \frac{1}{V_0},$$

$$p = x - tz + g(V_0) + \frac{1}{2}t^2\left(\frac{1}{3}t^2 + 1\right)V_0 + W_0t^2 - V_{10}t + Q_0 - V_0^{-1}.$$

$$\cdot (A_{20}t^2 + A_{10}t + A_{00})(y - \frac{1}{12}A_{20}t^4 - \frac{1}{6}A_{10}t^3 - \frac{1}{2}A_{00}t^2 - U_{10}t - x_{10}).$$

Уравнения газовой динамики инвариантны при действии группы преобразований (2). Если рассматривать решение с точностью до этих преобразований, то можно считать  $W_0 = V_{10} = U_{10} = x_{10} = g(V_0) = Q_0 = 0$  и остается 4 существенные постоянные  $V_0, A_{00}, A_{10}, A_{20}$ .

Простейшее решение при  $A_{40} = A_{20} = A_{10} = 0$  имеет вид:

$$u = z - t\left(\frac{1}{6}t^2 + 1\right)V_0, \quad v = A_{00}t, \quad w = \frac{1}{2}V_0t^2, \quad (16)$$

$$\rho = \frac{1}{V_0}, \quad p = x - tz + \frac{1}{2}t^2\left(\frac{1}{3}t^2 + 1\right)V_0 - A_{00}V_0^{-1}(y - \frac{1}{2}A_{00}t^2).$$

Далее исследуется движение частиц решения (16).

### § 3. Распространение возмущений звуковой волны

Движение частиц определяется из равенств  $\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}$ ,  $\vec{x}(0) = \vec{x}_0$ . Для решения (16) уравнений (1) движение частиц задается формулами:

$$x = -\frac{1}{2}V_0t^2 + z_0t + x_0, \quad y = \frac{1}{2}A_{00}t^2 + y_0, \quad (17)$$

$$z = \frac{1}{6}V_0t^3 + z_0, \quad V_0 > 0.$$

Звуковая поверхность задается уравнением:

$$u^2 + v^2 + w^2 = a^2, \quad (18)$$

где  $a = \sqrt{f_\rho}$  – скорость звука. Для решения (16)  $a^2 = f' = -g'_V V^2 = R_0^2 V_0^2 = I^2 = 1$ . Тогда звуковая поверхность из (18) задается равенством:

$$\left(z - \left(\frac{1}{6}t^3 + t\right)V_0\right)^2 + A_{00}^2 t^2 + \frac{1}{4}V_0^2 t^4 = 1.$$

Замена  $\bar{z} = \frac{z}{V_0}$  в последнем равенстве приводит к формуле:

$$\left(\bar{z} - \left(\frac{1}{6}t^3 + t\right)\right)^2 = -\frac{1}{4}t^4 - \frac{A_{00}^2}{V_0^2}t^2 + V_0^{-1}. \quad (19)$$

Формула (19) задает две параллельные плоскости, между которыми находится дозвуковая область, на самих плоскостях частицы двигаются со скоростью звука, в остальных точках пространства движение сверхзвуковое. При  $t^2 = \sqrt{\frac{4}{V_0^2} + 4\left(\frac{A_{00}}{V_0}\right)^4} - 2\left(\frac{A_{00}}{V_0}\right)^2 = t_*^2$  две плоскости схлопываются в одну, то есть дозвуковая область исчезает. При  $t > t_*$  все частицы двигаются со сверхзвуковыми скоростями.

Для отыскания звуковых характеристик уравнений (1) вида  $h(t, \vec{x}) = const$  следует решить задачу Коши [3]:

$$h_t + uh_x + vh_y + wh_z = \pm \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2}, \quad (20)$$

$$h(0, \vec{x}) = h_0(\vec{x}).$$

Характеристики уравнений (20) называются бихарактеристиками исходных уравнений газовой динамики (1). Уравнения бихарактеристик имеют вид:

$$d\vec{x}/dt = \vec{u} + c\nabla h/|\nabla h|,$$

$$dh_j/dt = -\vec{u}_j \cdot \nabla h \pm c_j |\nabla h| \quad (j = x, y, z), \quad (21)$$

где символами с нижним индексом  $j$  обозначены частные производные по указанным аргументам.

Особый вид характеристической поверхности получается, если образовать геометрическое место всех бихарактеристик, выходящих из данной точки  $P(\vec{x}_0, 0)$ . Чтобы представить совокупность всех таких бихарактеристик, необходимо учесть начальные данные к системе (21):

$$\vec{x}(0) = \vec{x}_0, \quad h_j(0) = h_{j0} \quad (j = x, y, z), \quad (22)$$

где  $(h_{x_0}, h_{y_0}, h_{z_0})$  – единичный вектор. Звуковой коноид на решении (16) определяется решением задачи (21), (22)

$$x = x_0 - \frac{1}{2}V_0t^2 + z_0t + (\pm t \mp \frac{1}{2}s)\sqrt{1+r^2+s^2} \pm \frac{1}{2}(s-t)\sqrt{1+r^2+(s-t)^2} \pm$$

$$\pm \frac{1}{2}(1-r^2) \ln \left| \frac{t-s + \sqrt{1+r^2+(s-t)^2}}{\sqrt{1+r^2+s^2}-s} \right|, \quad (23)$$

$$y = \frac{1}{2}A_{00}t^2 \pm r \ln \frac{t-s + \sqrt{1+r^2+(s-t)^2}}{\sqrt{1+r^2+s^2}-s} + y_0,$$

$$z = \frac{1}{6}V_0t^3 \mp \sqrt{1+r^2+(s-t)^2} \pm \sqrt{1+r^2+s^2} + z_0,$$

где  $r = \frac{h_{y_0}}{h_{x_0}}$ ,  $s = \frac{h_{z_0}}{h_{x_0}}$  – параметры двумерной поверхности. Для построения поверхности (23) вводятся сферические координаты:  $h_{x_0} = \cos \theta$ ,  $h_{y_0} = \sin \theta \cos \varphi$ ,  $h_{z_0} = \sin \theta \sin \varphi$ ,  $0 < \theta < \pi$ ,  $0 < \varphi < 2\pi$ . Результаты построений приведены на Рис.1-6, где  $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, \pm 0.5)$ .

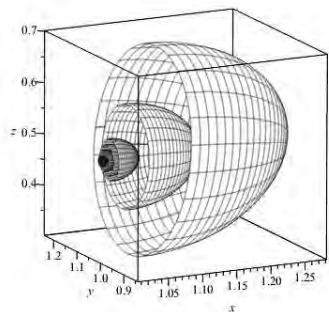


Рис. 1. Звуковые коноиды в разрезе при  $A_{00} = 2$ ,  $V_0 = 1$ ,  $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, 0.5)$ ,  $t = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.1, 0.2$

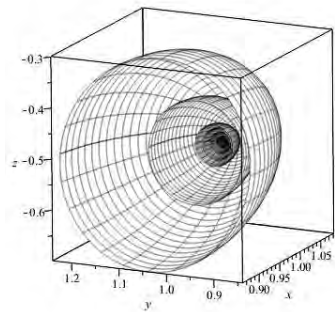


Рис. 2. Звуковой коноиды в разрезе при  $A_{00} = 2$ ,  $V_0 = 1$ ,  $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, -0.5)$ ,  $t = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.1, 0.2$

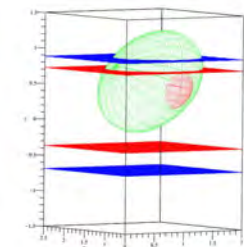


Рис. 3. Звуковые коноиды при  $A_{00} = 2$ ,  $V_0 = 1$ ,  $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, 0.5)$ ,  $t = 0.3, 0.41, 0.7$

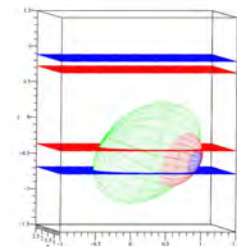


Рис. 4. Звуковые коноиды при  $A_{00} = 2$ ,  $V_0 = 1$ ,  $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, -0.5)$ ,  $t = 0.3, 0.41, 0.7$

При  $t = 0$  звуковые плоскости находятся в точке  $(x_0, y_0, \pm \frac{1}{V_0})$ , коноид является точкой с координатами  $(x_0, y_0, z_0)$ . При возрастании времени звуковые плоскости движутся навстречу друг к другу. Звуковые коноиды для разных моментов времени представляют собой вложенные друг в друга эллипсоиды в области дозвукового движения (Рис. 1, 2). С течением времени эллипсоиды пересекаются в области сверхзвукового движения (Рис. 3,4,5). Для параметров  $A_{00} = 2$ ,  $V_0 = 1$  при

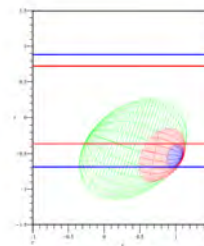


Рис. 5. Звуковые коноиды при  $A_{00} = 2$ ,  $V_0 = 1$ ,  $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, -0.5)$ ,  $t = 0.3, 0.41, 0.7$ , проекция на плоскость XOZ

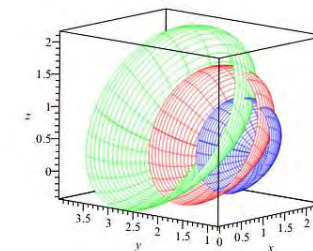


Рис. 6. Звуковые коноиды в разрезе при  $A_{00} = 2$ ,  $V_0 = 1$ ,  $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, 0.5)$ ,  $t = 0.7, 1, 1.3$

$t = t_* = 0.4961967876$  дозвуковая область исчезает. При  $t < t_*$  движение частиц дозвуковое между звуковыми плоскостями. При  $t > t_*$  движение только сверхзвуковое, звуковой коноид как трехмерная гиперповерхность в  $R^4$  есть огибающая непересекающихся эллипсоидов в  $R^3(t)$ . Проекция эллипсоидов в  $R^3$  пересекаются (Рис. 6).

### Заключение

Для уравнений газовой динамики с уравнением состояния в виде суммы функций плотности и энтропии построена инвариантная подмодель ранга 2. Найдено частное решение уравнений газовой динамики с местной дозвуковой зоной, которая исчезает со временем. На полученном решении построен звуковой коноид, задающий распространение слабого разрыва.

Работа поддержана грантом РФФИ 14-01-97027 р\_поволжье\_a.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Овсянников Л. В. Программа ПОДМОДЕЛИ. Газовая динамика. // Прикладная математика и механика. М.: РАН, 1994. Т. 58, Вып. 4. С. 30–55.
- [2] Сираева Д. Т. Оптимальная система неподобных подалгебр суммы двух идеалов. // Уфимский математический журнал. 2014. Т. 6, № 1. С. 94–107.
- [3] Овсянников Л. В. Лекции по основам газовой динамики. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. 336 с.

## ФИЗИКА

### **95 ЛЕТ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ М.М. ФАРЗТДИНОВА – ОСНОВАТЕЛЯ ШКОЛЫ ФИЗИКОВ - ТЕОРЕТИКОВ В БАШГУ (1921-1991)**

Сабитов Р.М., *к.ф.-м., проф.*

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Исполнилось 95 лет со дня рождения Миркашира Минигалиевича Фарзтдинова, доктора физико-математических наук, профессора с 1968 по 1990 годы бессменно руководившего кафедрой теоретической физики (до 1973 года – кафедрой теоретической и экспериментальной физики) университета. Удивительное сочетание научной строгости, требовательности с исключительной мягкостью и доброжелательностью создало ту творческую атмосферу, существовавшую на кафедре теоретической физики БашГУ, которую сформировал и возглавил М.М. Фарзтдинов и в стенах которой провел значительную часть своей жизни. Всю свою жизнь М.М. Фарзтдинов посвятил развитию науки и образования в Республике Башкортостан. Он являлся основателем научной школы физиков-теоретиков, магнитологов в Башкортостане и одним из ведущих специалистов в СССР в области физики магнитных явлений. Полученные им и под его руководством научные результаты явились значительным вкладом в физику магнитных явлений и оказали заметное влияние на развитие современных представлений в этой области физики. Они признаны как в нашей стране, так и за ее пределами.

Миркашир Минигалиевич родился 5 сентября 1921 года в деревне Ново - Нагаево Бирского уезда Уфимской губернии, ныне Краснокамского района Башкортостана, в семье крестьянина-середняка. После окончания Ново - Нагаевской начальной школы он заканчивает семь классов в Ново - Актанышбаевской неполной средней школе. Однако, смерть отца в 1934 г. и болезнь его самого не позволили продолжить образование в обычной школе. В 1940 г. он экстерном заканчивает Ново - Кабановскую среднюю школу. В 1939 – 1942 гг. Миркашир Минигалиевич работает учителем начальных классов в своей деревне. В 1942 г. по состоянию здоровья пришлось оставить педагогическую деятельность. В 1942 – 1946 гг. он работает старшим бухгалтером Краснокамского заготпункта госсортфонда. В 1946 г. он снова возвращается в школу уже учителем физики и математики в старших классах Ново - Кабановской средней школы, где работает до 1948 г. Желание получить высшее образование никогда его не оставляет. Но осуществить мечты сначала мешает война, а затем смерть матери в 1945 году. В 1946 г. он поступает на заочное отделение физико-



математического факультета Пермского университета, а 1948 г. переводится на 2 курс очного отделения университета. В 1951 году он окончил университет с отличием по специальности «Математика» и был оставлен в аспирантуре кафедры теоретической физики Пермского госуниверситета. Его научным руководителем стал известный ученый, зав. кафедрой теоретической физики Иван Григорьевич Шапошников, являющийся одним из создателей теории парамагнитного резонанса.

В аспирантуре М.М. Фарзтдинов занимается исследованием проблем в области теории теплопроводности и гидродинамики. В 1954 году он успешно защищает диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «Математическая и

теоретическая физика» на тему «Стационарная тепловая конвекция в трубах переменного сечения».

После окончания аспирантуры М.М. Фарздинов был направлен на работу в Стерлитамакский педагогический институт. С 1954 по 1966 годы работал доцентом, заведующим кафедрой физики. Это были годы организации и становления пединститута. Миркаширу Миннигалиевичу было поручено организовать и возглавить вновь создаваемую кафедру физики. Он много сил и времени отдал налаживанию учебного процесса, читал лекции по всем разделам общей и теоретической физики.

Находясь далеко от научных центров, М.М. Фарздинов продолжает заниматься научной работой и, конечно, нуждается в контактах с крупными научными центрами. Профессор Н.Г. Шапошников представляет его академику С.В. Вонсовскому, главе уральской научной школы физиков. С 1961 г. М.М. Фарздинов в докторантуре Института физики металлов АН СССР (г. Свердловск) интенсивно начинает заниматься физикой магнитных явлений в сотрудничестве с Е.А. Туровым (в дальнейшем член-кор АН РФ), с одним из талантливых учеников С.В. Вонсовского. В период с 1961 по 1966 годы он интенсивно занимается решением проблемы магнитной доменной структуры антиферромагнетиков. Его работы публикуются в центральных физических журналах. В 1964 году в журнале «Успехи физических наук» АН СССР он публикует статью «Структура антиферромагнетиков», которая становится широко известной в научных кругах, работающих в области физики магнитных явлений. В этой работе проводится систематизация магнитной структуры антиферромагнетиков. Исследуется связь доменной структуры антиферромагнетиков с её магнитной структурой, приводится обзор экспериментальных исследований. В этой же работе он предсказывает возможность существования различных типов доменных границ в новых классах антиферромагнетиков – в редкоземельных ортоферритах. Экспериментально они были открыты в Институте кристаллографии АН СССР методом ядерного магнитного резонанса спустя двадцать с лишним лет.

Одним из существенных достижений Миркашира Миннигалиевича в этот период является определение условий существования доменных границ в антиферромагнетиках. Он теоретически показывает выгоду разбиения антиферромагнетиков на домены, т.е. области с разными направлениями спинов подрешеток, определяет температурный интервал существования термодинамически выгодной доменной структуры в антиферромагнетиках. Впоследствии такие домены были названы тепловыми. Позже экспериментально были подтверждены существование тепловых доменов в предсказанной теорией области температур.

Разрабатывается феноменологическая теория спиновых волн и ЯМР в антиферромагнетиках с периодической доменной структурой.

С сентября 1966 г. М.М. Фарздинов начинает работать доцентом кафедры теоретической и экспериментальной физики (ТЭФ) Башгосунiversитета, пройдя по конкурсу на эту должность.

Коротко отметим положение дел с теоретической физикой в Башгосунiversитете к моменту начала работы М.М. Фарздинова на кафедре ТЭФ.

Башкирский государственный университет был организован на базе Башкирского государственного педагогического института в 1957 г. Непосредственно в период перед организацией университета физика в пединституте была представлена отделением физики на физико-математическом факультете, которое состояло из одной кафедры – кафедры общей и теоретической физики. Ученую степень и звание имел один преподаватель – кандидат пед.наук, доцент Г.Т. Валиев (1942-1953 гг. работал директором Башгоспединститута).

Кафедра теоретической физики (ТФ) была создана в октябре 1957 г. в связи с организацией университета. Возглавил кафедру выпускник 1947 г. Казахского госуниверситета (г. Алма-Ата) к.ф.-м.н., доцент М.А. Баженов. Вновь созданная кафедра ТФ должна была обеспечить чтение курсов теоретической физики и астрономии. Однако, становление теоретической физики, которое включает и подготовку специалистов, и развитие фундаментальных исследований в этой области происходило нелегко. В первую очередь этому мешало отсутствие кадров, да и внутренняя логика развития университета ещё не была готова к этому. Усилия М.А. Баженова по открытию специализации по теоретической физике, привлечению специалистов по теоретической физике на кафедру тогда не увенчались успехом. В 1961 г. он ушел из университета.

В 1960 г. кафедра ТФ была преобразована в кафедру теоретической и экспериментальной физики (ТЭФ) и в таком качестве существовала до 1973 г. Заведующим кафедрой ТЭФ стал к.ф.-м.н., доцент О.А. Барсуков. Он был экспериментатором, работал в университете с момента его организации, с 1957 г. на кафедре общей физики и был одним из первых выпускников (1949 г.) Московского инженерно-физического института. После его отъезда в 1964 г. исполнять обязанности зав. кафедрой стал кандидат геолого-минералогических наук И.Л. Дворкин, выпускник 1952 г. физико-механического факультета Ленинградского политехнического института.

Дальнейший этап развития и становления теоретической физики связан с именем к.ф.-м.н., доцента А.И. Резанова. А.И. Резанов, выпускник 1941 г. Уральского госуниверситета (УрГУ, г. Свердловск), работал на кафедре ТЭФ с октября 1961 г. по май 1968 г. До этого А.И.

Резанов работал доцентом кафедры ТФ УрГУ, представитель уральской школы физиков-теоретиков, он хорошо понимал, что для становления теоретической физики необходимо начать подготовку специалистов на кафедре.

А.И. Резановым на кафедре ТЭФ впервые была организована специализация студентов по теоретической физике. С 1964 г. по 1966 г. по индивидуальному плану были выпущены 5 выпускников. Начиная с 1967 г. по специализации «теоретическая физика» уже выпускалась группа порядка 8–10 человек ежегодно. Научно-исследовательская работа по теоретической физике на кафедре ТЭФ была начата в 1961 г. А.И. Резановым и под его руководством.

Как было сказано выше, М.М. Фарзтдинов начинает работать на кафедре ТЭФ с сентября 1966 года. Он сразу же включается в учебный процесс, в преподавание курсов теоретической физики и спецкурсов по специализации кафедры. Из общих курсов теоретической физики, прежде всего надо сказать о курсе лекции по «Квантовой механике», который читал Миркашир Минигалиевич на факультете и среди студентов этот предмет ассоциировался с его именем. Лекции его отличались глубиной, ясностью и привлекали настоящий интерес слушателей.

С 1968 г. М.М. Фарзтдинов становится заведующим кафедрой ТЭФ и руководителем специализации по теоретической физике. В 1972 году усилиями руководства университета, в первую очередь ректора Ш.Х. Чанбарисова, был построен физико-математический корпус, и физико-математический факультет был разделен на два самостоятельных факультета – математический и физический. А в 1973 г. на физическом факультете кафедра ТЭФ была преобразована вновь в кафедру теоретической физики, которую М.М. Фарзтдинов возглавил уже по 1990 г, до конца своей жизни. Под его руководством на кафедре организуется теоретические исследования магнитных свойств твердых тел, начатые им ранее в сотрудничестве с проф. Е.А. Туровым из института физики металлов АН СССР. В дальнейшем это направление исследований становится одним из основных на кафедре, и М.М. Фарзтдинов создает школу теоретиков, работающих в области физики магнитных явлений. Миркашир Минигалиевич много сил и времени отдавал педагогической деятельности, уделял большое внимание подготовке молодой смены. Студенты кафедры теоретической физики привлекались к научно - исследовательской работе и они регулярно участвовали на Всесоюзных конференциях «Студент и научно - технический прогресс», проводимых в г. Новосибирске, в других городах. Они занимали призовые места. М.М. Фарзтдиновым написано около 20 учебных и научно – методических пособий по курсам теоретической физики.

Студенты тянулись к нему, к науке. Он организовал семинары, на которых выступали студент, заранее получавшие темы докладов. По этим выступлениям он отбирал будущих своих учеников.

В 1966 году на кафедре открывается аспирантура для подготовки специалистов в области теоретической физики. В дальнейшем подготовка кадров проводилась в аспирантуре кафедры и через целевую аспирантуру в других ВУЗ-ах, прежде всего в аспирантуре МГУ. М.М. Фарзтдинов подготовил 10 кандидатов физико-математических наук.

Теоретические исследования на кафедре под руководством М.М. Фарзтдинова продолжались. В его работах, а также в соавторстве с аспирантами и учениками разрабатывается теория доменных структур в ферро- и антиферромагнетиках. Значительным успехом является создание последовательной теории спиновых волн в ферромагнетиках с периодической доменной структурой, установление существования двух типов спиновых волн, отличающихся законом дисперсии и энергетической щелью. Построена спин - волновая теория начальной восприимчивости ферромагнетиков с периодической доменной структурой. Изучены новые типы доменных границ в редкоземельных ортоферритах. Развита микроскопическая теория периодической двойниковой доменной структуры в антиферромагнетиках. Рассчитывалась доменная структура пленок с перпендикулярной и наклонной анизотропией. Исследован спектр спиновых волн в антиферромагнетиках с периодической доменной структурой. Изучались статистические и динамические свойства цилиндрических магнитных доменов. Исследовано влияние доменной структуры на характеристики антиферромагнитного и ядерного магнитного резонанса в антиферромагнетиках. Разработана теория динамики доменных границ с тонкой структурой, исследовано влияние магнитострикции и комбинированной анизотропии на динамические и статистические свойства магнетиков, изучалось влияние света на доменную структуру магнитных полупроводников. Развита теория динамики одномерных и двумерных ДГ в магнитном поле, учитывающее наличие динамической неколлинеарности магнитных подрешеток в редкоземельных ортоферритах и т.д.

Фарзтдинов М.М. участвовал в работе Международных и многих Всесоюзных научных конференций, симпозиумов по физике магнитных явлений, физике низких температур, магнитному резонансу и т.д. В 1974 году он совместно с ОФМ УНЦ АН СССР организовал и провел в Уфе Всесоюзную зимнюю школу по теоретической физике. На конференции он брал своих учеников, давал им возможность выступать с докладами. Все это позволило ему образовать коллектив специалистов, занимающихся



передовые позиции по изучению проблемы влияния магнитных неоднородностей на физические свойства ферро - антиферромагнетиков.

М.М. Фарзтдинов опубликовал более 126 научных работ. Среди них две монографии: «Физика магнитных доменов в антиферромагнетиках и ферритах», «Теория спиновых волн в ферро- и антиферромагнетиках с доменной структурой», выпущенные издательством «Наука».

Основные научные результаты М.М. Фарзтдинова, полученные к 1971 г. нашли отражение в его докторской диссертации «Вопросы теории ферромагнетиков и антиферромагнетиков с доменной структурой», защищенной в Институте физики металлов АН СССР (г. Свердловск) в 1972 году.

М.М. Фарзтдинов был сторонником объединения усилий Башкирского филиала АН СССР и Башгосуниверситета для проведения фундаментальных исследований, особенно экспериментальных и подготовки кадров. После защиты докторской диссертации он сделал большие усилия в этом направлении. В 1975 году при поддержке ректора университета Ш.Х. Чанбарисова и председателя президиума БФ АН СССР С.Р. Рафикова под руководством М.М. Фарзтдинова была создана совместная с БФ АН СССР и БашГУ лаборатория антиферромагнетиков и ферритов, которая ведет экспериментальные исследования магнитных, электрических и оптических свойств новых перспективных магнитных материалов. Он руководил этой лабораторией до конца своей жизни. Лаборатория становится базой, где проходят практику и специализацию студенты и сотрудники физического факультета.

Широк был и круг его общественных обязанностей. Он руководил методологическим семинаром преподавателей факультета, был членом парткома университета, президиума правления республиканского общества «Знание», президиума Башкирского филиала АН СССР, «Секции физики магнитных пленок» АН СССР», членом Совета по защите диссертации Уфимского авиационного института.

Всю свою жизнь Миркашир Минигалиевич посвятил развитию науки и образования в республике Башкортостан. Он был награжден шестью медалями, в 1979 году ему присвоено звание «Заслуженный деятель науки БАССР».

Он был добрым тактичным человеком, демократичным руководителем. У него была дружная семья. Вместе с женой вырастили четырех детей. Дочь и двое сыновей тоже пошли по стопам отца – стали физиками.

Миркашир Минигалиевич умер 28 сентября 1991 года после непродолжительной болезни. Дело, начатое им, успешно продолжали и продолжают его ученики. С 1993 до 2011 г., до своей кончины, кафедрой заведовал д.ф.-м.н., профессор М.А. Шамсутдинов. С 2011 года кафедрой

заведует д.ф.-м.н., профессор Р.М. Вахитов. На кафедре поддерживаются традиции и творческий дух, которые были созданы М.М. Фарзтдиновым. По неполным данным к настоящему времени выпускники кафедры теоретической физики защитили 32 докторских и более 110 кандидатских диссертаций в различных областях науки: физики, математики, химии, техники, философии и т.д. число защитивших ученых степеней составляет более 34% всех выпускников кафедры. Они успешно работают на других кафедрах физико – технического института и университета, на кафедрах ВУЗов республики и РФ, в институтах АН России и Башкортостана, в отраслевых научно- исследовательских институтах, в системе народного образования, в различных отраслях производства, в управленческих структурах РБ разного уровня. Многие из них являются и являлись руководителями кафедр, лабораторий, НИИ, ВУЗов и т.д.

95-летие со дня рождения Миркашира Минигалиевича кафедра встречает как научно-педагогический коллектив, внося свой посильный вклад в дело начатое М.М. Фарзтдиновым.

#### Литература

1. М.А. Шамсутдинов. Миркашир Минигалиевич Фарзтдинов (1921-1991). Уфа. 1997. 24с.
2. Р.М. Сабитов. Вестник Башкирского университета №3 (I, II) , 1997. с. 27-32.
3. Р.М. Сабитов, М.А. Шамсутдинов. Структурные и динамические эффекты в упорядоченных средах. Межвузовский сборник научных трудов. Уфа. 2002, с. 5-18.
4. М.А. Шамсутдинов, Р.М. Сабитов. Вестник Башкирского университета №3 (I) , 1996, с. 3-4.
5. Р.М. Сабитов. Физика в Башкортостане. Уфа, 1996, с. 41-48.
6. Р.М. Сабитов, М.А. Шамсутдинов. Структурные и динамические эффекты в упорядоченных средах. Межвузовский сборник научных трудов. Уфа. 2011, с. 4-11.

© Сабитов Р.М., 2016 г.

## ВЛИЯНИЕ МИНЕРАЛЬНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ НА ТЕРМОСТОЙКОСТЬ ПОЛИСУЛЬФОНА

Абдрахманов Н.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одним из условий применимости полимерных материалов в производстве диэлектрических, резистивных и проводящих паст является их термическая устойчивость в процессе получения и эксплуатации. Поэтому для выбора материала необходимо знать его параметры термостабильности.

Термостойкость характеризуется как температура, при которой начинается термическая или термоокислительная деструкция полимера, что сопровождается выделением летучих продуктов. Вследствие этого имеет место потеря в весе исследуемого полимера, что лежит в основе различных видов термогравиметрического анализа (ТГА). Температура, при которой наблюдается уменьшение веса полимера, характеризует его термостойкость.

Термостойкость ПЭС зависит от содержания низкомолекулярных примесей.

С целью выяснения характера влияния этих примесей на термостабильность ПЭС были получены дериватограммы композиционных материалов на основе ПЭС и различных минеральных наполнителей – С, Sn, Ni, Al, Ag, Cu (рис. 1); а также оксидов SiO<sub>2</sub>, SnO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Cu<sub>2</sub>O (рис. 2).

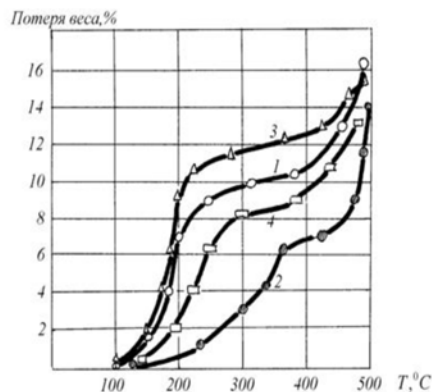


Рис. 1. Зависимость потери веса композиции металл/ПЭС от температуры:  
1 – Al, 2 – Ag, 3 – Ni, 4 – Sn

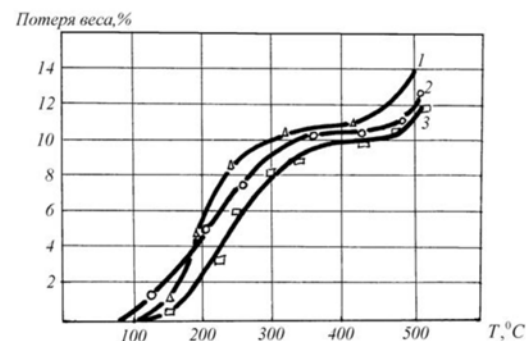


Рис. 2. Зависимость потери веса композиции оксид/ПЭС от температуры:  
1 – SnO<sub>2</sub>, 2 – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 3 – SiO<sub>2</sub>

Из анализа полученных данных следует, что термостабильность полимера понижается при наполнении его Sn, Cu. Влияния на термостабильность С, Ni, Al, SiO<sub>2</sub>, SnO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> не отмечено. Можно сделать вывод, что металлы с переменной валентностью усиливают термодеструкцию полимера. Аналогичное влияние оказывают окислы, в которых металл проявляет минимальную степень окисления (Cu<sub>2</sub>O, SnO), которые при нагревании переходят в высшие окислы.

ПЭС характеризуются высокой термостойкостью. Температура, при которой начинается заметная деструкция матрицы, составляет для ПЭС – 430°C [1]. На термостабильность ПЭС большое влияние оказывают низкомолекулярные примеси. Металлы с переменной валентностью усиливают термодеструкцию полимера. Аналогичное влияние оказывают окислы, в которых металл проявляет минимальную степень окисления (Cu<sub>2</sub>O, SnO), которые при нагревании переходят в высшие окислы. Температуры стеклования для полиэфирсульфона равна 230°C [1].

### Литература

1. Дашевская и др. Высокомолекулярные соединения. Высокотемпературное окисление полисульфона. Б, 1974, т.16 с353-356.

© Абдрахманов Н.И., 2016 г.

### МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИСУЛЬФОНА

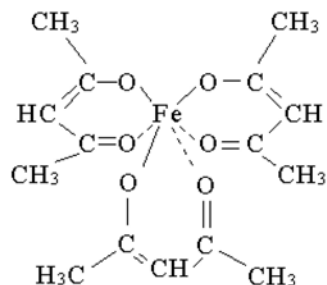
Абдрахманов Н.И., Тавлыкаев Р.Ф., Салихов Р.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Один из возможных способов модификации электронной структуры полисульфона – введение в матрицу полимера обменных кластеров переходных металлов, что сопровождается увеличением межмолекулярного взаимодействия в системе. Возникающее при этом дополнительное перекрытие волновых функций электронных состояний приводит к возникновению узкозонного энергетического электронного спектра в системе ароматических ядер [1].

В данной работе изложены результаты изучения влияния комплексов переходных металлов, содержащих ионы железа, на электронную структуру полисульфона и на свойства синтезируемых систем.

Изменение электронной структуры ПЭС производилось введением в полимерную матрицу ацетилацетоната железа  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3$  ( $\text{Fe}(\text{acac})_3$ ) с последующим термическим воздействием на эту композицию. В  $\text{Fe}(\text{acac})_3$  ион металла двукратно связан с каждым остатком ацетилацетона:



Хорошая растворимость этого соединения в ацетофеноне обеспечивает введение его в полимерную матрицу на молекулярном уровне.  $\text{Fe}(\text{acac})_3$  – антиферромагнетик с удельной восприимчивостью  $3,9 \cdot 10^{-4} \frac{\text{см}^3}{\text{г}}$ .

Термический распад  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3$  изучен методом дифференциального термического анализа в интервале  $20^\circ\text{C} - 500^\circ\text{C}$  в открытом и закрытом тиглях [2] и изучения зависимости намагниченности  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3$  и продуктов его разложения от напряжённости магнитного поля.

Процесс распада  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3$  носит эндотермический характер. Температура начала разложения  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3$  зависит от концентрации кислорода и составляет  $220^\circ\text{C}$  в закрытом тигле и  $152^\circ\text{C}$  в открытом.

Полученные данные позволяют констатировать, что продукты термического разложения  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3$  содержат смесь  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  и  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ .

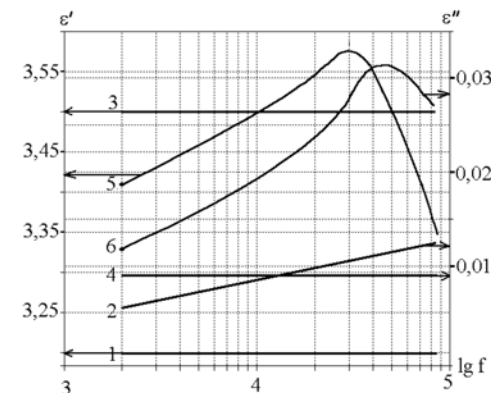


Рис. 1. Зависимость вещественной  $\epsilon'$  и мнимой  $\epsilon''$  частей комплексной диэлектрической проницаемости от частоты переменного электрического поля  $f$  (Гц): 1,2 – чистого ПЭС; 3,4 – композиции ПЭС+5 мас.%  $\text{Fe}(\text{acac})_3$  до термообработки; 5,6 – композиции ПЭС+5 мас.%  $\text{Fe}(\text{acac})_3$  после термообработки при  $t = 250^\circ\text{C}$

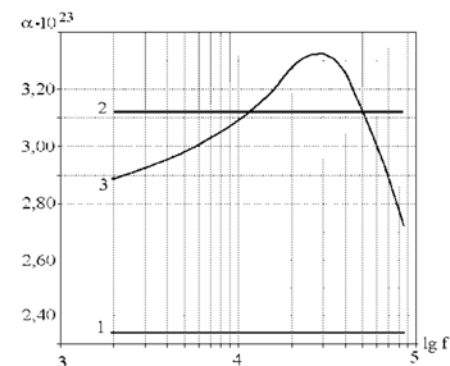


Рис. 2. Зависимость поляризуемости  $\alpha$  ( $\text{см}^3$ ) от частоты переменного электрического поля  $f$  (Гц): 1 – чистого ПЭС; 2 – композиции ПЭС+5 мас.%  $\text{Fe}(\text{acac})_3$  до термообработки; 3 – композиции ПЭС+5 мас.%  $\text{Fe}(\text{acac})_3$  после термообработки при  $t = 250^\circ\text{C}$

Наблюдаются глубокие изменения дисперсионных параметров (рис. 1) и поляризуемости (рис. 2) материала, оценка которых произведена в соответствии с [3]. Из этих данных следует, что произведение  $a \cdot N_{ар.яд.}^{1/3} = 0,4$  ( $a$  – боровский радиус локализованного состояния,  $N_{ар.яд.}$  – концентрация ароматических ядер), характеризует перекрытие волновых функций локализованных состояний электронов в системе ароматических ядер, соответствует значительному перекрытию этих волновых функций, и, как следствие, делокализации носителей по системе.

Следовательно, возникающее между комплексами и многоядерной ароматической системой полимерной матрицы обменное взаимодействие приводит к перераспределению электронной плотности и формированию узкозонного энергетического электронного спектра в системе.

### Литература

1. Ягодкин В.М., Васильев А.В., Абдрахманов Н.И. Электропроводящие гетерогенные системы на основе ароматических полисульфонов / Всесоюзная конференция «Фундаментальные проблемы современной науки о полимерах»: Тезисы докладов. – Ленинград. – 1990. – С.25.
2. Ягодкин В.М. Ароматические полисульфоны в изделиях электронной техники / Тезисы докладов Межотраслевой научно-технической конференции по микроэлектронике. –Уфа. –1989. – С.5. (ДСП)
3. Ягодкин В.М., Каримов Ф.И., Васильев А.В. Микросборки на основе полиариленсульфоксидных композиций / Тезисы докладов Межотраслевой научно-технической конференции по микроэлектронике. –Уфа. –1989. – С.9. (ДСП)

© Абдрахманов Н.И., Тавлыкаев Р.Ф., Салихов Р.Б., 2016 г.

УДК 530

### МОДУЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОБУЧЕНИЯ И ОЦЕНКИ УСПЕВАЕМОСТИ СТУДЕНТОВ. ЧТО ВЕСОМЕЕ: ТЕКУЩИЙ ИЛИ РУБЕЖНЫЙ КОНТРОЛЬ?

Абдуллин А.У., Акманова Г.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В недавних статьях авторы оценили опыт использования модульно-рейтинговой системы обучения (МРС) в преподавании курсов общей физики [1,2] и сделали ряд конкретных предложений по исправлению недостатков этой системы [1,2]. В настоящей статье мы затронем вопрос о соотношении разных видов контроля при использовании модульно-рейтинговой системы.

Не спешите ухмыляться названию статьи. Несмотря на кажущиеся простоту вопроса и его частный характер, мы постараемся убедить Вас в обратном. В последней редакции «Положения о МРС» от сентября 2014 года соотношение между весом текущего и рубежного контроля было изменено в пользу первого. Было 30 к 40 баллам, стало – 40 к 30. Пожелание вроде бы благое: еще больше мотивировать студентов к повседневной работе. Но насколько это оправдано с точки зрения логики освоения учебного материала? Давайте порассуждаем.

В чем различие в целях этих видов контроля? Текущий контроль в первую голову должен заставить студента еженедельно, ежедневно, ежечасно трудиться. Рубежный контроль уже предполагает структурирование материала в голове студента, что, разумеется, намного важнее простого освоения-заучивания. Из-за разных задач и вклад того или иного вида контроля в «копилку» оценки на экзамене должен быть различным! Текущий контроль должен иметь стимулирующий характер, а рубежный – оценочный. Другими словами, текущий контроль «воспитывает», а рубежный – дает баллы.

В качестве лирического отступления хотелось бы привести пример из опыта учебы одного из авторов. В бытность обучения на физфаке МГУ доцент кафедры квантовой статистики и теории поля Иридий Александрович Квасников в далеком 1990-м году применял такой прием. На каждом занятии по решению задач по статистической физике и термодинамике (а это уже 4-й курс) он предлагал десятиминутные самостоятельные работы. И что такого, скажете Вы? Мы и сами это практиковали, пока учебные часы не урезали. Все так. Но дело в том, что он никак не оценивал эти работы. То есть он добросовестно их проверял, скрупулезно исправляя ошибки. Но после передачи проверенных работ (без оценки!) студентам никогда про них не вспоминал! По-моему, это был самый лучший текущий контроль, который может быть. Знали бы

Вы, как стимулировал «холодный душ» нерешенной задачи. А баллов никаких не начислено – ни положительных, ни отрицательных (штрафных).

Условно говоря, для текущего контроля важно выучить небольшую тему, сдать ее, а потом ... забыть. Потом следующую, и т.д. Как известно, «экзамен – это ревизия знаний, все лишнее за борт!» Что уж говорить о маленечкой частной «темке» – сдал и забыл. Приведем пример из механики – об усвоении физических моментов «по частям». Можно 10 сентября триумфально рассказать преподавателю о моменте силы относительно оси (повторение школьного материала), 20 сентября – узнать о моменте инерции, а уже 1 октября – успешно отчитаться за момент силы относительно точки. Но так никогда и не узнать, что момент силы относительно оси и момент инерции «сводит вместе» уравнение вращательного движения, а момент силы относительно оси может быть получен из момента силы относительно точки просто проектированием на ось. А вот чтобы этого не случилось, необходимо свести разные моменты в рубежном контроле. Например, в билете коллоквиума, который намеренно обставляется как устный курсовой экзамен.

Что использовать в качестве видов текущего и рубежного контроля, каждый преподаватель решает сам. Но и здесь, по нашему мнению, есть определенные рамки, и неоправданное «оригинальничанье» неуместно. Так, авторы используют в качестве элементов текущего контроля тесты, сдачу лабораторных работ и мини-контрольные по небольшим темам. Работу «у доски» на семинарских занятиях (решении задач) в работе с первым курсом (механика) в качестве вида текущего контроля авторы не используют, и вот почему. Дело в том, что механика – первый раздел курса общей физики, и на занятия по ней студент попадает, что называется, «со школьной скамьи». К сожалению, многие новоиспеченные студенты неважно решают задачи и при выходе к доске испытывают настоящий трепет. Часто выход к доске связан с серьезным психологическим барьером. И усугублять его дамокловым мечом оценки в баллах, на наш взгляд, неоправданно жестоко. Пусть просто решает, ошибается, исправляет с помощью преподавателя свои ошибки. А баллы получит уже на контрольной работе.

В качестве рубежного контроля используются «большие» контрольные по группам тем и коллоквиумы с выдаваемыми за две недели вопросами и билетами на самом коллоквиуме. На наш взгляд, это очень важно. Ведь выпускники «натаскиваются» на тестовый ЕГЭ, а свободный разговор с преподавателем на устном экзамене их часто просто вводит в ступор. Коллоквиум намеренно обставляется как устный курсовой экзамен, чтобы студенты почувствовали его атмосферу «на

своей шкуре». Два коллоквиума в курсе механики становятся неплохим подспорьем для подготовки к «большому» курсовому экзамену.

Давно назрело и требование увеличения роли экзамена, но это тема отдельного разговора. Десятилетиями перепевавшееся «от сессии до сессии живут студенты весело, а сессия всего два раза в год» теперь для трети студентов превратилось в дежурную процедуру (почти по Цезарю): пришел, увидел, получил. В том, что студент без процедуры сдачи экзамена получает оценку, нет ничего плохого. Плохо то, что ему не нужно большего! Особенно это заметно по результатам сдачи экзамена по математическим дисциплинам на 1 курсе в 2015 году, когда почти все студенты поголовно получили четверки. То есть математикам ставить пятерку совесть не позволяет, а тройку – жалость. Авторы статьи, напротив, всех студентов настраивали на улучшение своих показателей, хотя это и приводило к значительным дополнительным затратам времени. Так, перед экзаменационной сессией авторы устраивали дополнительные проверочные работы не только для тех, кому было необходимо «добрать» баллы до допуска, но и для тех, кто был в пределах досягаемости зоны «четверки» и «пятерки». Среди первокурсников 2015 года в таких дополнительных тестах и контрольных работах приняло участие 70% студентов. И на экзамене они старались «выцарапать» более высокий балл! По нашему мнению, так и должно быть.

Резюмируя, надо отметить, что благое пожелание стимулировать занятия студентов в семестре привело на данном этапе к неоправданному снижению роли рубежного и итогового (экзамен) контроля. Теперешнее распределение 100-балльной оценки за курс между текущим, рубежным и итоговым контролем как 40:30:30 далеко не оптимально. По нашему мнению, стоит вернуться к первоначальному соотношению 30:40:30, а лучше – еще и увеличить роль экзамена.

## Литература

1. Абдуллин А.У., Акманова Г.Р. Опыт использования модульно-рейтинговой системы обучения и оценки успеваемости студентов в курсах общей физики «Механика» и «Оптика». // Сборник трудов VII Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании» - Уфа: РИЦ БашГУ, 2014, с.13-18.
2. Абдуллин А.У., Акманова Г.Р. Реализация модульно-рейтинговой системы обучения при изучении механики и оптики. // Сборник материалов III Всероссийской научно-методической конференции

«Проблемы современного физического образования», 5-7 ноября 2015 г. Уфа. РИЦ БашГУ, 2015. с.169-171.

3. Абдуллин А.У., Акманова Г.Р. Перспективы совершенствования модульно-рейтинговой системы обучения и оценки успеваемости студентов в курсах общей физики. // Тезисы докладов VIII Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании», 27 сентября - 1 октября 2015 г. Уфа. РИЦ БашГУ, 2015. с.112.
4. Абдуллин А.У., Акманова Г.Р. Перспективы совершенствования модульно-рейтинговой системы обучения и оценки успеваемости студентов в курсах общей физики. // Сборник трудов VIII Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании» 27 сентября - 1 октября 2015 г. - Уфа. РИЦ БашГУ, 2015. С.142-144.

© Абдуллин А.У., Акманова Г.Р., 2016 г.

УДК 669.018.6

### РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КОБАЛЬТЕ

Габдрахманова Л.А., Альмухаметов Р.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В работе приведены результаты исследований релаксационных процессов в нанокристаллическом кобальте по уширению рентгеновских дифракционных линий. Нами установлено, что пластически деформированные образцы имеют широкие дифракционные линии. При отжиге линии сужаются и разрешается  $K_{\alpha}$ -дублет. Это свидетельствует о релаксации дефектов кристаллической решетки, внесенных пластической деформацией, и о росте кристаллитов [1, 2].

Большой интерес представляет зависимость ширины рентгеновских линий от температуры отжига [3]. На рис. 1 приведена зависимость полуширины линии (002) от температуры отжига. Для других линий наблюдаются аналогичные зависимости. На этом рисунке можно выделить две области (1) и (2). Эти области соответствуют возврату и рекристаллизации. Возврат и рекристаллизация происходят по диффузионному механизму. Поэтому ширина рентгеновских линий в зависимости от температуры отжига должны описываться экспоненциальной функцией.

На рис. 2 приведено изменение полуширины линии (002) от температуры отжига в координатах  $\ln \Delta W - (1/T)$ . Из рисунка видно, что зависимость  $\ln \Delta W = f(1/T)$  действительно описывается двумя прямыми. Для других рентгеновских линий наблюдаются аналогичные зависимости. Эти результаты указывают на то, что ширина дифракционных линий в зависимости от температуры отжига описывается функцией Аррениуса. Подобная зависимость наблюдалась нами впервые и из литературных данных такие зависимости для других соединений нам неизвестны.

На рис. 2 можно выделить также две характерные области 1 и 2 с линейной зависимостью  $\ln \Delta W = f(1/T)$ . Мы полагаем, что эти области характеризуют два разных процесса, происходящих при отжиге в пластически деформированном кобальте в разных температурных интервалах и контролирующих процесс релаксации дефектов: возврат и рекристаллизацию.

Известно, что при отжиге пластически деформированных металлов и сплавов обычно на начальной стадии наблюдается возврат, затем рекристаллизация [4]. В ряде работ отмечается, что на стадии возврата размеры зерен меняются незначительно. Известны также

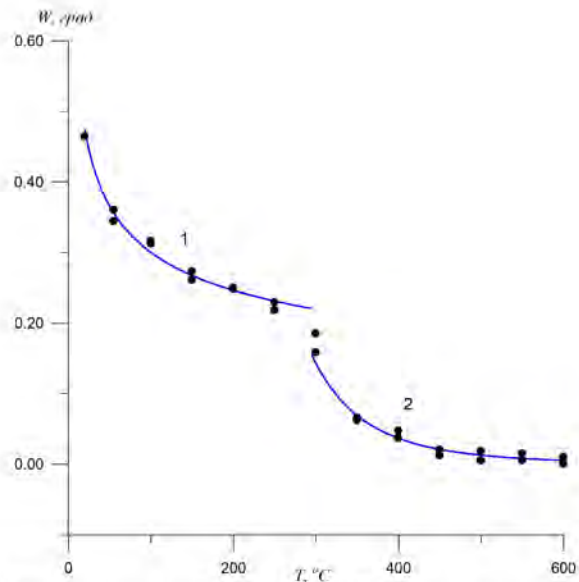


Рис. 1. Зависимость ширины дифракционной линии (002) от температуры отжига для НК кобальта. Время отжига при каждой температуре – 40 мин.

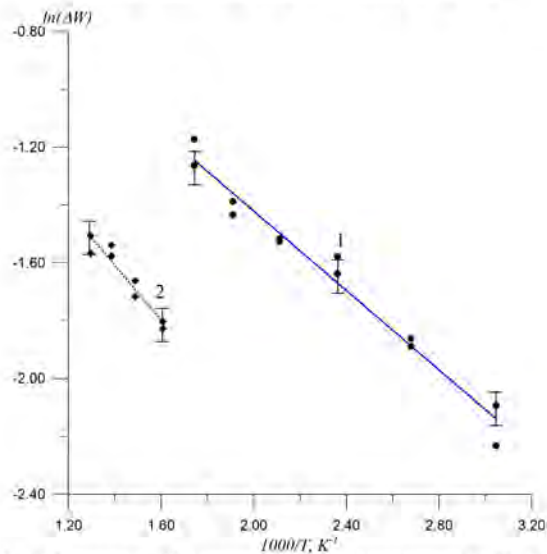


Рис. 2. Зависимость  $\ln \Delta W$  от температуры отжига в координатах  $\ln(\Delta W) - 1/T$  для линии (002) НК кобальта

результаты исследований, которые показывают, что возврат границ микрокристаллитов при изотермическом отжиге всегда сопровождается ростом зерен. Согласно результатам нашей работы при отжиге пластически деформированного кобальта в области температур до  $\sim 300^\circ\text{C}$  средний размер кристаллитов меняется незначительно и составляет примерно 25-50 нм. Поэтому мы полагаем, что низкотемпературная ветвь 1 зависимости  $\ln(\Delta W)=f(1/T)$  описывает уменьшение ширины дифракционной линии в результате возврата. При температурах отжига выше  $T \sim 300^\circ\text{C}$  зависимость  $\ln(\Delta W)=f(1/T)$  описывается другой прямой 2. По нашему мнению эта область соответствует рекристаллизации.

### Обсуждение температурной зависимости ширины дифракционных линий

Природа линейной зависимости  $\ln(\Delta W)=f(1/T)$  представляет особый интерес. Аналогичные данные из литературы нам неизвестны. Для объяснения наблюдаемых экспериментальных результатов рассмотрим факторы, определяющие ширину рентгеновских линий. Вторая составляющая уширения в (1) вызвана микродеформациями, величина которых связана с концентрацией дефектов  $n$  соотношением  $\varepsilon \sim \sqrt{n}$  [1, 2]. Для того, чтобы понять линейный характер зависимостей  $\ln(\Delta W)=f(1/T)$ , рассмотрим отдельно области возврата и рекристаллизации.

$$W = \frac{\lambda}{L \cos \theta} + (4\varepsilon \cdot \operatorname{tg} \theta) \quad (1)$$

#### Область возврата

При пластической деформации в кристалл вносятся различные дефекты: дислокации, вакансии, внедренные атомы и т.д. Такая дефектная структура является нестабильной и при отжиге наблюдается релаксация дефектов. Возврат является термически активируемым процессом. При отжиге дефекты определенного типа с определенной энергией активации релаксируют в соответствующем температурном интервале.

Положим, что концентрация дефектов меняется по диффузионному механизму. Предположим также, что скорость изменения концентрации дефектов, внесенных пластической деформацией, при отжиге описывается функцией:

$$\frac{dn}{dt} = -An \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (2)$$

Здесь  $n$  – концентрация дефектов,  $t$  – время отжига,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – температура отжига,  $Q$  – энергия активации

диффузии для данного вида дефекта,  $A$  - константа. Знак минус означает уменьшение концентрации дефектов при отжиге.

Аналогичная модель часто используется для описания неравновесных процессов. Так, в работе [5] для описания термoluminesценции без учета повторного захвата электронов, освобожденных с ловушек, была использована подобная модель и подтверждена правильность данной формулы. Для случая, когда термически освобожденные с ловушек электроны могут быть повторно захвачены, в работе [6] получена формула:

$$\frac{dn}{dt} = -An^2 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (3)$$

Для описания термически стимулированной люминесценции в случае кинетики общего порядка в работе [7] получено следующее выражение:

$$\frac{dn}{dt} = -An^b \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), \quad (4)$$

где  $b$  - порядок кинетики.

Для описания скорости изменения концентрации точечных дефектов в твердых телах при отжиге также используется подобное выражение [8, 9]:

$$\frac{dn}{dt} = -AK(n) \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (5)$$

Здесь  $K(n)$  – некоторая непрерывная функция, зависящая от концентрации дефектов.

В работе [10] рассмотрена кинетика возврата границ зерен в деформированном поликристалле и получено следующее выражение для плотности зернограницных дислокаций  $\rho$ :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{143\delta DG V}{d^3 k T} \rho, \quad (6)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии;  $G$  - модуль сдвига;  $V$  - атомный объем;  $k$  - постоянная Больцмана;  $T$  - абсолютная температура;  $d$  - размер зерна,  $\delta$  - толщина границы зерна. Учитывая зависимость коэффициента диффузии от температуры

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (7)$$

мы видим, что данное соотношение (6) аналогично соотношению (2).

Тогда, используя выражение (2) и соотношение  $\varepsilon \sim \sqrt{n}$  для изменения составляющей уширения рентгеновской линии  $\Delta W_\varepsilon$  вследствие изменения микродеформаций  $\varepsilon$  при отжиге за время  $\Delta t$  получим выражение в виде:

$$\Delta W_\varepsilon = V \cdot \Delta t = \frac{dW_\varepsilon}{dt} \Delta t = 4tg\theta \frac{d\varepsilon}{dt} \Delta t = -2Atg\theta \sqrt{n} \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \Delta t \quad (8)$$

$$V = \frac{dW_\varepsilon}{dt}$$

Здесь  $\frac{dW_\varepsilon}{dt}$  - скорость изменения ширины линии при отжиге.

Из этого выражения имеем:

$$\ln |\Delta W_\varepsilon| = \ln(2A\sqrt{n}tg\theta\Delta t) - \frac{Q}{RT} \quad (9)$$

В этом выражении первый логарифмический член справа меняется слабо. Поэтому зависимость  $\ln|\Delta W_\varepsilon|=f(1/T)$  будет линейной.

Используя формулу (9) нами были экспериментально определены значения энергии активации для области возврата вдоль различных кристаллографических плоскостей (см. табл. 1). Наши данные на порядок меньше энергии активации зернограницной диффузии для крупнокристаллических металлов. В литературе также получены заниженные значения энергии активации для других НК металлов разными методами [11, 12, 13]. Считается, что заниженные значения энергии активации в таких материалах обусловлены их высокой дефектностью вследствие их получения пластической деформацией [14, 15]. Наши данные также ниже энергии активации самодиффузии кобальта [13, 16]  $Q=2.69$  эВ. Но наши данные сравнимы с энергией активации поверхностной диффузии кобальта, найденной для тонких пленок [17]  $Q=0.14$  эВ.

### Область рекристаллизации

Рекристаллизация в пластически деформированных металлах носит сложный характер [18-23]. Это связано с тем, что на зарождение центров кристаллизации и на их рост влияют дефектная структура, наличие примесей, распределение зерен по размерам, внутренние напряжения и т.д. Этот вопрос сегодня находится на стадии изучения. Известно также, что в чистых пластически деформированных металлах центры рекристаллизации образуются в ходе пластической деформации [24, 25]. Поэтому для роста кристаллитов атомам необходимо только преодоление барьера, образованного поверхностью кристаллита. Тогда скорость роста линейных размеров кристаллитов выражается формулой [4, 19]:

$$V = \frac{D}{RT} \cdot \frac{\Delta F}{d} \quad (10)$$

Здесь  $\Delta F$  - разность свободных энергий деформированной и рекристаллизованной областей;  $d$  - длина прыжка атома при диффузии,



равная примерно межатомному расстоянию. Коэффициент диффузии  $D$  выражается известной формулой:  $D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$ , где  $D_0$  – константа.

Подставляя в (10) коэффициент диффузии для размеров кристаллитов получаем следующую формулу:

$$L = \frac{D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \Delta F}{RTd} \Delta t \quad (11)$$

Тогда для изменения составляющей уширения рентгеновской линии, связанной с изменением размеров кристаллитов, при отжиге за время  $\Delta t$  имеем формулу:

$$\Delta W_L = \frac{\lambda RTd}{D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \Delta F \Delta t \cos \theta} \quad (12)$$

и прологарифмировав

$$\ln(\Delta W_L) = \ln\left(\frac{\lambda RTd}{D_0 \Delta t \Delta F \cos \theta}\right) + \frac{Q}{R} \cdot \frac{1}{T} \quad (13)$$

В этой формуле первый логарифмический член меняется слабо. Поэтому зависимость изменения ширины рентгеновской линии от температуры отжига, связанной с размерами блоков  $\ln(\Delta W_L) = f(1/T)$  в основном определяется вторым слагаемым, и являются линейной.

Таким образом, каждая составляющая уширения рентгеновских линий описывается экспоненциальной зависимостью от температуры отжига с соответствующими энергиями активации. Так как возврат и рекристаллизация, в основном происходят в разных температурных областях, то на зависимостях

$$\ln(\Delta W) = f(1/T)$$

для общего уширения рентгеновских линий будут наблюдаться два прямолинейных участка.

Используя формулу (13) из экспериментальных данных нами были определены значения энергии активации диффузии для области рекристаллизации (см. табл. 1). Наши данные ниже энергии активации зернограничной самодиффузии в металлах [13, 15, 16, 26, 27]. И наши данные также намного ниже энергии активации самодиффузии кобальта.

Из табл. 1 видно, что энергия активации вдоль различных кристаллографических направлений имеет разные значения. Это, по нашему мнению связано с тем, что межатомные связи и расстояния вдоль разных кристаллографических направлений различаются.

Таблица 1.

Значения кажущейся энергии активации для области возврата  $Q_c$  и рекристаллизации  $Q_l$  НК кобальта

Кристаллографическая плоскость ( $hkl$ )	$Q_c$ , эВ	$Q_l$ , эВ
(100)	0.08	0.3
(002)	0.05	0.2
(101)	0.06	0.3
(102)	0.1	0.25
(110)	0.1	0.3
(103)	0.05	0.3
(112)	0.1	0.3

### Литература

1. Уманский, Я.С. Рентгенография металлов и полупроводников / Я.С. Уманский. – М.: Изд-во «Металлургия», 1969. – 496 с.
2. Русаков, А.А. Рентгенография металлов / А.А. Русаков. – Москва: Атомиздат., 1977. – 482 с.
3. Almukhametov, R.F. New X-ray approach to the study of structural transformation in nanocrystalline cobalt / R.F. Almukhametov, L.A. Gabdrakhmanova, I.Z. Sharipov, I.I. Musabirov, R.Kh. Khisamov // Вестник Башкирского университета. – 2014. – Т. 19. – № 2. – С. 385-389.
4. Горелик, С.С. Рекристаллизация металлов и сплавов / С.С. Горелик. – М.: Metallurgiya, 1978. – 568 с.
5. Randall, J.T. Phosphorescence and electron traps. I. The study of trap distributions / J.T. Randall, M.H.F Wilkins // Proc. Roy. Soc. – 1945. – V. A 184. – P. 366.
6. Garlick, G.F.J. The electron trap mechanism of luminescence in sulphide and silicate phosphors / G.F.J. Garlick, F. Gibson // Proc. Roy. Soc. – 1948. – V. 60. – 574.
7. Alam, Sh. The Effect of the Activation Energy, Frequency Factor and the Initial Concentration of Filled Traps on the TL Glow Curves of Thermoluminescence / Sh. Alam, S. Bauk // Adv. Studies Theor. Phys. – 2010. – V. 4. – P. 665-678.
8. Лухвич, А.А. Влияние дефектов на электрические свойства металлов / А.А. Лухвич. – Минск: «Наука и техника», 1976. – 103 с.
9. Дамаск, А. Точечные дефекты в металлах / А. Дамаск, Дж. Динс. – М.: Мир, 1966. – 292 с.

10. Nazarov, A.A. Kinetics of grain boundary recovery in deformed polycrystals. *Interface Science / A.A. Nazarov // Interface Science.* – 2000. – V. 8. P. 315-322.
11. Андриевский, Р.А. Термическая стабильность наноматериалов / Р.А. Андриевский // *Успехи химии.* - 2002. - Т. 71. - № 10. - С. 967-981.
12. Dickenscheid, W. Investigation of self-diffusion in nanostructured Cu by NMR / W. Dickenscheid, R. Birrington, H. Gleiter et all. // *Solid State Commun.* - 1991. - V. 79. - P. 683—686.
13. Бокштейн, С.З. Диффузия и структура металлов / С.З. Бокштейн. - М.: *Металлургия*, 1973. - 208 с.
14. Андриевский, Р.А. Размерные эффекты в нанокристаллических материалах. I. Особенности структуры. Термодинамика. Фазовые равновесия. Кинетические явления / Р.А. Андриевский, А.М. Глезер // *ФММ.* – 1999. – Т. 88. - № 1. – С. 50-73.
15. Дегтярев, М.В. Низкотемпературная рекристаллизация чистого железа, деформированного сдвигом под давлением / М.В. Дегтярев, Л.М. Воронова, Т.И. Чашухина // *ФММ.* - 2004. - Т. 97. - № 1. - С. 78-98.
16. Foster, C.N. Self-diffusion in cobalt / C.N. Foster, E.J. Frank // *Phys. Rev.* – 1951. – V. 82. – P. 72-74.
17. Prasad, J.J.B. Self diffusion studies on cobalt thin films / J.J.B. Prasad, K.V. Reddy // *Bull. Mater. Sci.* – 1985. - V. 7. - P. 15-20.
18. Чашухина, Т.И. Влияние способа деформации на изменение твердости и структуры армо-железа и конструкционной стали при деформировании и последующем отжиге / Т.И. Чашухина, М.В. Дегтярев, Л.М. Воронова, Л.С. Давыдова, В.П. Пилюгин // *ФММ.* - 2001. - Т. 91. - № 5. - С. 75-83.
19. *Физическое металловедение. Т.2. Фазовые превращения в металлах и сплавах и сплавы с особыми физическими свойствами.* - М.: *Металлургия*, 1987. - 624 с. Т.3. Физико-механические свойства металлов и сплавов / Под ред. Р.У. Кана, П.Т. Хаазена. - М.: *Металлургия*, 1987. - 663 с.
20. Попова, Е.П. Влияние степени деформации на структуру и термическую стабильность НК ниобия, полученного сдвигом под давлением / Е.П. Попова, В.В. Попов, Е.П. Романов, В.П. Пилюгин // *ФММ.* - 2007. - Т. 103. - № 4. - С. 426-432.
21. Воронова, Л.М. Старение и рекристаллизация сильнодеформированной стали 4X14N14B2M / Л.М. Воронова, В.И. Левит, Н.А. Смирнова // *ФММ.* - 1990. - № 4. - С. 109-116.
22. Воронова, Л.М. Термическая стабильность субмикроструктурной структуры в стали 4X14N14B2M / Л.М. Воронова, М.В. Дегтярев, Т.И. Чашухина // *ФММ.* - 2010. - Т. 109. - № 2. - С. 146-153.
23. Sarkar, A. Kinetics of dynamic recrystallization in cobalt: A study using the Avrami relation / A. Sarkar, J.K. Chakravarty, B. Paul, A.K. Suri // *Phys. Stat. Sol. (a).* - 2011. - V. 208. № 4. - P. 814-818.
24. Смирнова, Н.А. Особенности низкотемпературной рекристаллизации никеля и меди / Н.А. Смирнова, В.И. Левит, В.П. Пилюгин, Р.И. Кузнецов, М.В. Дегтярев // *ФММ.* - 1986. - Т. 62. - № 3. - С. 566-570.
25. Дегтярев, М.В. Формирование сверхмелкозернистой структуры при рекристаллизации сильнодеформированной инструментальной стали / М.В. Дегтярев, Т.И. Чашухина, Л.М. Воронова, Л.С. Давыдова, В.П. Пилюгин // *ФММ.* - 1994. - Т. 77. - № 2. - С. 141-146.
26. Дегтярев, М.В. Рост зерна при отжиге армо-железа с ультрадисперсной структурой различного типа, созданной деформацией сдвигом под давлением / М.В. Дегтярев, Л.М. Воронова, Т.И. Чашухина // *ФММ.* - 2005. - Т. 99. - № 3. - С. 58-68.
27. Головин, И.С. Зернограничная релаксация в меди до и после равноканального углового прессования и рекристаллизации / И.С. Головин // *ФММ.* - 2010. - Т. 110. - № 4. - С. 424-432.

© Габдрахманова Л.А., Альмухаметов Р.Ф., 2016 г.

## ДИНАМИКА СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ЭКСИТОНА В $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ С УЧЕТОМ ХУНДОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Дикушина Е.А.

Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

$\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  — недавно синтезированное в лаборатории соединение. Оно относится к оксидам переходных  $5d$  металлов, но в отличие от других соединений этой группы является моттовским диэлектриком. Вещество обладает слоистой структурой перовскита (рисунок 1) и может быть представлено как гайзенберговский антиферромагнетик с псевдоспином  $1/2$ , где за псевдоспин принимается полный момент иона Ir. Соединение привлекло внимание исследователей как возможный высокотемпературный сверхпроводник из-за сходств с купратами [1, 2].

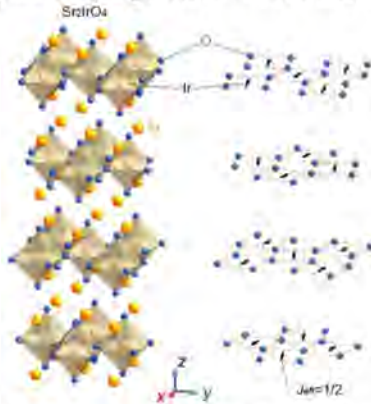


Рис. 1. Элементарная ячейка  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  и магнитная элементарная ячейка [3]

В экспериментальных спектрах  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  наблюдается беззарядовая квазичастица — спин-орбитальный экситон. Такой экситон можно рассматривать как возбуждение, которое распространяется по решетке, разупорядочивая спины и нарушая магнитный порядок системы. Распространение спин-орбитального экситона в системе без учета правила Хунда затухает из-за нарушения локального магнитного порядка [2, 3]. Тем не менее, в системе с переносом заряда вклад хундовского взаимодействия в электронную структуру иона сравним со спин-орбитальным и не может быть опущен. Благодаря хундовскому взаимодействию появляется новый тип переноса, который делает

возможным перенос экситона в  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  без нарушения магнитного порядка ионов окружения.

В данной работе получен гамильтониан Хаббарда для двухузельной системы, в которой на одном из узлов есть возбуждение, и из него выведен эффективный гамильтониан. Получившийся эффективный гамильтониан предполагает наряду с обычным переносом перенос экситона с изменением спинового состояния. Такой перенос возможен только при учете хундовского взаимодействия. Он приводит к возможности появления состояний, при которых магнитная система не искажается и перенос возбуждения становится выгодным. Такие состояния соответствуют незатухающему экситону.

Целью работы является рассмотрение совместного действия переносов обоих типов — с изменением спинового состояния ионов и без изменения — и изучение их вкладов в распространение спин-орбитального возбуждения в  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ .

Рассмотрение переноса следует начать с двухузельной системы с возбуждением на одном узле. Возможны две проекции псевдоспина в основном состоянии:  $\sigma = 1/2$  и  $\sigma = -1/2$ . Полный момент (или псевдоспин) на узле в основном состоянии  $s = 1/2$ . Возбужденное состояние имеет четыре возможные проекции:  $m = \pm 3/2, \pm 1/2$ . Полный момент такого узла  $j = 3/2$ .

Перенос возбуждения можно представить как двухэтапный процесс, в котором дырка с псевдоспином  $j = 3/2$  переходит на соседний узел и за счет кулоновского отталкивания выталкивает на соседний узел дырку с проекцией  $j = 1/2$ . Ранее считалось, что энергетические уровни промежуточного состояния имеют одинаковую энергию. Расчет собственных значений гамильтониана показывает, что эти уровни будут иметь разную энергию. С учетом этой разницы в энергиях становится возможным перенос с изменением спиновых состояний.

Гамильтониан Хаббарда для двухузельной системы с возбуждением на одном из них можно записать как

$$\hat{H} = -t_1 \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma}) - t_2 \sum_m (d_{1m}^{\dagger} d_{2m} + d_{2m}^{\dagger} d_{1m}) + U \sum_{\sigma, m} (n_{1\sigma} n_{1m} + n_{2\sigma} n_{2m}) + V_{ee} \quad (1)$$

где  $t_1$  — интеграл переноса дырки из низкоспинового состояния на одном узле в низкоспиновое состояние на другом узле,  $t_2$  — интеграл переноса дырки из высокоспинового состояния на одном узле в высокоспиновое состояние на другом узле,  $m$  — проекция псевдоспина на возбужденном узле,  $c_{i\sigma}$ ,  $d_{jm}$  — операторы рождения и уничтожения дырки с псевдоспином.

$j = 1/2$  и проекцией псевдоспина  $\sigma$  на узле  $i$  и с псевдоспином  $j = 3/2$  и проекцией псевдоспина  $m$  на узле  $j$ ,  $V_{ee}$  — хундовское взаимодействие.

Элементы матрицы такого гамильтониана определяются через коэффициенты Клебша-Гордана. Полученная матрица имеет размерность  $32 \times 32$ . Ее можно диагонализировать, собственные значения позволяют построить спектр (рисунок 4а),  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ ,  $\epsilon'_1$  и  $\epsilon'_2$  определяются соотношением  $\frac{\tau_{1,2}}{U_{1,2}}$ , где  $\tau_1$  и  $\tau_2$  — линейные комбинации  $t_1$  и  $t_2$ ,  $U_1$  и  $U_2$  — энергии высокоспинового и низкоспинового дублетов соответственно (рисунок 2а),  $U_2 > U_1$ . На рисунке 2б проиллюстрировано действие оператора обмена на спектр: такой спектр состоит из двух уровней  $S = 1$  и  $S = 2$ . Видно, что для расщепления этих уровней и соответствия их собственным значениям гамильтониана требуется включить перенос.

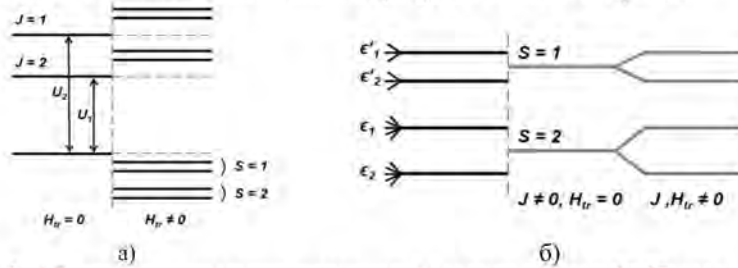


Рис. 2. а) Энергетические уровни двухузельной системы в модели Хаббарда с учетом правила Хунда; б) вырождение уровней

Перенос возбуждения с одного узла на другой можно рассматривать как одноэтапный процесс, то есть дырка с  $j = 3/2$  меняется местами с дыркой с  $j = 1/2$  с соседнего узла. Тогда можно записать эффективный гамильтониан для двухузельной системы

$$\hat{H}_{eff} = J(\vec{J}_1 \vec{s}_2 + \vec{s}_1 \vec{J}_2) + \sum_{\sigma, \sigma', m, m'} W(\sigma, \sigma', m, m') \left( X_1^{\frac{1}{2}\sigma' \frac{3}{2}m} X_2^{\frac{3}{2}m' \frac{1}{2}\sigma} + X_2^{\frac{1}{2}\sigma' \frac{3}{2}m} X_1^{\frac{3}{2}m' \frac{1}{2}\sigma} \right) \quad (2)$$

где  $J$  — константа эффективного обмена, для двухузельной системы  $J < 0$ ,  $J_i$ ,  $m_i$  — значения псевдоспина и его проекции на  $i$ -том узле до переноса возбуждения,  $X_i^{\frac{1}{2}\sigma' \frac{3}{2}m}$  — оператор Хаббарда,  $i$ -том узле после переноса возбуждения,  $W$  — параметр переноса, является линейной комбинацией  $W_1$  и  $W_2$ . Параметры  $J$ ,  $W_1$  и  $W_2$  определяются через микроскопические параметры

$$\begin{aligned} J &= -\frac{1}{2}(t_1^2 + t_2^2) \left( \frac{1}{U_1} - \frac{1}{U_2} \right) \\ W_1 &= \frac{2t_1 t_2}{U_1} \\ W_2 &= \frac{2t_1 t_2}{U_2} \end{aligned} \quad (3)$$

Матрица эффективного гамильтониана  $H_{eff}$  (выражение 6), может быть поделена на блоки с сохраняющимися проекциями полного момента системы  $M$ . Например, матрица для  $M = \pm 1$  записывается как

	$ \frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle_1  \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_2$	$ \frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle_1  \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_2$	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_1  \frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle_2$	$ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle_1  \frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle_2$
$ \frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle_1  \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_2$	$\frac{1}{4}J$	$\frac{\sqrt{3}}{2}J$	$-\frac{1}{4}(3W_1 + W_2)$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}(W_2 - W_1)$
$ \frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle_1  \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_2$	$\frac{\sqrt{3}}{2}J$	$-\frac{3}{4}J$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}(W_2 - W_1)$	$-\frac{1}{4}(W_1 + 3W_2)$
$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle_1  \frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle_2$	$-\frac{1}{4}(3W_1 + W_2)$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}(W_2 - W_1)$	$\frac{1}{4}J$	$\frac{\sqrt{3}}{2}J$
$ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle_1  \frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle_2$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}(W_2 - W_1)$	$-\frac{1}{4}(W_1 + 3W_2)$	$\frac{\sqrt{3}}{2}J$	$-\frac{3}{4}J$

Блоки, расположенные на главной диагонали, отвечают за обмен на побочной диагонали — за перенос. Видно, что элементы, стоящие на побочных диагоналях и соответствующие переносу в изменении спиновых состояний, не равны нулю. Следовательно под действием такого оператора возможен перенос в результате, которого меняется проекция исходного состояния.

Для иллюстрации рассмотрим цепочку из  $N - 1$  узлов с антиферромагнитно упорядоченными спинами и одним узлом с  $j = 3/2$  и произвольной проекцией. Для такой системы оставим только перенос с изменением состояния и изинговское обменное взаимодействие. Тогда выражение (2), обобщенное для системы из  $N$  узлов, записывается как

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{n=1}^N & \left( J_{FM} (J_n^z s_{n+1}^z + s_n^z J_{n+1}^z) + J_{AFM} (s_n^z s_{n+1}^z + s_n^z s_{n+1}^z) + \right. \\ & \left. + \sum_{\sigma, \sigma', m, m'} W(\sigma, \sigma', m, m') (X_n^{\frac{1}{2}\sigma | \frac{3}{2} m} X_{n+1}^{\frac{3}{2} m | \frac{1}{2} \sigma} + X_{n+1}^{\frac{1}{2}\sigma | \frac{3}{2} m} X_n^{\frac{3}{2} m | \frac{1}{2} \sigma}) \right) \end{aligned} \quad (4)$$

где константа обменного взаимодействия  $J$  принимает разные значения: ферромагнитный обмен  $J_{FM} < 0$  — для взаимодействия пары узлов, один из которых находится в возбужденном состоянии, антиферромагнитный обмен  $J_{AFM} > 0$  — для узлов без возбуждения.

Для такой системы параметр переноса принимает только два значения

$$W = \begin{cases} -\frac{1}{2}(W_2 - W_1) \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(W_2 - W_1). \end{cases} \quad (5)$$

Рассмотрим состояние для одномерной цепочки ионов с возбуждением на  $-m$  узле

$$\left| \frac{1}{2}_n \right\rangle = \left| \left( \frac{11}{22} \right)_1 \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right)_2 \dots \left( \frac{31}{22} \right)_n \left( \frac{11}{22} \right)_{n+1} \dots \right\rangle \quad (6)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \hat{H} \left| \frac{1}{2}_n \right\rangle &= 2 \cdot \frac{J}{4} \left| \frac{1}{2}_n \right\rangle + W \left| \left( \frac{11}{22} \right)_1 \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right)_2 \dots \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right)_n \left( \frac{33}{22} \right)_{n+1} \dots \right\rangle + \\ &+ W \left| \left( \frac{11}{22} \right)_1 \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right)_2 \dots \left( \frac{33}{22} \right)_{n-1} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right)_n \left( \frac{11}{22} \right)_{n+1} \dots \right\rangle = \frac{J}{2} \left| \frac{1}{2}_n \right\rangle + W \left| \frac{3}{2}_{n+1} \right\rangle + W \left| \frac{3}{2}_{n-1} \right\rangle \end{aligned} \quad (7)$$

Из этого выражения видно, что будут наблюдаться акустические и оптические магнитные моды. Аналогично можно проделать ту же операцию для  $\left| \frac{3}{2}_n \right\rangle$

$$\hat{H} \left| \frac{3}{2}_n \right\rangle = 2 \cdot \left( -\frac{3}{4} J \right) \left| \frac{3}{2}_n \right\rangle + W \left| \frac{1}{2}_{n+1} \right\rangle + W \left| \frac{1}{2}_{n-1} \right\rangle \quad (8)$$

Таким образом, получаем систему уравнений

$$\begin{cases} \hat{H} \left| \frac{1}{2}_n \right\rangle = \frac{J}{2} \left| \frac{1}{2}_n \right\rangle + W \left| \frac{3}{2}_{n-1} \right\rangle + W \left| \frac{3}{2}_{n+1} \right\rangle \\ \hat{H} \left| \frac{3}{2}_n \right\rangle = -\frac{3}{2} J \left| \frac{3}{2}_n \right\rangle + W \left| \frac{1}{2}_{n-1} \right\rangle + W \left| \frac{1}{2}_{n+1} \right\rangle. \end{cases} \quad (9)$$

Используя метод Фурье для диагонализации, получаем собственные значения

$$\lambda_{1,2} = -\frac{1}{2}(\varepsilon_a + \varepsilon_b) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4W^2 \cos^2 \frac{k}{2}}, \quad k \in (-\pi, \pi) \quad (10)$$

где  $\varepsilon_i$  — обменная энергия возбуждения с окружением,  $a$  и  $b$  — индексы подрешеток. Если рассматривать возбуждение с проекцией псевдоспина  $m_0$  в окружении узлов с проекциями  $\sigma = 1/2$ , для  $m_0 = 1/2, -3/2$  обменная энергия определяется выражениями  $\varepsilon_a = \frac{1}{4}J$ ,  $\varepsilon_b = -\frac{3}{4}J$ , параметр переноса —

$W = -\frac{\sqrt{3}}{4}(W_2 - W_1)$ ; для  $m_0 = -1/2$  обменная энергия определяется как  $\varepsilon_a = \varepsilon_b = -\frac{1}{4}J$ , параметр переноса —  $W = -\frac{1}{2}(W_2 - W_1)$ ; Для  $m_0 = 3/2$  обменная энергия определяется как  $\varepsilon_a = \varepsilon_b = \frac{3}{4}J$  и  $W = 0$ .

Выражение (10) является законом дисперсии. На рисунках 3 изображены дисперсии для различных значений  $m_0$  на возбужденном узле с проекциями псевдоспинов  $\sigma = 1/2$  на соседних узлах. Пунктиром обозначена дисперсия для системы без переноса возбуждения. Для  $m_0 = 3/2$  в таком окружении нет дисперсии, так как такой перенос не осуществляется операторами введенного гамильтониана.

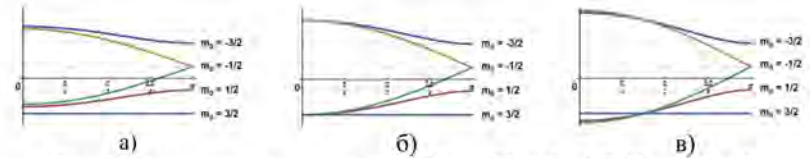


Рис. 3. Дисперсионные кривые при а)  $W_2 - W_1 = 0.8J$ ; б)  $W_2 - W_1 = J$ ; в)  $W_2 - W_1 = 1.2J$

Если рассматривать систему с проекциями  $\sigma = -1/2$  на узлах, окружающих атом с возбуждением, получится та же картина, поменяется только знак у  $m_0$ . В таком окружении нет дисперсии у проекции  $m_0 = -3/2$ .

Видно, что минимум энергии опускается при увеличении переноса и начиная с некоторого значения минимум энергии переходит на состояния

с переносом экситона. Таким образом, в рассматриваемой системе перенос с изменением состояния выгоден и спин-орбитальный экситон не затухает.

Важно учитывать, что в расчете дисперсии были отброшены поперечные слагаемые гайзенберговского обмена  $S_i^+ S_j^-$  и  $S_i^- S_j^+$  и перенос без изменения состояния. При включении этих слагаемых гамильтониана картина может быть искажена затуханием. Для получения окончательного спектра требуется компьютерное моделирование.

### Литература

1. Kim B. J., Jin H., Moon S. J. Novel  $J_{eff} = 1/2$  Mott State Induced by Relativistic Spin-Orbit Coupling in  $Sr_2IrO_4$  // Phys.Rev.Lett. 101(7) (2008).
2. Kim J., Daghofer A. H., Said A. H. Excitonic Quasiparticles in a Spin-Orbit Mott Insulator // Nature Communications. 3 (1) (2014).
3. Kim J., Casa D., Upton M.H. Isospin Dynamics in  $Sr_2IrO_4$  : Forging Links to Cuprate Superconductivity // Phys. Rev. Lett. 108 (2012).

© Дикушина Е.А., 2016 г.

УДК 532.5

### ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ В ПЛАСТЕ С НАРУШЕННОЙ ПРИСКВАЖИННОЙ ЗОНОЙ

Егоров Е.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последнее время наряду с применением термометрии в диагностике состояния скважин наблюдается интерес к возможности количественной интерпретации температурных измерений. В количественной интерпретации особое место отводится численному моделированию температурных процессов, но не меньшую ценность представляют собой простые аналитические модели, которые могут быть использованы для получения первых приближений при решении обратных задач термометрии и при тестировании сложных численных моделей.

Актуальность работы обусловлена необходимостью сравнения аналитического и численного решения прямых и обратных задач подземной термогидродинамики, используя зарегистрированные данные забойного давления и температуры.

В данной работе используется аналитическая модель неизотермической однофазной фильтрации жидкости в пласте с областью неоднородности по проницаемости в радиальной постановке.

**Постановка задачи:** Исследуется температурное поле в пласте после однократного изменения дебита, вызванного изменением забойного давления. Первоначальное поле давления при однофазной фильтрации жидкости в пористом пласте описывается математической моделью, которая представлена в (1):

$$p_1(r) = \begin{cases} p_{w1} + \frac{Q_1}{2\pi\sigma_1} \ln(r/r_w) , & r < r_d \\ p_1(r_d) + \frac{Q_1}{2\pi\sigma_2} \ln(r/r_d) , & r > r_d , r < R_k \\ p_1 = p_{пл} , & r > R_k \end{cases} \quad (1)$$

Далее забойное давление скачкообразно изменяется до  $p_{w2}$ . Используется модель жесткого пласта [1], поэтому предполагается, что давление во всем пласте мгновенно перераспределяется до (2):

$$p_2(r) = \begin{cases} p_{w2} + \frac{Q_2}{2\pi\sigma_1} \ln(r/r_w) , & r < r_d \\ p_2(r_d) + \frac{Q_2}{2\pi\sigma_2} \ln(r/r_d) , & r > r_d , r < R_k \\ p_2 = p_{пл} , & r > R_k \end{cases} \quad (2)$$

Изменение температуры в пласте за счет термодинамических эффектов описывается формулами:

$$T_1(r, t) = \eta(p_1(r_T(t)) - p_{пл}) + \varepsilon(p_1(r_T(t)) - p_1(r)) \quad (3)$$

$$T_2(r_w, t) = \eta(p_1(r_{T1}(r_{T2}(r_w, t), t_p)) - p_{пл}) + \varepsilon(p_1(r_{T1}(r_{T2}(r_w, t), t_p)) - p_1(r_{T2}(r_w, t))) + \eta(p_2(r_{T2}(r_w, t)) - p_1(r_{T2}(r_w, t))) + \varepsilon(p_2(r_{T2}(r_w, t)) - p_2(r_w)) \quad (4)$$

где (3) описывает температурное поле в пласте до изменения дебита, (4) – после изменения дебита.

В ходе работы была разработана диалоговая программа для аналитического решения задачи (см. рис.1).

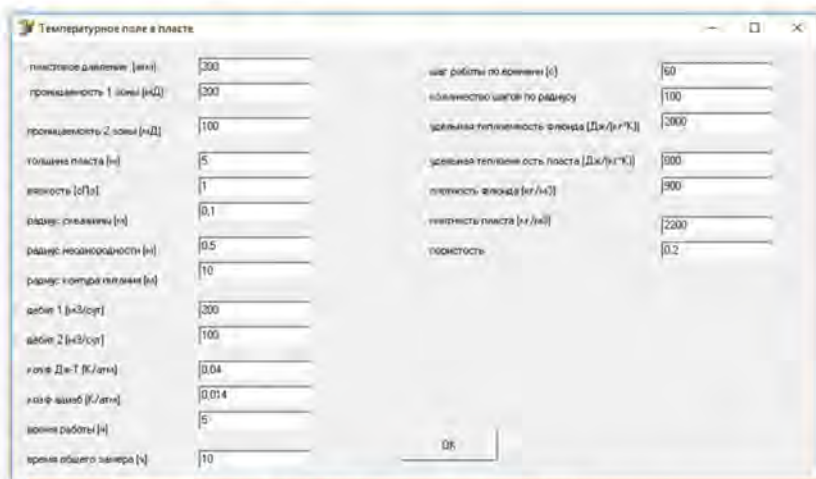


Рис. 1 Интерфейс программы аналитического решения

Данная аналитическая модель может быть использована для моделирования термогидродинамических процессов в пласте и скважине для переменного дебита, а также для решения обратных задач – определения параметров пласта по данным изменения температуры на стенке скважины.

Сравнение аналитического и численного моделирования показало хорошую сходимость результатов расчетов. Сплошными линиями выделены результаты аналитического моделирования, пунктирными линиями выделены результаты численного моделирования. (см. рис.2).

Максимальные отклонения между температурными кривыми наблюдаются в момент изменения дебита и составляют:

- для  $r_d = 0.15$  м 0.0147 °С;
- для  $r_d = 0.5$  м 0.0182 °С;
- для  $r_d = 1$  м 0.0207 °С;
- для  $r_d = 1.5$  м 0.0217 °С.

Среднеквадратичные отклонения составляют:

- для  $r_d = 0.15$  м 0.0020 °С;
- для  $r_d = 0.5$  м 0.0027 °С;
- для  $r_d = 1$  м 0.0037 °С;
- для  $r_d = 1.5$  м 0.0038 °С.

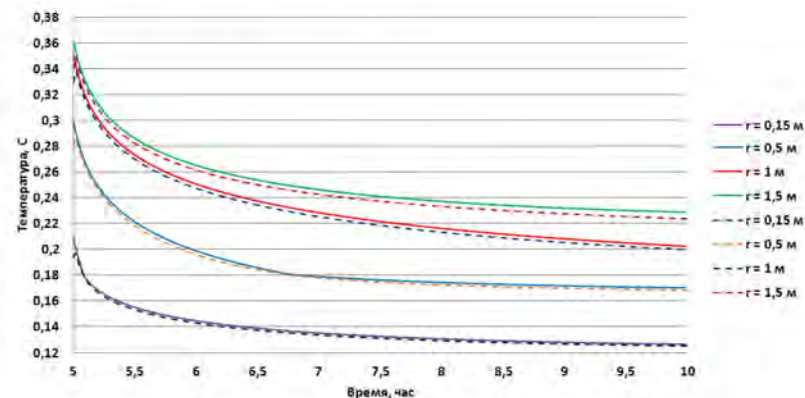


Рис. 2 Сравнения аналитической и численной моделей

В ходе проведенной работы было установлено, что аналитическая модель может быть использована в качестве упрощенного решения задачи о температурном поле в пласте с нарушенной прискважинной зоной.

### Литература

1. Басниев К.С., Кочина И.Н., Максимов В.М. Подземная гидромеханика Учебник для вузов. — М.: Недра, 1993. — 416 с.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИТОКА К СКВАЖИНЕ С ГРП С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ОБЪЕМА СТВОЛА СКВАЖИНЫ

Емельянов А.Г., Хабибуллин И.Л.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одним из эффективных методов интенсификации добычи нефти является гидравлический разрыв пласта (ГРП). Наиболее эффективным является проведение ГРП на скважинах с низким коэффициентом продуктивности, вызванным, главным образом, низкой проницаемостью [1]. Для определения коэффициента продуктивности (до проведения ГТМ – для подбора скважин-кандидатов, после – для определения эффективности операции) для низкопроницаемых коллекторов использование индикаторных диаграмм малоприменимо в силу продолжительного периода неустановившейся фильтрации. Увеличение же периода исследования ведет к увеличению убытков, связанных с изменением оптимального режима работы скважины (забойного давления и соответствующего ему дебита). Особое значение начинают принимать гидродинамические исследования скважин (ГДИС), основанные на определении гидродинамических параметров по данным неустановившегося течения [1, 2].

Условием корректной интерпретации ГДИС, основанных на исследовании перераспределения забойного давления при изменении режима работы скважины, является равенство дебитов на устье и забое скважины. Однако на ранних временах наблюдается так называемый эффект влияния объема ствола скважины (ВСС), проявляющийся в неравенстве дебитов (рис. 1).

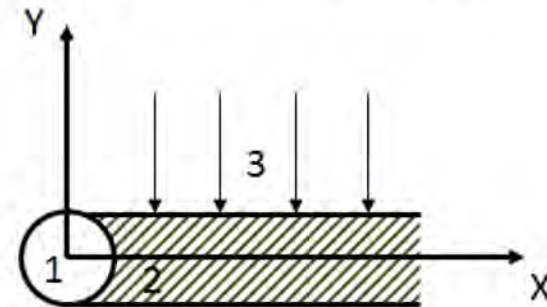


Рис. 1. Эффект ВСС

Исследованию эффекта ВСС посвящено много трудов [2, 3, 5]. Данная работа посвящена исследованию эффекта ВСС на перераспределение забойного давления и дебит для скважин, на которых проведен ГРП.

#### Постановка задачи и описание модели

В пласте рассматривается скважина, которая пересекается вертикальной трещиной ГРП. Считается, что трещина имеет бесконечную проводимость и основной поток жидкости из пласта в скважину поступает через трещину. В начальной стадии, после запуска скважины, поток жидкости из пласта в трещину является линейным, таким образом, имеет место плоско-одномерная фильтрация жидкости к трещине и скважине. Схема процесса фильтрации приведена на рис. 2.

Рис. 2. Схема процесса фильтрации  
1 – скважина, 2 – трещина ГРП, 3 – линии тока

С учетом влияния объема ствола скважины распределение давления в пласте описывается следующей задачей:

$$\chi \left( \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \right) = \frac{\partial P}{\partial t}, \quad 0 < y < \infty; \quad (1)$$

$$P(y, 0) = P(\infty, t) = P_0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial P(y=0, t)}{\partial y} = \frac{q\mu}{kS} + c \frac{\partial P(y=0, t)}{\partial t}. \quad (3)$$

В (1) - (3)  $P(y, t)$  – распределение давления в пласте,  $P_0$  – начальное давление,  $q$  – расход жидкости из пласта в трещину (дебит скважины),  $S$  – площадь поверхности трещины,  $\chi$  и  $k$  – пьезопроводность и



проницаемость пласта,  $C$  – коэффициент влияния ствола скважины,  $\mu$  – вязкость флюида,  $S=hX_f$ ,  $h$  – мощность пласта,  $X_f$  – полудлина трещины,  $C=\frac{S_0 \mu}{\rho g kS}$ ,  $S_0$  – площадь сечения скважины,  $\rho$  – плотность флюида,  $g$  – ускорение свободного падения.

Для удобства решения задачи введем безразмерные величины:

$$\bar{P} = \frac{P - P_0}{P^*}, P^* = \frac{q\mu}{kX_f}, \bar{y} = \frac{y}{h}, \bar{t} = t \frac{\chi}{h^2}.$$

В безразмерных переменных задача (1) – (3) представляется в виде:

$$\frac{\partial^2 \bar{P}}{\partial \bar{y}^2} = \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{t}}; \quad (4)$$

$$\bar{P}(\bar{y}, 0) = \bar{P}(\infty, t); \quad (5)$$

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{y}} \Big|_{\bar{y}=0} = -1 + \bar{C} \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{t}} \Big|_{\bar{y}=0}, \bar{C} = \frac{C\chi}{h}. \quad (6)$$

Решение задачи получим методом преобразования Лапласа. В пространстве изображений преобразования Лапласа:

$$\bar{P}(\bar{y}, S) = \int_0^{\infty} \bar{P}(\bar{y}, t) e^{-st} dt = L[\bar{P}(\bar{y}, t)].$$

задача (4) – (5) представится в виде:

$$\frac{\partial^2 \bar{P}}{\partial \bar{y}^2} = S\bar{P}; \quad (7)$$

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{y}} \Big|_{\bar{y}=0} = -\frac{1}{\rho} + \bar{C} S \bar{P} \Big|_{\bar{y}=0}. \quad (8)$$

Решение задачи (7) - (8) имеет вид:

$$\bar{P}(\bar{y}, S) = \frac{e^{-\bar{y}\sqrt{S}}}{S^{\frac{3}{2}}(1 + \bar{C}\sqrt{S})}; \quad (9)$$

Для перехода в (9) от изображения к оригиналу используем таблицу преобразований Лапласа [4]. Тогда

$$\bar{P}(\bar{y}, \bar{t}) = 2 \sqrt{\frac{\bar{t}}{\pi}} e^{-\frac{\bar{y}^2}{4\bar{t}}} - (\bar{C} + \bar{y}) \operatorname{erfc} \frac{\bar{y}}{2\sqrt{\bar{t}}} + \bar{C} e^{\frac{\bar{y}}{\bar{C}} + \frac{\bar{t}}{\bar{C}^2}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\bar{y}}{2\sqrt{\bar{t}}} + \frac{\sqrt{\bar{t}}}{\bar{C}} \right). \quad (10)$$

Здесь  $\operatorname{erfc} z = \int_z^{\infty} e^{-u^2} du$  – дополнительная функция ошибок.

При  $\bar{C} = 0$  из (10) следует решение известной задачи о плоско-параллельной фильтрации флюида к галерее или трещине с заданным постоянным дебитом [4, 5]:

$$\bar{P}(\bar{y}, t) = 2 \sqrt{\frac{\bar{t}}{\pi}} e^{-\frac{\bar{y}^2}{4\bar{t}}} - \bar{y} \operatorname{erfc} \frac{\bar{y}}{2\sqrt{\bar{t}}}. \quad (11)$$

Полагая в (10)  $\bar{y} = 0$ , находим давление на забое скважины:

$$\bar{P}(0, \bar{t}) = 2 \sqrt{\frac{\bar{t}}{\pi}} - \bar{C} \left[ 1 - \exp\left(\frac{\bar{t}}{\bar{C}^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\bar{t}}}{\bar{C}}\right) \right]. \quad (12)$$

Расход жидкости из трещины в скважину определяется как:

$$Q = \frac{k}{\mu} \frac{\partial P(0, t)}{\partial y} hX_f = -\frac{k}{\mu} hX_f \frac{\partial \bar{P}(0, t)}{\partial \bar{y}} = -q \frac{\partial \bar{P}(0, \bar{t})}{\partial \bar{y}}.$$

Таким образом, безразмерный расход определяется из выражения:

$$\frac{Q}{q} = -\frac{\partial \bar{P}(0, \bar{t})}{\partial \bar{y}}.$$

С учетом (10) имеем:

$$\frac{Q}{q} = 1 + \exp\left(\frac{\bar{t}}{\bar{C}^2}\right) \operatorname{erfc} \frac{\sqrt{\bar{t}}}{\bar{C}}. \quad (13)$$

Численные расчеты по выражению (12) и (13) позволяют оценить влияние объема ствола скважины на дебит скважины и давление на забое.

### Результаты расчетов

Как описано выше, представленная модель имеет допущение бесконечной проводимости создаваемой трещины ГРП. Поэтому единственным параметром, характеризующим дизайн ГРП, является полудлина трещины ( $X_f$ ).

Ниже представлены графики зависимости безразмерного дебита от времени для полудлин трещины от 25 м до 125 м в пластах с разной проницаемостью матрицы ( $0,001 \text{ мкм}^2$ ;  $0,1 \text{ мкм}^2$ ;  $1 \text{ мкм}^2$ ) (рис. 3). В расчетах принято:  $P_0 = 20 \text{ МПа}$ ;  $q = 10 \text{ м}^3$ ;  $\mu = 3 \text{ МПа} \cdot \text{с}$ ;  $h = 10 \text{ м}$ ;  $\rho = 850 \text{ кг/м}^3$ ;  $g = 9,8 \text{ м}^2/\text{с}$ .

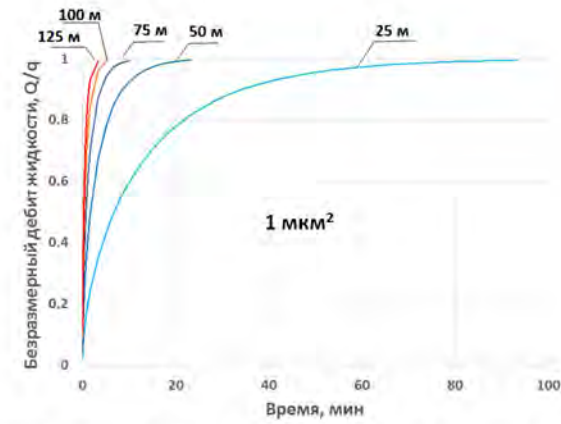
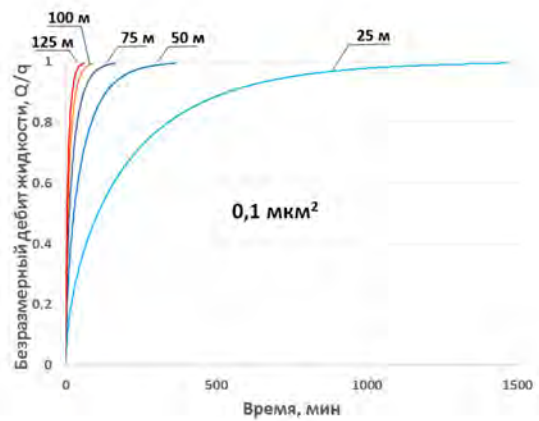
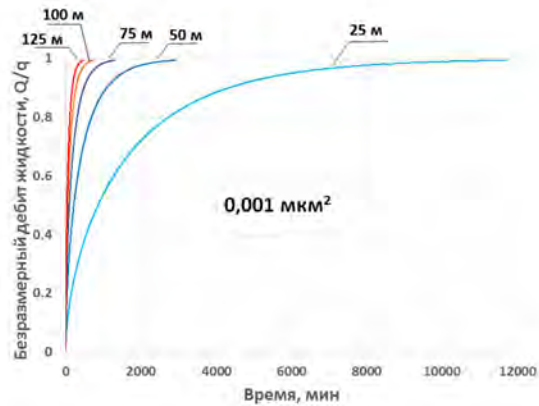


Рис. 3. График зависимости безразмерного дебита от времени для разных полудлин трещин в пластах с разной проницаемостью матрицы

Для удобства оценки влияния увеличения полудлины трещины на период ВСС построим графики в координатах: период ВСС ( $t(Q=q)$ ) – полудлина трещины (рис. 4).

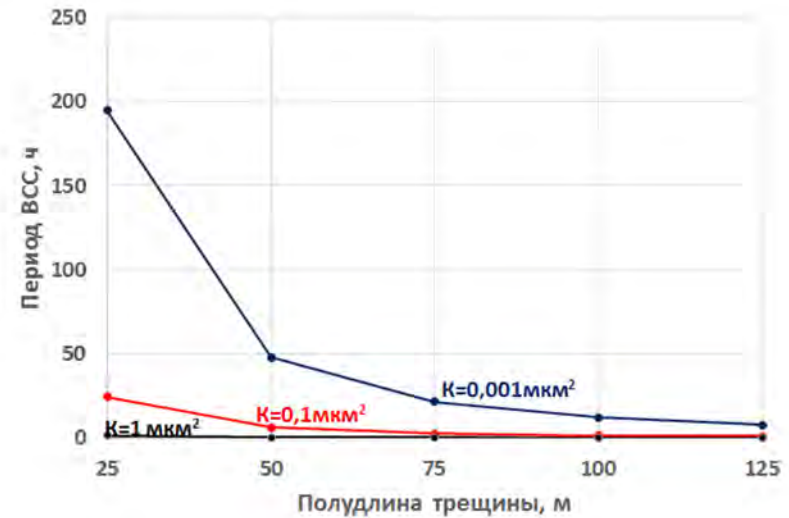


Рис. 4. Зависимость периода ВСС от полудлины трещины

Как показано в [1], рост длины трещины имеет наибольшую эффективность (прирост дебита флюида) в низкопроницаемых коллекторах. Из полученных нами результатов можно сделать вывод, что увеличение полудлины трещины приводит к наибольшему снижению периода ВСС так же в низкопроницаемых коллекторах. В высокопроницаемых же коллекторах снижение периода ВСС при увеличении длины трещины находится в рамках статистической погрешности.

Для сравнения добыча скважины, работающей с дебитом по нефти 10 м<sup>3</sup>/сут, за 1 час составляет 0,4 м<sup>3</sup> (что при цене 50\$/барр составляет 9 тыс. руб). Так, при увеличении полудлины трещины с 25 м до 50 м для пласта с проницаемостью матрицы 0,001 мкм<sup>2</sup> экономия (из-за уменьшения периода простоя) составляет более 1 млн рублей, тогда как для проницаемости 0,1 мкм<sup>2</sup> и 1 мкм<sup>2</sup> экономия составляет 164 тыс. и 10 тыс. рублей соответственно.

Таким образом, увеличение длины трещины для низкопроницаемых коллекторов позволяет получить не только максимальные приросты по дебитам, но и наиболее существенно снижает период ВСС, что особенно важно с экономической точки зрения для метода восстановления давления (КВД) на добывающих скважинах и метода падения давления (КПД) на нагнетальных скважинах, когда для проведения исследования необходимо останавливать скважину.

### Литература

1. Каневская Р.Д. Математическое моделирование разработки месторождений нефти и газа с применением гидравлического разрыва пласта. М.: ООО «Недра-Бизнесцентр». - 1999, - 212 с.
2. Хайруллин М. Х., Хисамов Р. С., Шамсиев М. Н., Бадертдинова Е. Р. Гидродинамические методы исследования вертикальных скважин с трещиной гидроразрыва пласта. М.: - Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2012. - 84 с.
3. Ерофеев А.А., Ильчибаев А.А. Оценка влияния ствола скважины по результатам интерпретации гидродинамических исследований скважин Шагиртско-Гожанского месторождения. ISSN 2224-9923. Вестник ПНИПУ. Геология. Нефтегазовое и горное дело. 2013. № 6
4. Бейтмен Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований. Том 1. М.: 1969, Наука, - 342 с.
5. John G. Evans. The Use of Pressure Buildup Information to analyze Non-Respondent vertically fractured oil wells. SPE 3345., 1971.

© Емельянов А.Г., Хабибуллин И.Л., 2016 г.

УДК 621.391.63

### ПРОЕКТИРОВАНИЕ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ НА УЧАСТКЕ С. МРАКОВО - С. ПОДГОРНОЕ

Идельбакова Р.В., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Оптическое волокно в настоящее время считается самой совершенной физической средой для передачи информации, а также самой перспективной средой для передачи больших потоков информации на значительные расстояния.

Целью данного проекта является создание современной телекоммуникационной сети в интересах населения, организация качественной связи для передачи информации различного вида между селами Мраково – Подгорное, в том числе для транзитных информационных потоков.

Реализация проекта обеспечит население и производственную сферу села Мраково и Подгорное необходимым количеством качественных цифровых каналов. Для этого необходимо проложить оптическую линию связи от районного центра Мракова до села Подгорное.

Транспортная сеть связи построена на оборудовании синхронной цифровой иерархии уровня STM-16. В работе сделан выбор транспортной сети и цифрового оборудования – мультиплексора Cisco ONS 15454 MSPP и маршрутизатора Cisco 7606.

Маршрутизатор Cisco 7606 обеспечивает производительность коммутации на уровне 480 Гбит/с и пропускную способность 40 Гбит/с на слот. При этом маршрутизатор обеспечивает достаточную производительность для организации граничных сегментов сетей IP/MPLS. 6-слотовая компактная (занимающая 1/6 стойки) система централизованно обрабатывает 30 млн. пакетов/с, а также оснащено распределенной системой обработки, позволяющей обеспечить работу сетей Gigabit Ethernet и 10 Gigabit Ethernet. [4]

Село Мраково входит в кольцо SDH и DWDM системы. Для выделения необходимого трафика в с.Мраково установлен маршрутизатор Cisco 7606.

В работе сделан выбор транспортной сети и цифрового оборудования – мультиплексора Cisco ONS 15454 MSPP . Этот мультиплексор имеют возможность масштабирования до уровня STM-64.

Платформа Cisco ONS 15454 MSPP позволяет перейти к интеллектуальным и очень успешным городским и региональным сетям DWDM, обеспечивающим широкий набор сервисных интерфейсов, прозрачность предоставляемых услуг, гибкие топологии и простое функционирование.[4]

Платформа ONS 15454 SDH MSPP (Multiservice Provisioning Platform) фирмы Cisco Systems «закрывает» все сегменты транспортных сетей - от магистрали до оборудования помещений заказчика. Управление осуществляется с помощью единой системы Cisco Transport Manager. [4]

Произведенный анализ показал, что наиболее перспективным является выбор системы передачи - Cisco ONS 15454. Мультиплексоры этой компании отличаются высокой надежностью, по своим техническим характеристикам полностью подходят для проектируемой линии.[4]

Платформа Cisco ONS 15454 MSPP поддерживает широкий спектр стандартных услуг в одном устройстве, включая:

- транспорт собранных низкоскоростных потоков DS1/E1 в оптическом канале на скорости 2,5 и 10 Гбит/с;

-транспорт оптических каналов и сбор потоков SDH: STM-1, STM-4, STM-16 и STM-64;

-услуги по организации транспорта для систем хранения данных: 1 и 2 Гбит/с Fibre Channel, FICON и ESCON;

-услуги по передаче данных: выделенные линии, коммутируемый или базирующийся на оптических каналах транспорт трафика 10/100/1000 BaseT;

-услуги по транспорту видеосигналов: поддержка D1 и телевидения высокого качества ( HDTV). [4]

В результате анализа проектируемого участка был выбран маршрут прохождения трассы кабеля непосредственно вдоль автомобильной дороги, связывающий оконечные пункты проектируемой линии. Этот маршрут является оптимальным, поскольку предлагает минимальное количество пересечений кабельной магистрали с реками, озерами и прочими преградами. Общая протяженность данного участка составляет 30 км.

По расстоянию между узлами коммутации и скорости передачи наиболее предпочтительно стандартное одномодовое волокно SMF-28e фирмы Corning Inc со ступенчатым показателем преломления на длину волны 1310 нм.

Эксплуатационные характеристики: [3]

Диаметр сердцевин, мкм	8,2
Длина волны с нулевой дисперсией, нм	1313

Геометрические размеры волокна: [3]

Диаметр волокна, мкм	125±0.7
----------------------	---------

Концентричность сердцевина/волокно, мкм	≤0.5
Некруглость волокна, %	≤0.7

Зависимость затухания от длины волны: [3]

Длина волны, нм	Максимальное значение затухания, дБ/км
1310	0.33~0.36
1550	0.19~0.20
1625	0.20~0.23

Отличная геометрия волокна SMF-28e, надежное покрытие и лучшие в классе изгибные характеристики дают большие преимущества при его использовании, а также значительно облегчают его монтаж. Волокно совместимо с существующими сетями, работающими на стандартном одномодовом волокне предыдущего поколения. [3]

Это одномодовое оптическое волокно широкого применения в первую очередь предназначенное для городских сетей и сетей доступа. Волокно соответствует рекомендации ITU-T G.652.D, а так же полностью совместимо с ранее проложенными стандартными одномодовыми волокнами. [3]

Применение волокна SMF-28e позволяет построить широкополосное соединение абонента домашней сети с магистральными сетями.

В качестве направляющей системы выбран волоконно-оптический кабель Российского производства компании Москабель-Fujikura, кабель волоконно-оптический с одномодовым волокном типа ОМЗКГЦ-10-01-0,36-6-(4,0). Этот кабель по своим техническим характеристикам наиболее подходит для строительства данной магистрали.

Расчёт длины регенерационного участка:

$$L_{PV} = \frac{\alpha - \alpha_3 - A_p \cdot n_p + A_H}{\alpha + \frac{A_H}{l_c}} = \frac{18 - 4 - 0,5 \cdot 2 + 0,1}{0,36 + \frac{0,1}{6}} = 34,8 \text{ км}$$

По данному расчету можно сделать вывод о том, что на данном участке не требуется установка дополнительных оптических усилителей, так как длина участка составляет 30 км.

Расчет максимальной длины регенерационного участка с учетом дисперсионных свойств волокна:

$$L_{PY_{\max \sigma}} = \frac{0,25}{\sigma \cdot B'} = \frac{0,25}{0,85 \cdot 10^{-12} \cdot 2488,32 \cdot 10^6} = 118 \text{ км}$$

По расчетам длина РУ с учетом дисперсии превышает длины трассы, поэтому отсутствует необходимость установки компенсаторов дисперсии.

Таким образом, видно, что участке с.Мраково – с.Подгорное проектируемой ВОЛС укладываются в границы и по энергетическим и по дисперсионным характеристикам.

Схема организации связи разрабатывается на основе размещения оконечных пунктов, технических возможностей аппаратуры, технического задания с целью получить наиболее экономичный вариант организации необходимого числа каналов тональной частоты, ОЦК или цифровых потоков более высокого порядка между соответствующими населенными пунктами.

Проектируемая схема организации связи между населенными пунктами с.Мраково-с.Подгорное построена на мультиплексах Cisco ONS-15454, поддерживающих передачу данных со скоростью 2,5Гбит/с, что соответствует уровню STM-16.

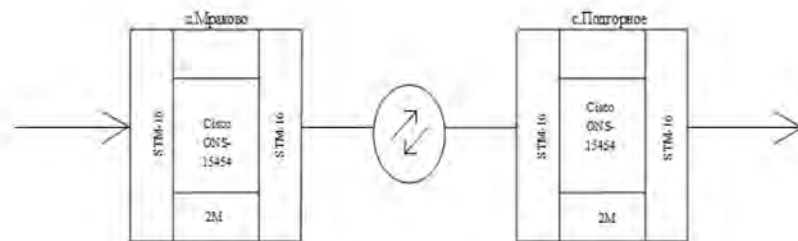


Схема организации связи

В оптическом кабеле используются 6 волокон: два рабочих (один на прием, другой на передачу), два – на нужды МЧС (ГО ЧС) и два – в резерве.

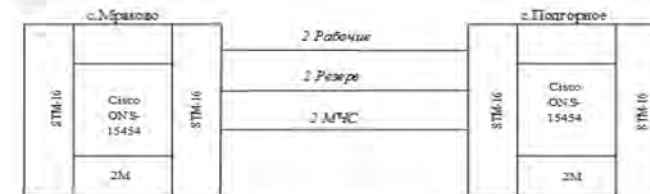


Схема распределения оптических волокон

В научной работе разработана высокоскоростная волоконно-оптическая линия связи между населёнными пунктами с.Мраково – с.Подгорное с использованием SDH оборудования уровня STM-16 производства фирмы «Cisco» - ONS 15454 маршрутизатора Cisco 7606.

В результате выполненной работы выбрана оптимальная трасса прокладки оптического кабеля (ОК). В работе предусмотрено использовать оптический кабель типа ОМЗКГЦ производства компании Москабель-Fujikura .

Разработана схема организации связи, схема распределения оптических волокон.

### Литература

1. Лопатюк А. В. Оптические направляющие среды и пассивные компоненты ВОЛС: Учебное пособие/ А.В. Лопатюк. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2011. –104 с.
2. Слепов Н.Н. Синхронные цифровые сети SDH.-М.,1997.-149с.
3. Фирма Corning[электронный ресурс] –URL: <http://www.corningfiber.com>.
4. Фирма Cisco [электронный ресурс]-URL: <http://www.cisco.com>.
5. Шарле Д.Л. Оптические кабели российского производства. - /Вестник связи/, 2000. № 9 с.68., ил.

© Идельбакова Р.В., Лопатюк А.В., 2016 г.

## МОДЕРНИЗАЦИЯ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕДАЧИ НА УЧАСТКЕ С. ИСЯНГУЛОВО - С. ИДЕЛЬБАКОВО

Исакаева Ю.И., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время телекоммуникационная индустрия претерпевает беспрецедентные изменения, что является следствием бурного развития Internet технологий и разнообразных сетевых приложений. Поэтому одним из основных требований, предъявляемых к транспортным сетям для передачи данных, является возможность быстрого увеличения их пропускной способности в соответствии с ростом объемов трафика.

Целью данной работы является модернизация волоконно-оптической системы передачи между характеризуемыми пунктами.

Расстояние между населенными пунктами 87 км. Связь организована посредством SDH мультиплексоров по схеме точка-точка. Сегмент сети, связывающий два узла А и В, или топология "точка - точка", является наиболее простым примером базовой топологии SDH сети.

Существующая на рассматриваемом участке система Marconi OMS 1240 обеспечивает скорость цифрового потока 622,08 Мбит/с, что соответствует уровню STM-4.

Компактная платформа обеспечивает оптимальные решения для городских и магистральных сетей и сетей доступа. Система способна передавать большие объемы трафика Ethernet, STM-1, STM-4 и каналов доступа 2 Мбит/с в сочетании с исключительно компактными размерами.[2]

В данной работе предусматривается передача кабельного телевидения, транзитных потоков и интернета Ethernet трафиком со скоростью 1 Гбит/с.

Для обеспечения возможного увеличения трафика выбираем систему передачи уровня STM-16.

Для реализации проекта выбираем мультиплексоры семейства ONS-15454 производства фирмы Cisco. Эти мультиплексоры имеют возможность масштабирования до уровня STM-64.

Мультисервисная оптическая транспортная платформа Cisco ONS 15454 MSPP предлагает транспортные возможности нового поколения и является ключевым элементом современных оптических сетей.[3]

ONS 15454 SDH поддерживает следующие передовые функциональные возможности:

- Агрегирование и транспорт услуг от E1 до STM64;

- Более эффективное использование пропускной способности за счет коммутации Ethernet 10/100/1000 Мбит/с;

- Поддержка широкого спектра клиентских интерфейсов – от 100 Мбит/с до 10 Гбит/с с возможностью перехода к каналам 40 Гбит/с.[3]

По мере развития технологии производства пассивных и активных компонент ВОСП одномодовое волокно вытесняет многомодовое благодаря главному преимуществу: отсутствию межмодовой дисперсии и сохранению пространственной когерентности. Это позволяет обеспечивать очень высокую информационную пропускную способность одномодового волокна. Поэтому, при выборе волокна для обеспечения передачи информации на относительно большие расстояния выбор должен быть за одномодовым волокном.

По расстоянию между узлами коммутации и скорости передачи наиболее предпочтительно улучшенное одномодовое оптическое волокно (ESMF).

Улучшенное одномодовое оптическое волокно фирмы Draka (ESMF) имеет усовершенствованные эксплуатационные на длинах волн от 1260 нм до 1625 нм.[4]

Свойства:

- Низкий уровень затухания на 1383 нм (водный пик);
- Низкая чувствительность к водороду;
- Низкий PMD 0.06 пс/ $\sqrt{\text{км}}$  расчётное значение линии связи;
- Низкий уровень затухания на 1460 нм ( $< 0.25$  дБ/км) .

Геометрические характеристики:[4]

Диаметр волокна, мкм	125±0.7
Концентричность сердцевина/волокно, мкм	≤0.5
Допуск на некруглость волокна, %	≤0.7

Оптические характеристики:[4]

Затухание	Максимальное значение, дБ/км
Затухание на 1310 нм	0,33-0,35
Затухание на 1460 нм	0,25
Затухание на 1550 нм	0,19-0,21
Затухание на 1625 нм	0,20-0,23

Хроматическая дисперсия:[4]

Длина волны, нм	Хр. дисперсия ,пс/нм*км
1285-1330	≤3
1550	≤ 18,0
1625	≤ 22,0

Широкий рабочий диапазон ESMF увеличивает потенциальные возможности ОВ для будущего использования и позволяет передавать голосовые сигналы, данные и видеосигналы. Запатентованное покрытие ColorLock™ обеспечивает оптимальные эксплуатационные качества волокна, надежность и износостойкость даже в жестких внешних условиях. Волокно соответствует Требованиям G.652.D Международного телекоммуникационного союза (ITU-T).[4]

Более жесткие геометрические характеристики, низкий уровень затухания и PMD позволяют прекрасно использовать ESMF в магистральных, городских, телекоммуникациях, кабельном телевидении и коммунальных сетях. ESMF и стандартное одномодовое волокно (SMF) полностью взаимозаменяемы.[3]

Длина регенерационного участка ВОСП находится 2 параметрами: суммарным затуханием регенерационного участка и дисперсией сигнала.

Расчёт энергетической длины регенерационного участка на ЭКУ:

$$l_{py} = \frac{\mathcal{E} - A_p \cdot n_p + A_n}{\alpha + \frac{A_n}{l_c}} ;$$

$$l_{py} = \frac{34 - 6 - 0,5 \cdot 2 + 0,1}{0,22 + \frac{0,1}{4}} = 110,61 \text{ км.}$$

Расчёт длины регенерационного участка с учётом энергетического запаса системы показывает, что не требуется установка дополнительных оптических усилителей, т.к длина участка составляет 87 км.

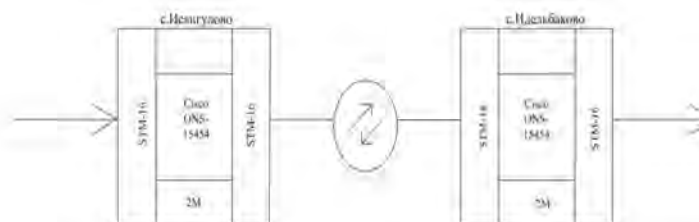
Расчёт дисперсионной длины регенерационного участка :

$$l_{py} = \frac{0,25}{0,9 \cdot 10^{-12} \cdot 2488,32 \cdot 10^6} = 113,46 \text{ км,}$$

По расчётам длина регенерационного участка с учётом дисперсии превышает длину трассы, поэтому отсутствует необходимость установки компенсаторов дисперсии.

Схема организации связи разрабатывается на основе размещения конечных пунктов и технических возможностей аппаратуры.

Проектируемая схема организации связи между селом Исянгулово и с. Идельбаково построена на мультиплексорах Cisco ONS 15454, поддерживающих передачу данных со скоростью 2,5 Гбит/с ,что соответствует уровню STM-16.



В работе была поставлена следующая задача: модернизировать высокоскоростную волоконно-оптическую систему передачи между с.Исянгулово и с.Идельбаково.

В ходе выполнения выбрана система передачи уровня STM-16 SDH, реализованный на базе синхронных мультиплексоров фирмы «Cisco» - ONS 15454, разработаны схема организации связи .Из расчетных данных следует, что участки с.Исянгулово – с.Идельбаково модернизации ВОСП укладываются в границы по энергетическим и по дисперсионным характеристикам.

### Литература

1. Лопатюк А. В. «Оптические направляющие среды и пассивные компоненты ВОЛС»: Учебное пособие/ Уфа: РИЦ БашГУ, 2011.- 104с.
2. Фирма Marconi[электронный ресурс]–URL: <http://www.telecor.ru>.
3. Фирма Cisco[электронный ресурс]-URL: <http://www.cisco.com>.
4. Фирма Draka[электронный ресурс]-URL: <http://tdvniikp.ru>.

© Исакаева Ю.И., Лопатюк А.В, 2016 г.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСКРЫТИЯ ТРЕЩИНЫ В СЛОИСТО-НЕОДНОРОДНОМ ПЛАСТЕ

<sup>1</sup>Кабанова П.К., <sup>2</sup>Аксаков А.В.

<sup>1</sup>Башкирский государственный университет

<sup>2</sup>ОАО «РН-УфаНИПИнефть», г. Уфа, Россия

### Введение

На сегодняшний день гидроразрыв пласта (ГРП) известен как один из самых распространенных методов нефтеотдачи. ГРП, основанный на закачке в пласт флюида под высоким давлением, способствует раскрытию естественных или образованию искусственных трещин.

Для моделирования деформации горной породы существует несколько основных моделей: двумерные (2D), трехмерные (3D), псевдотрехмерные (P3D) и планарные (PL3D)[1]. Поскольку некоторые из моделей вследствие упрощения расчетов имеют лишь приближенные решения, возникает необходимость исследования всех методов, создания более точной численной модели и построение метода решения.

В данной работе исследуется профиль раскрытия вертикальной трещины ГРП с закрепленными концами ( $-c < y < c$ ) методом численного моделирования.

### Постановка задачи

Рассматривается пласт, для которого характерна слоистая неоднородность. Каждый слой имеют свои, постоянные по сечению слоя, модуль упругости и коэффициент Пуассона (рис. 1).

Считаем, что раскрытие трещины обеспечивается постоянным давлением жидкости внутри трещины, а также гидростатическим давлением жидкости.

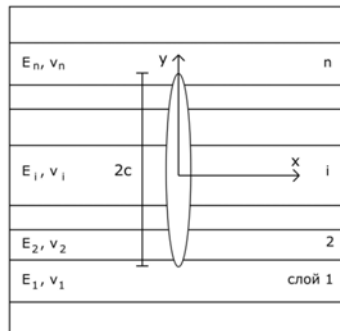


Рис. 1. Трещина в бесконечном слоисто-неоднородном пласте

### Математическая модель

Математическая модель [2] для данной задачи включает дифференциальное уравнение равновесия в частных производных (1), обобщенный закон Гука (2), соотношение Коши для случая малых деформаций (3). Граничные условия учитывают, что на бесконечности все смещения и напряжения равны нулю (5,6), концы трещины закреплены (7), а раскрытие происходит за счет постоянного давления и гидростатического давления жидкости внутри трещины (4). Границы расчётной области ( $-l_x < x < l_x$ ,  $-l_y < y < l_y$ ) выбираются достаточно далеко от трещины.

$$-\sigma_{ij,j} = f_i, \quad (1)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} u_{k,k} + 2\mu \varepsilon_{ij}, \quad (2)$$

$$\varepsilon_{ij}(\vec{u}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

Граничные условия:

$$\sigma_{xx} = -(p - \rho g y), \quad x=0, -c < y < c \quad (4)$$

$$u_i(x, -l_y) = u_i(x, l_y) = 0 \quad (5)$$

$$u_i(-l_x, y) = u_i(l_x, y) = 0 \quad (6)$$

$$u_i(x, -c) = u_i(x, c) = 0 \quad (7)$$

где  $\sigma_{ij}$  – тензор напряжений в точках поверхности тела,  $f_i$  – объемная сила (сила тяжести),  $\varepsilon_{ij}$  – тензор деформаций,  $u_i$  – проекции вектора перемещений,  $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ ,  $\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$  – коэффициенты Ламе,  $E$  –

модуль Юнга,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$  – символ Кронекера,  $p$  – давление жидкости внутри трещины,  $\rho$  – плотность жидкости,  $c$  – полудлина трещины.

Задача решалась с использованием метода конечных элементов, реализованного в пакете FreeFem++ [3].

### Проверка численной реализации

Для проверки адекватности численной реализации модели была рассмотрена задача о нахождении раскрытия трещины в изотропном теле под действием постоянного внутреннего давления.

Математическая модель:



$$-\sigma_{ij,j} = 0 \quad (8)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \epsilon_{k,k} + 2\mu \epsilon_{ij} \quad (9)$$

$$\epsilon_{ij}(\bar{u}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (10)$$

$$u_i(0, -c) = u_i(0, c) = 0 \quad (11)$$

$$u_i(x, -l_y) = u_i(x, l_y) = u_i(-l_x, y) = u_i(l_x, y) = 0 \quad (12)$$

$$\sigma_{xx} = -p, \quad x=0, -c < y < c \quad (13)$$

Аналитическим решением для данной задачи является решение Снеддона для раскрытия трещины под внутренним давлением [4]:

$$w(y) = \frac{2(1-\nu^2)}{E} p \sqrt{c^2 - y^2} \quad (14)$$

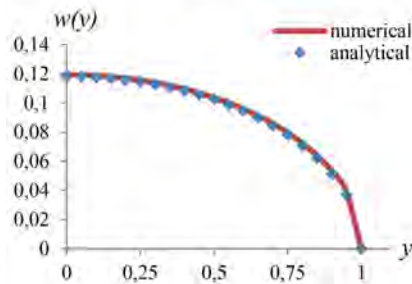


Рис. 2. Графики ширины раскрытия трещины в однородном теле

Из графиков видно, что имеет место хорошее согласование результатов численного расчета с аналитическими. Таким образом, метод, реализованный в коде, можно считать пригодным для исследования раскрытия трещины в слоисто-неоднородном пласте.

#### Результаты численного расчета

Построенный расчетный модуль позволяет исследовать трещину, величину ее раскрытия в зависимости от заданных параметров пласта.

На рис. 2) представлены графики раскрытия трещины в однородном (1) и 5-слойных пластах (2, 3) с различными значениями параметров упругости пласта (модуля Юнга и коэффициента Пуассона) (табл. 1).

Таблица 1. Параметры упругости пластов (средние по области).

Пласт	$E_{cp}$ , кПа	$\nu_{cp}$
1	4e6	0.3
2	5.2e6	0.276
3	6.2e6	0.258

Из графиков видно, что в пластах, сложенных горными породами с меньшим модулем Юнга и большим коэффициентом Пуассона, величина раскрытия больше.

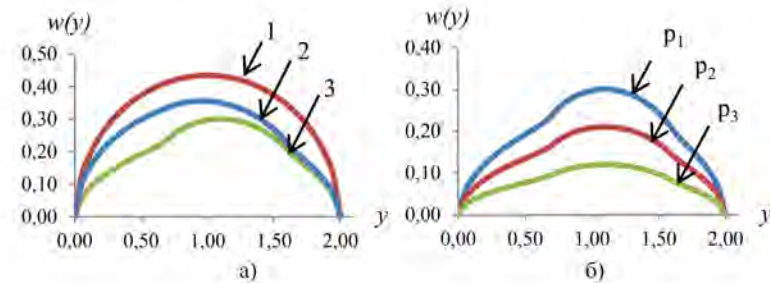


Рис. 2. Графики ширины раскрытия трещины  
а) ( $p = \text{const}$ ); б) ( $p_1 > p_2 > p_3$ ) ( $E, \nu = \text{const}$ )

Одним из параметров, значительно влияющим на степень раскрытия трещины, является величина давления жидкости внутри трещины. На рис.2б) показано раскрытие трещины при различных значениях внутреннего давления.

Из графиков видно влияние значения давления жидкости внутри трещины на величину раскрытия. Чем больше давление, оказываемое жидкостью на стенки трещины, тем больше ширина раскрытия этой трещины.

Наиболее простыми моделями, которые учитывают неоднородность пласта, являются псевдотрехмерные модели трещин. В литературе [5, 6] при рассмотрении данных моделей для расчета раскрытия трещины в сечении используется приближенная аналитическая формула:

$$w(y) = \frac{4}{E'} (p_{cp} - \sigma_n - \rho g y) \sqrt{y(h-y)} + \frac{4}{\pi E'} \sum_{i=1}^{n-1} \Delta \sigma_i \left[ \sqrt{y(h-y)} \arccos\left(\frac{h-2h_i}{h}\right) + (h_i - y) \operatorname{arcosh}\left(\frac{y}{|y-h_i|} \frac{h-2h_i}{h} + \frac{h_i}{|y-h_i|}\right) \right], \quad (15)$$

$$\Delta \sigma_i = \sigma_{i+1} - \sigma_i,$$

$$E' = \frac{E}{1 - \nu^2}$$

где  $E'$  – модуль плоской деформации,  $p_{cp}$  – давление на средней линии,  $\sigma_i$ ,  $\sigma_n$  – напряжение слоев  $i$  и верхнего слоя  $n$ ,  $h$  – высота трещины,  $h_i$  – высота от нижнего конца трещины до вершины  $i$ -го слоя.

На рис. 3 представлены графики раскрытия трещин, рассчитанные по численной схеме и по аналитической формуле (15).

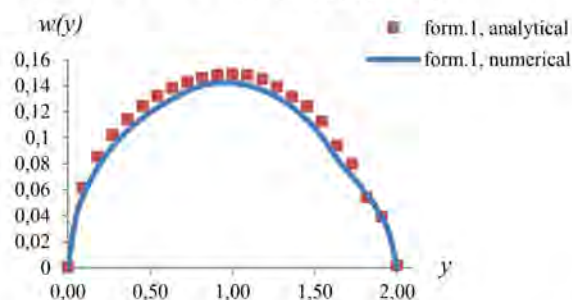


Рис. 3. Графики ширины раскрытия трещин, рассчитанные по численной и приближенной схемам

Сравнение результатов на рис. 3, полученных в результате численного и аналитического расчетов, производится при таких значениях модуля Юнга  $E$  и коэффициента Пуассона  $\nu$ , для которых  $E' = const$ , и приближенная формула (15) дает точный результат.

На рис.4. показаны графики раскрытия трещины, рассчитанные для реальных пластов по численной и приближенной схемам.

Из графиков следует, что формула (15) не применима для расчета раскрытия трещины в реальных пластах. Таким образом, для расчета в реальных пластах требуются более точные методы.

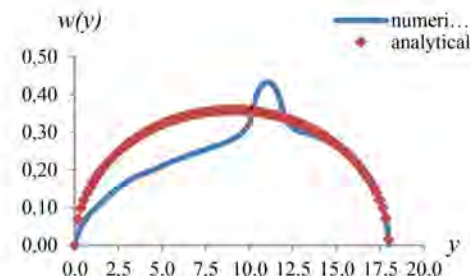


Рис. 4. Графики ширины раскрытия трещин, рассчитанные по численной и приближенной схемам для реального пласта

### Заключение

В результате проделанной работы было выполнено следующее:

1. была построена математическая модель для расчета профиля раскрытия трещины с закрепленными концами в слоисто-неоднородном пласте;
2. разработана численная модель расчета на основе метода конечных элементов;
3. на основе разработанной модели была реализована программа, позволяющая исследовать профиль раскрытия трещины;
4. исследовано раскрытие трещины в зависимости от давления жидкости внутри трещины и упругих свойств пласта;
5. исследована применимость приближенной схемы для расчета ширины раскрытия трещины.

### Литература

1. Экономидес М., Олайни Р., Валько П. Унифицированный дизайн гидроразрыва пласта. От теории к практике. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2007. – 236 с.
2. Морозов Н.Ф. Математические вопросы теории трещин.- М.: Наука, 1984. - 256 с.
3. Hecht F. FreeFem++. Third Edition, Version 3.19. Laboratoire Jacques-Louis Lions, Universit'e Pierre et Marie Curie, Paris.
4. Sneddon I. N. The distribution of stress in the neighbourhood of a crack in an elastic solid.— Proc. Roy. Soc.. ser. A. 1946. v. 187, p. 229—260.
5. Ching H. Yew, Xiaowei Weng. Mechanics of Hydraulic Fracturing, Second Edition - Gulf Professional Publishing, 2014. - 234.
6. E.V. Dontsov, A.P. Peirce, 2015. Proppant transport in hydraulic fracturing: Crack tip screen-out in KGD and P3D models. Int. J. Solids Struct. 63, 206–218.

© Кабанова П.К., 2016 г.

## ИССЛЕДОВАНИЯ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ В СОЕДИНЕНИЯХ $Mn_3-X-C$ ( $X = Ga, Ge, Sn, In$ ) ПЕРВОПРИНЦИПНЫМИ МЕТОДАМИ

Копылов Д.<sup>1</sup>, Соколовский В.<sup>1,2</sup>, Загребин М.<sup>1</sup>, Бучельников В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Россия

### Введение

В настоящее время тройные соединения карбидов  $Mn_3-X-C$  (где  $X$  – это такие элементы как Ga, Ge, Sn, In) привлекли к себе огромное внимание из-за их функциональных свойств (гигантское магнитосопротивление, магнитный эффект изменения объема, магнитокалорический эффект) и потенциального применения в технологиях магнитного охлаждения [1, 2].

Как правило, кристаллическая структура данных соединений относится к группе антиперовскитов с пространственной группой симметрии №221 ( $Pm-3m$ ), представленной на рис. 1.

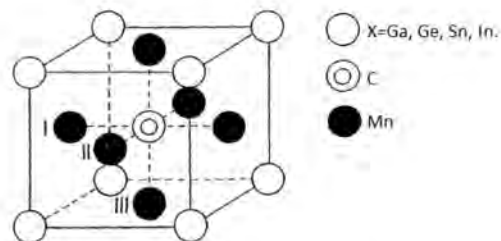


Рис. 1. Кристаллическая решетка соединения  $Mn_3-X-C$  ( $X = Ga, Ge, Sn, In$ )

Некоторые из них демонстрируют два магнитных перехода при нагреве: антиферро-ферромагнитный (АФМ-ФМ) и ферро-парамагнитный (ФМ - ПМ). Причем при первом переходе наблюдается изменение объема без изменения симметрии решетки, сопровождающийся скачкообразным изменением намагниченности [1,2].

Отметим, что на сегодняшний день, наиболее исследованы соединения с галлием. Например, согласно экспериментальной работе [3], температуры указанных переходов составляют 165K и 246K, соответственно. Кроме того, в работе [4] описывается соединение  $Mn_3-Sn-C$ , температура фазового перехода ФМ-ПМ составляет 260K.

Таким образом, исследование свойств данных сплавов, а именно основного состояния, магнитных и структурных свойств, а также влияние

различных добавок на температуру фазовых переходов и магнитокалорические свойства, представляет огромный интерес и актуальность выбранного исследования. В связи с этим, в данной работе представлены первопринципные исследования равновесных магнитных конфигураций, параметров решетки и магнитных моментов сплавов  $Mn_3-X-C$  (где  $X = Ga, Ge, Sn, In$ ).

### Методика расчетов

Для расчета электронной структуры мы воспользовались программным пакетом SPR-KKR [5], представляющим собой спин-поляризованный релятивистский метод Корринги-Кона-Ростокера. Для упрощения работы с пакетом использовался графический интерфейс XBAND, который содержит ряд основных функциональных возможностей, направленных на облегчение формирования исходных файлов.

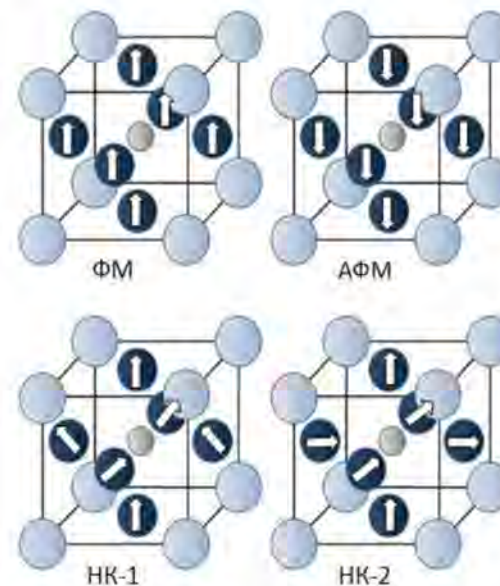


Рис. 2. Задаваемые спиновые конфигурации соединений

Текущие исследования были выполнены для различных магнитных конфигураций, в том числе и неколлинеарных (НК-1, НК-2). Расчеты выполнены при заданных начальных магнитных моментах, используя

сетку  $k$ -точек  $57 \times 57 \times 57$ . Количество итераций (NITER) для всех случаев составляло 1000, минимальная энергия ( $E_{min}$ ) 0,01 Ридберга. Структурная оптимизация выполнялась с использованием обменно-корреляционного потенциала в рамках приближения обобщенного градиента в формулировке Пердю, Бюрка и Эрнзерхофа (Perdew, Burke and Ernzerhof – PBE) [6]. Коллинеарные случаи были рассчитаны при помощи спин-поляризованного скалярно-релятивистского гамильтониана (SP-SREL), для неколлинеарных случаев использовался релятивистский (REL) гамильтониан.

На рис.2 приведены магнитные конфигурации, используемые в представленных расчетах.

### Результаты и их обсуждение

На рис. 3 представлены графики релаксаций кристаллических решеток для различных соединений  $Mn_3-X-C$  ( $X = Ga, Ge, Sn, In$ ).

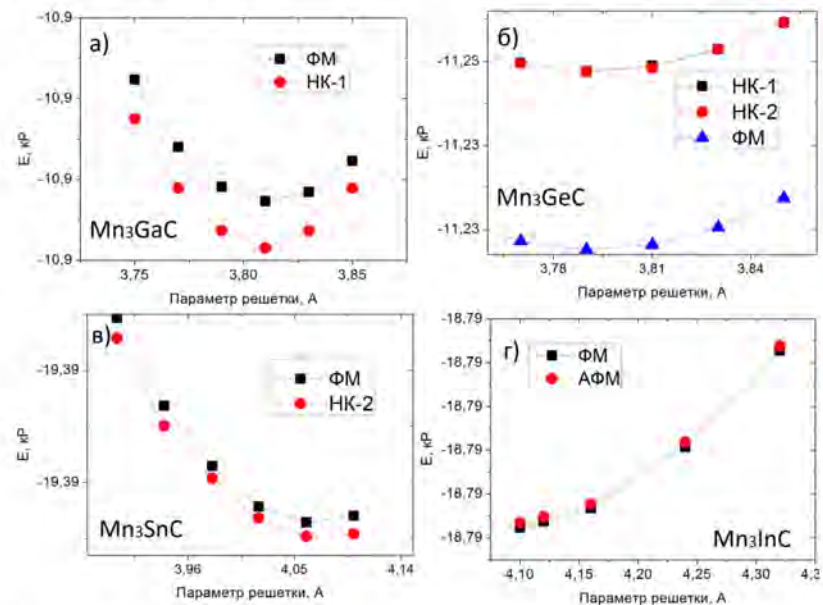


Рис. 3. Внутренняя энергия соединений  $Mn_3-X-C$  ( $X = Ga, Ge, Sn, In$ ) как функция параметра кубической решетки соединений, построенная для различных магнитных конфигураций

Из графиков можно видеть что для каждого соединения существуют свои наиболее энергетически выгодные спиновые конфигурации. Так, для соединения  $Mn_3GaC$  выгодна НК-1 конфигурация с равновесным параметром решетки 3,81 Å, для  $Mn_3GeC$  выгодна ФМ конфигурация с равновесным параметром решетки 3,79 Å, для  $Mn_3SnC$  – конфигурация НК-2 с равновесным параметром решетки 4,06 Å, и, наконец, для соединения  $Mn_3InC$  – ФМ конфигурация с равновесным параметром решетки 4,1 Å. Следует отметить, что полученные значения равновесных параметров хорошо соотносятся с опубликованными ранее [3,4].

На рис.4(а) представлены зависимости равновесного параметра решетки исследуемых сплавов от атомного радиуса и атомного номера заменяемых химических элементов. Можно сделать вывод, что с увеличением порядкового номера элемента увеличивается и равновесный параметр решетки. По-видимому, это связано с увеличением атомного радиуса химических элементов и числом валентных электронов.

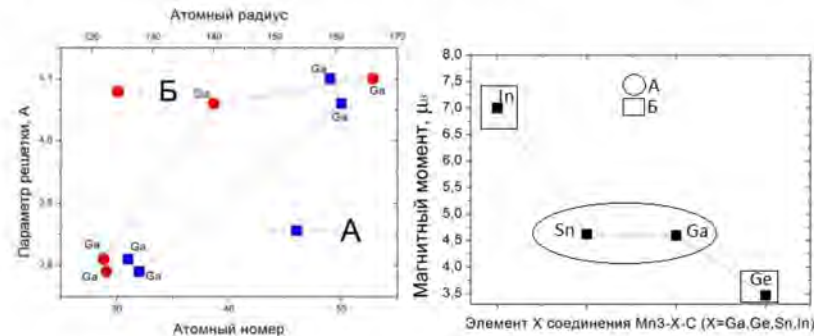


Рис.4. (а) Зависимости равновесных параметров  $Mn_3-X-C$  ( $X = Ga, Ge, Sn, In$ ) от атомного номера (А) и атомного радиуса (Б). (б) Зависимости полного магнитного момента соединений в зависимости от изменяемого элемента. Здесь, А - коллинеарная конфигурация, Б - неколлинеарная конфигурация

На рис. 4(б) представлена зависимость равновесного полного магнитного момента от элемента X в соединениях  $Mn_3-X-C$  ( $X = Ga, Ge, Sn, In$ ). Для наглядности, представленная зависимость построена от сплава, обладающего большим магнитным моментом к сплаву с меньшим магнитным моментом. Можно видеть, что соединения с более выгодными неколлинеарными конфигурациями, а именно  $Mn_3GaC$  и  $Mn_3SnC$ , имеют приблизительно одинаковый полный магнитный момент [3, 4], тогда как соединения с ферромагнитным упорядочением демонстрируют разные значения полного магнитного момента.

### Заключение

В ходе работы были проведены исследования соединений  $Mn_3-X-C$  ( $X = Ga, Ge, Sn, In$ ) первопринципными методами при помощи программного пакета SPRKKR. Результаты показали, что полученные равновесные параметры кристаллических решеток хорошо соотносятся с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что в сплавы  $Mn_3-(In, Ge)-C$  и  $Mn_3-(Sn, Ga)-C$  обладают ферромагнитным и неколлинеарным упорядочением, соответственно. Определены равновесные магнитные моменты соединений.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 14-02-01085, Российский научный фонд (РНФ) № 14-12-00570, и грант при президенте РФ № МК-8480.2016.2.

### Литература

1. Gschneidner K.A., Pecharsky V.K. and Tsokol A.O Recent developments in magnetocaloric materials // Rep. Prog. Phys. - 68. - P.1479-1539.
2. Dias. E.T., Priolkar K.R., Nigam A.K. Effect of carbon content on magnetostructural properties of  $Mn_3GaC$  // J. Magn. Magn. Mater. – 363. - P.140.
3. Cakir O. and Acet M. Reversibility in the inverse magnetocaloric effect in  $Mn_3GaC$  studied by direct adiabatic temperature-change measurements // Appl. Phys. Lett. -100. -202404. - P.3.
4. Y. B. Li, W. F. Li, W. J. Feng, Y. Q. Zhang, and Z. D. Zhang Magnetic, transport and magnetotransport properties of  $Mn_{3+x}Sn_{1-x}C$  and  $Mn_3Zn_ySn_{1-y}C$  compounds // Phys. Rev. - 72. – 024411. – P.3.
5. Ebert H., Kodderitzsch D. and Minar J. Calculating condensed matter properties using the KKR-Green's function method // Rep. Prog. Phys. – 74 – P.096501-48,
6. Perdew J.P, Burke K., Ernzerhof M. // Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Letters. - 77. - P. 3865–3868.

© Копылов Д., Соколовский В., Загребин М., Бучельников В., 2016 г.

УДК 621.391.63

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ СОЛИТОННОЙ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ

Лопатюк А.В., Маркушева А.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В данной работе приведены результаты исследования высокоскоростной солитонной ВОЛС и ее моделирование в компьютерной программе САПР LinkSim.

LinkSim представляет оптическую систему связи как связанный набор блоков, каждый из которых является компонентом или подсистемой в системе связи. В LinkSim используется блочно-ориентированный метод моделирования, который позволяет спроектировать практическую любую ВОЛС.

Солитон – структурно устойчивая, уединенная волна, распространяющаяся в нелинейной диспергирующей среде. Солитон – это импульс, который не изменяет своей формы по мере того, как он распространяется по волокну. Нелинейности волокна противодействуют накоплению дисперсии при распространении импульса по волокну. Оптический солитон является результатом баланса между дисперсией групповых скоростей (ДГС) и фазовой самомодуляцией (ФСМ).

Так как ВОЛС (рис. 1.) работает в солитонном режиме, необходимости в использовании ретрансляторов нет, однако из-за достаточно дальнего расстояния (1000 км) в работе используются оптические усилители. То есть линия подлежит восстановлению по энергетическому потенциалу, поэтому необходимо определить расстояние между каскадами усиления, это расстояние определяет скорость передачи, и обычно  $L$  изменяется как  $B^{-2}$ . Расчеты многокаскадного усиления показывают, что распространение солитонов на большие расстояния становится неустойчивым при  $L \lesssim 8 \cdot z_0$ , где  $z_0$  – период солитона. На практике следует ограничить  $L$  до величин  $L \lesssim 6 \cdot z_0$ .

Рассчитаем требуемые параметры:

Период солитона:

$$z_0 = \frac{\pi}{2} L_D = \frac{\pi T_0^2}{2 |\beta_2|} \quad (1)$$

где  $T_0$  – ширина импульса на уровне  $1/e$ ;

$\beta_2$  – дисперсия групповых скоростей.

Подставим данные:

$$z_0 = \frac{3,14 \cdot 100 \text{ пс}^2}{2 \cdot 7,7 \frac{\text{пс}^2}{\text{км}}} = 20,4 \text{ км} \quad (2)$$

Расстояние между усилителями:

$$L \lesssim 6 \cdot 20,4 \text{ км} \lesssim 122,3 \text{ км} \quad (3)$$



Рис. 1 Модель ВОЛП в компьютерной программе LinkSim

Результаты моделирования, полученные LinkSim, включают графики формы сигнала и глаз-диаграммы в любой точке внутри оптической линии связи, а так же графики частоты передачи ошибочных битов при различных параметрах внутри линии связи.

Характеристики сигналов в узловых точках системы:

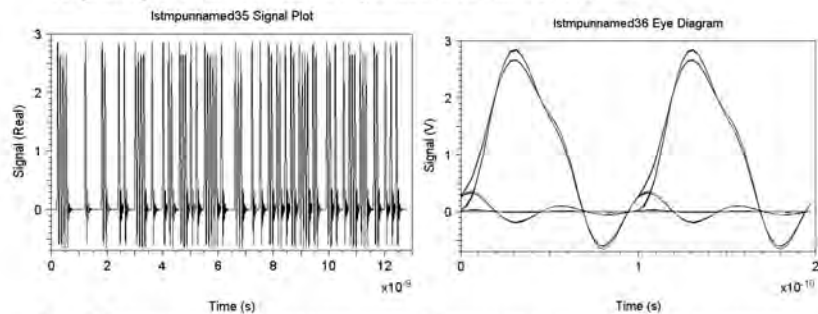


Рис. 2 Осциллограмма электрического сигнала на выходе сигнал-генератора (слева) и его глаз-диаграмма (справа)

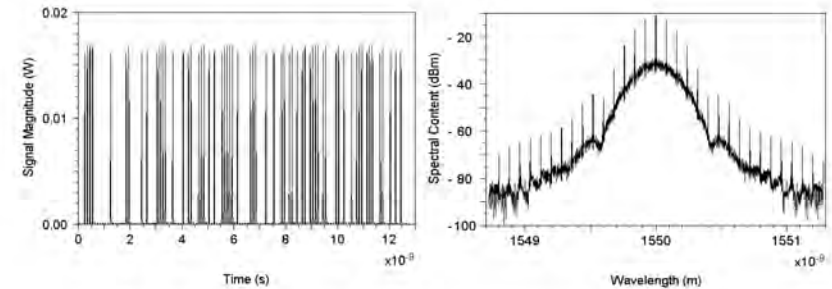


Рис. 3 Осциллограмма сигнала на выходе модулятора (слева), и его спектр по  $\lambda$  (справа)

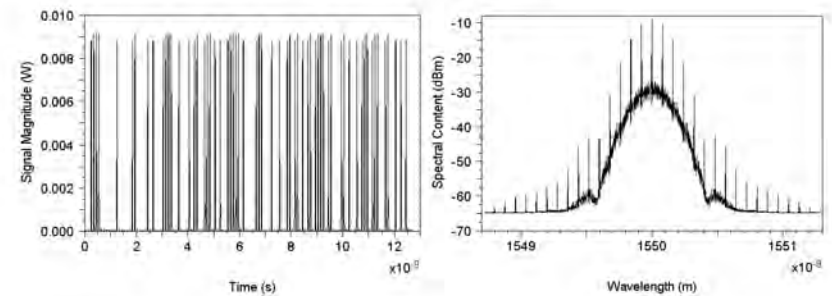


Рис. 4 Осциллограмма сигнала на выходе последнего усилительного участка (слева), и его спектр по  $\lambda$  (справа)

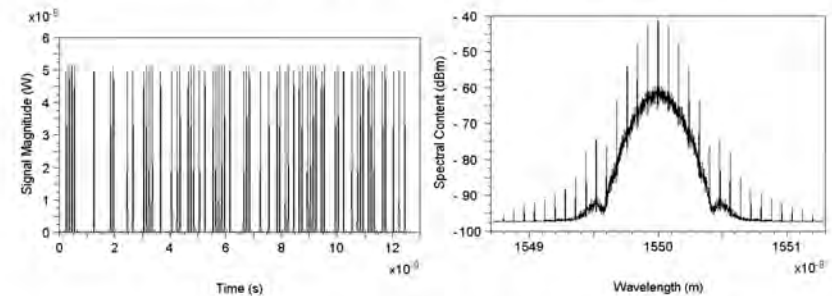


Рис. 5 Осциллограмма сигнала на выходе аттенюатора (слева) и его спектр по  $\lambda$  (справа)

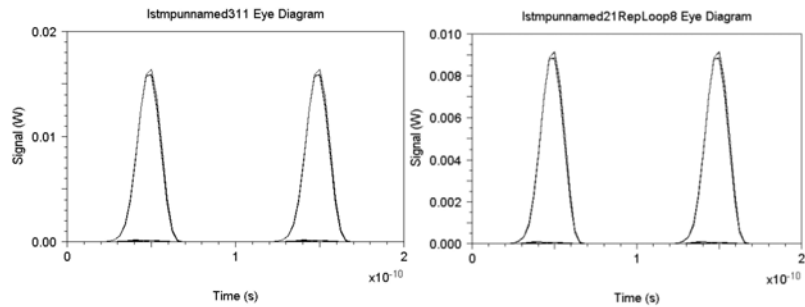


Рис. 6 Глаз-диаграмма сигнала с выхода лазера (слева) и с выхода последнего усилительного участка (справа)

Из приведенных выше рисунков видно, что сигнал на входе и выходе ВОЛП сильных отличий не имеет. Теперь, чтобы сигнал был принят максимально достоверно, он ослабляется до нужного уровня приема с помощью аттенюатора.

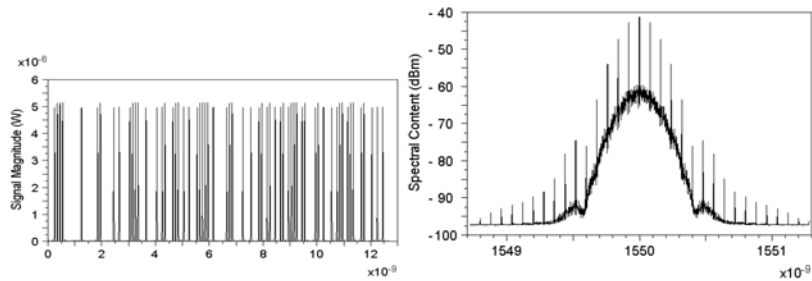


Рис. 7 Осциллограмма сигнала после аттенюатора (слева) и его спектр по  $\lambda$  (справа)

Чтобы проверить работоспособность системы нужно выявить коэффициент ее ошибок, для этого на выходе приемника установлен BER-тестер.

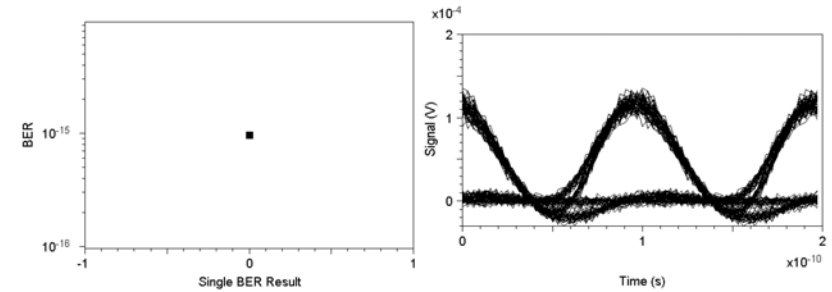


Рис. 8 График коэффициента ошибок (слева) и глаз-диаграмма сигнала на выходе ФП (справа)

Результат показания BER-тестера говорит о том, что работа системы соответствует сетевым стандартам.  $BER=10^{-15}$

В каждый элемент модели LinkSim проставлены параметры компонентов сети, что дало возможность представить функционирование системы с конкретными компонентами. На приемном конце для правильного распознавания потока информации фотоприемником установлен аттенюатор, который корректирует уровень входного сигнала.

Моделирование ВОЛП в программе LinkSim дает возможность не просто спроектировать необходимую линию передачи данных, но и в результате определенного анализа ее функционирования произвести оценку всех положительных и отрицательных сторон. Что было достигнуто с помощью рисуночной фиксации параметров элементов сети и графиков сигналов на каждом этапе преобразования последних.

© Лопатюк А.В, Маркушева А.М., 2016 г.

**ПРОЕКТИРОВАНИЕ 4 ГИГАБИТНОЙ ВОЛОКОННО-  
ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕДАЧИ НА УЧАСТКЕ  
УФА - НЕФТЕКАМСК**

Магзумьянова Л.Ф., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Целью данной работы является проектирование оптоволоконной линии связи исходя из заданных параметров:

Оптическая мощность источника излучения: 15 мВт;

Тип волоконного световода: NZDSF 8 λ;

Скорость передачи информации: 4000 Мбит/с;

Длина волны источника излучения: 1526-1565 нм;

Протяженность участка Уфа-Нефтекамск: 220 км.

В последнее десятилетие тип волокна с ненулевой смещенной дисперсией очень активно используется в ОК при построении транспортных сетей различных уровней с системами спектрального уплотнения. Одномодовое оптическое волокно с ненулевой смещенной дисперсией NZDSF в отличие от DSF оптимизировано для передачи не одной длины волны, а сразу нескольких длин волн (мультиплексного волнового сигнала) и наиболее эффективно может использоваться при построении магистралей «полностью оптических сетей» - сетей, на узлах которых не происходит оптоэлектронного преобразования при распространении оптического сигнала. Волокна NZDSF лучше всего подходят для работы систем плотного волнового мультиплексирования (DWDM) в диапазоне 1530–1565 нм с оптическими усилителями. Плотное волновое мультиплексирование DWDM (Dense Wavelength Division Multiplexing) - единственная магистральная технология, позволяющая добиться высочайшей скорости передачи данных по одному волокну из всех существующих, на данный момент, технологий.

Уплотнение сигналов по длине волны с применением оборудования DWDM (используется сетка частот с шагом 50 ГГц) обеспечивают возможность организации до 160 независимых оптических каналов в одном волокне. При этом по каждому каналу данные могут передаваться со скоростью от 100 Мбит/с до 100 Гбит/с.

Разработчики DWDM-систем стремились вместить в промежутке 1525–1565 нм как можно больше каналов. Для стандартизации набора оптических несущих систем DWDM с разносом 50 ГГц (около 0,4 нм) и 100 ГГц (около 0,8 нм) международный союз электросвязи (МСЭ) в октябре 1998 года выпустил рекомендацию ITU-T G.692. В ней предусмотрено разделение всей рабочей области оптического волокна на

диапазоны: L (longwavelength, длинноволновый) диапазон (1570 – 1625 нм), C (conventional, обычный) диапазон (1530 – 1570 нм) и S (shortwavelength, коротковолновый) диапазон (1460 – 1530 нм). В C-диапазоне при шаге 0,4 нм можно разместить до 100 каналов, что при скорости передачи в пределах 2,5 – 10 Гбит/с дает информационную емкость одного волокна 250 – 1000 Гбит/с. С развитием систем DWDM увеличивается количество передаваемых каналов, дальность передачи и скорость в каждом канале.

Преимущества DWDM:

1. Высокая пропускная способность;
2. Возможность значительного расширения ёмкости, масштабирования сети;
3. Передача трафика широкого спектра решений, от систем IP до оборудования SDH и других;
4. Совмещена гибкость управления относительно низкоскоростными каналами со скоростной передачей гигабитных потоков в основных магистралях;
5. Надёжность и отказоустойчивость;
6. Возможность передачи больших объемов данных на дальние расстояния.

В ходе работы было выбрано волокно марки True Wave. В данном волокне применяется специальный профиль показателя преломления в сердцевине, окруженной слоями перекрывающей оболочки из синтетической окиси кремния с различными показателями преломления, благодаря чему достигается низкое затухание и малая ненулевая дисперсия в рабочем диапазоне EDFA. Таким образом затраты на компенсацию дисперсии снижаются или устраняются вовсе. Кроме того, оно обладает очень низкой и стабильной дисперсией поляризованной моды (Polarization Mode Dispersion, PMD).

Максимальное затухание на длине волны 1550 нм составляет 0,22...0,25 дБ/км. В диапазоне 1525...1575 нм оно не превышает 0,27...0,3 дБ/км. Затухание при пике поглощения ОК (1383±3нм) не превышает 1,0 дБ/км. При скручивании кабеля затухание ОК на волне 1550 нм увеличивается: на 1 виток диаметром 32 мм приращение затухания не превышает 0,5 дБ; на 100 витков диаметром 75 мм - не более 0,05 дБ.

Хроматическая дисперсия в диапазоне 1530...1565 нм составляет: минимальная – 0,8 пс/нм\*км, максимальная – 4,6 пс/нм\*км. Максимальное значение коэффициента дисперсии поляризованной моды при 1550 нм не превышает 0,5 пс/ нм\*км, а типичное значение - не более < 0,1 пс/ нм\*км. Диаметр медового поля на длине волны 1550 нм составляет 8,4+0,6 мкм. Длина волны отсечки не превышает 1260 нм.



Энергетическая длина участка  $L_{\text{Э}}$  рассчитывается по формуле

$$P_{\text{ИМ}} - \alpha_{\text{И-ВС}} - N_{\text{И}} \alpha_{\text{И}} - \alpha_{L_{\text{Э}}} - \alpha_{\text{ВС-СД}} \geq P_{\text{ФДМ}} + \text{Э},$$

где  $P_{\text{ИМ}} = 10 \lg \frac{P_{\text{И}}}{P_0}$  - уровень мощности излучателя (в дБ м)

относительно уровня мощности  $P_0 = 1 \text{ мВт}$ ,

$$P_{\text{ИМ}} = 10 \lg \frac{15 \text{ мВт}}{1 \text{ мВт}} = 11 \text{ дБм};$$

$P_{\text{ФДМ}} = -53 + 10 \cdot \lg B$  - минимальный уровень мощности сигнала на входе фотодетектора (в дБ м) относительно уровня  $P_0 = 1 \text{ мВт}$ ,

$$P_{\text{ФДМ}} = -53 + 10 \cdot \lg 4000 = -17 \text{ дБм};$$

$\alpha_{\text{И-ВС}} = \alpha_f - 10 \lg [5,5(NA)^2]$  - потери на соединение излучатель - волоконный световод, дБ, где

$\alpha_f = 0,2 \text{ дБ}$  - френелевские потери на отражение от торца волокна,

$$\alpha_{\text{И-ВС}} = 0,2 - 10 \lg [5,5(0,17)^2] = 8,19 \text{ дБ};$$

$$N_{\text{И}} = \frac{L_{\text{Э}}}{L_{\text{СД}}} - 1 = \frac{L_{\text{Э}}}{5} - 1 - \text{число неразъемных соединений световод-}$$

световод.

Подставляя все найденные значения в формулу для расчета длины участка  $L_{\text{Э}}$ , получаем:

$$11 - 8,19 - 0,01 * \left(\frac{L_{\text{Э}}}{5} - 1\right) - 0,22 * L_{\text{Э}} - 1,2 \geq -17 + 5,$$

$$L_{\text{Э}} = 61,35 \text{ км}.$$

Число неразъемных соединений световод-световод:

$$N_{\text{И}} = \frac{L_{\text{Э}}}{L_{\text{СД}}} - 1 = \frac{61,35}{5} - 1 = 12.$$

2) По дисперсии  $L_{\text{Д}}$ :

Дисперсия, или уширение оптического сигнала в волоконном световоде,  $\sigma$  определяется следующим образом:

$$\sigma = (\sigma_{\text{меж}}^2 + \sigma_{\text{хр}}^2)^{1/2}.$$

Так как в одномодовых световодах межмодовая дисперсия отсутствует, то уширение импульса определяется хроматической дисперсией:

$$\sigma_{\text{хр}} = \sigma_{\text{в}} + \sigma_{\text{мат}} = \Delta\lambda * L[W(\lambda) + M(\lambda)].$$

где  $\Delta\lambda$  - ширина спектра источника излучения;  $M(\lambda)$  - удельная материальная дисперсия;  $W(\lambda)$  - удельная волноводная дисперсия;  $W(\lambda) + M(\lambda) = D(\lambda)$  - дисперсионный параметр волокна.

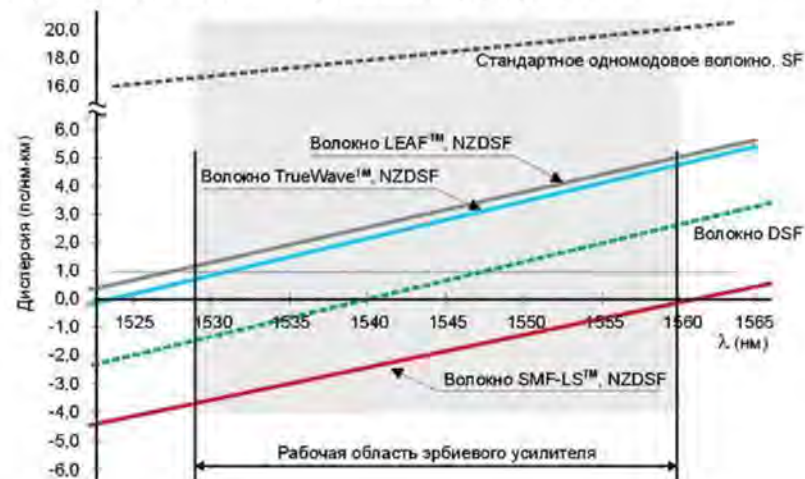


Рис. 1.1 Зависимость дисперсионного параметра D различных одномодовых ОВ в окне 1550 нм [3]

В соответствии с частотным планом для NZDSF волокна из рабочего интервала выбрали заданные длины волн:

$\lambda 1=1542,94$ нм	$\lambda 5=1546,18$ нм
$\lambda 2=1543,78$ нм	$\lambda 6=1546,93$ нм
$\lambda 3=1544,56$ нм	$\lambda 7=1547,76$ нм
$\lambda 4=1545,37$ нм	$\lambda 8=1548,51$ нм

Из рисунка 1 видно, что у волокна True Wave длина волны нулевой дисперсии 1522 нм.

Определим дисперсию для выбранных длин волн:

$$D(\lambda) = (\lambda - \lambda_0) \cdot S_0$$

$$D1(1542,94) = (1542,94 - 1522) \cdot 0,092 = 1,93 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$$

$$D2(1543,78) = (1543,78 - 1522) \cdot 0,092 = 2,00 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$$

$$D3(1544,56) = (1544,56 - 1522) \cdot 0,092 = 2,07 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$$

$$D4(1545,37) = (1545,37 - 1522) \cdot 0,092 = 2,15 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$$

$$D5(1546,18) = (1546,18 - 1522) \cdot 0,092 = 2,22 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$$

$$D6(1546,93) = (1546,93 - 1522) \cdot 0,092 = 2,3 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$$

$$D7(1547,76) = (1547,76 - 1522) \cdot 0,092 = 2,37 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$$

$$D8(1548,51) = (1548,51 - 1522) \cdot 0,092 = 2,44 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$$

Минимальная и максимальная дисперсии соответственно равны  $1,93 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$  и  $2,44 \text{ пс / км} \cdot \text{нм}$

Найдем длину регенерационного участка при максимальной дисперсии:

Значение хроматической дисперсии:

$$\sigma_{xp} = \Delta\lambda * L * D(\lambda)$$

$$\sigma_{xp} = 0,2 \text{ нм} * 1 \text{ км} * 2,44 \text{ пс / км} \cdot \text{нм} = 0,488 \text{ пс}$$

Среднеквадратичное удельное уширение импульса:

$$\sigma_y = \sigma_{xp} / L = 0,488 \text{ пс / км} = 0,488 \text{ пс / км}$$

Определим длину регенерационного участка по дисперсии из выражения:

$$L_D \leq \frac{0,25}{\sigma_y * B} = \frac{0,25}{0,488 * 10^{-12} \text{ с} * 4000 * 10^6 \text{ бит / с}} = 128 \text{ км}$$

Найдем длину регенерационного участка при минимальной дисперсии:

Значение хроматической дисперсии:

$$\sigma_{xp} = 0,2 \text{ нм} * 1 \text{ км} * 1,93 \text{ пс / км} \cdot \text{нм} = 0,386 \text{ пс}$$

Среднеквадратичное удельное уширение импульса:

$$\sigma_y = \sigma_{xp} / L = 0,386 \text{ пс / км} = 0,386 \text{ пс / км}$$

Определим длину регенерационного участка по дисперсии из выражения:

$$L_D \leq \frac{0,25}{\sigma_y * B} = \frac{0,25}{0,386 * 10^{-12} \text{ с} * 4000 * 10^6 \text{ бит / с}} = 162 \text{ км}$$

В данной работе я рассчитала длину регенерационного участка волоконно-оптической системы передачи информации на участке Уфа-Нефтекамск по энергетическому потенциалу системы  $L_{\text{э}}$  и по дисперсии в волоконных световодах  $L_D$ .

По расчётам я получила следующие результаты:

- длина участка регенерации, рассчитанная по энергетическому потенциалу системы равна:  $L_{\text{э}} = 61,35 \text{ км}$  ;
- дисперсионная длина равна:  $L_D = 128 \text{ км}$  ;
- число неразъемных соединений  $N_n = 12$  .

Это значит, что при прокладке ОВ с такими параметрами оптические усилители необходимо устанавливать не более чем через каждые 61,35 км.

Так же, при расчете длины регенерационного участка по дисперсии, я выяснил, что минимальное расстояние  $L_D = 128 \text{ км}$  , что означает, что при прокладке ОВ с такими параметрами дисперсии компенсаторы нужно устанавливать не более чем через каждые 128 км.

## Литература

1. Иванов А.Б. «Волоконная оптика: компоненты, системы передачи, измерения» - М.: Компания САЙРУС СИСТЕМС, 1999.
2. Убайдулаев Р.Р. «Волоконно-оптические сети» - М.: Эко-Трендз, 2000.
3. Лопатюк А.В. «Методические указания и задание по курсовой работе» Уфа, БашГУ, 2004.

© Магзумьянова Л.Ф., Лопатюк А.В., 2016 г.

УДК 004.942

## АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ АНАЛИЗ ВЗАИМОВЛИЯНИЯ СКВАЖИН КАК ИНСТРУМЕНТ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ИСТОЧНИКОВ ОБВОДНЕНИЯ

Марьян Д.Ф.<sup>1</sup>, Иващенко Д.С.<sup>2</sup>, Сахибгареев Э.Э.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Башкирский государственный университет

<sup>2</sup> ООО «РН-УфаНИПИнефть», г. Уфа, Россия

При разработке низкопроницаемых коллекторов с использованием заводнения отмечено, что после перевода добывающих скважин в нагнетание приемистость во многих случаях значительно превосходит дебит жидкости, который регистрируется во время отработки на нефть (в ряде случаев более чем в 30 раз). Это связывается с образованием техногенных трещин в нагнетательных скважинах. В присутствии закачки с течением времени такая трещина продолжает расти, а эффект роста трещины называется эффектом автоГРП. Как правило, резкий скачок дебита жидкости и обводненности добывающей скважины связан именно с этим эффектом: через трещину в пласте закачиваемая в пласт жидкость попадает в добывающие скважины, что резко снижает продуктивность по нефти, и, соответственно, увеличивает затраты нефтегазовых компаний на восстановление режима работы. Каждая нагнетательная скважина может влиять не только на ближайшее окружение, но и на добывающие скважины из соседних элементов разработки. Установление взаимосвязи между скважинами позволит предсказать влияние изменения закачки на добычу. Главной задачей автоматизированного анализа взаимовлияния скважин является получение инструмента, который позволит надёжно воссоздавать и предсказывать ситуации с прорывом закачиваемой воды в добывающие скважины по трещинам автоГРП.

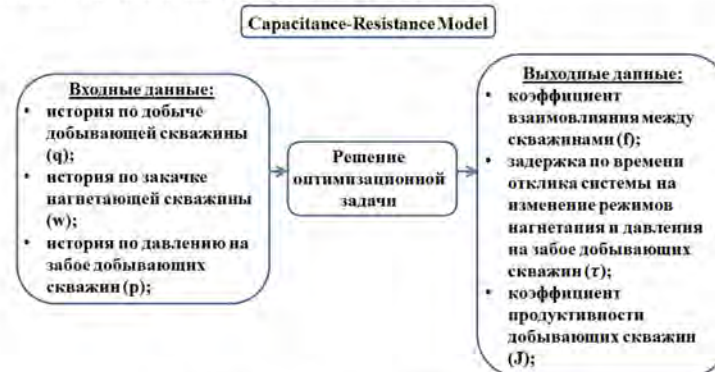


Рис. 1: Схема работы модели CRM

Решение данной задачи в реальном времени может стать трудновыполнимым, если учитывать физические свойства пласта и геометрию трещины. В данной работе предлагается использовать модель на основе «ёмкость-сопротивление» (далее – Capacitance-Resistance Model, CRM), так как она построена на материальном балансе, имеет аналитическое решение и учитывает изменение давления на забое (Bottom-Hole Pressure, BHP) добывающих скважин, а для его работы требуется только история по закачке  $w$ , добыче  $q$  и BHP (рис. 1). На основе этих данных и прогнозируются дебиты. Следует отметить, что к входным данным есть определённые требования: замеры приёмистости, дебитов и давления на забое добывающих скважин должны быть на одни и те же моменты времени; давления и приёмистости во временные интервалы между замерами должны изменяться линейно; в период между двумя замерами приёмистость остается постоянной и равной значению предыдущего замера. Аналитическое решение построено исходя из вышеописанных предположений, поэтому возникают данные ограничения.

Рассмотрим получаемые коэффициенты в выходных данных с точки зрения физики.

#### Коэффициент взаимовлияния

Коэффициент  $f$  определяет объемную долю закачанной в нагнетательную скважину жидкости, которая фильтруется к добывающей скважине.

#### Временной параметр

$\tau = \frac{c\epsilon V_p}{J}$  – временной параметр, который вводится в модель CRM как

мера времени, необходимого для того, чтобы волна давления, вызванная изменением расхода, дошла по поровому пространству до добывающей скважины.

#### Индекс продуктивности

Коэффициент  $J$  показывает влияние изменения давления на забое скважины. Если давление на забое менялось и  $J = 0$ , то это означает, что изменение давления не влияет на изменение дебита. Так же,  $J$  может быть равно нулю или не равно нулю (т.е. быть любым) в случае, если давление на забое не меняется вообще.

#### CRMIP (Injector-Producer Pair Based Representation)

Модель CRMIP получается из предположения неоднородности пласта: каждая добывающая скважина влияет по-разному на каждую нагнетательную скважину. Записывается уравнение неразрывности для каждой пары, откуда вытекает следующее уравнение:

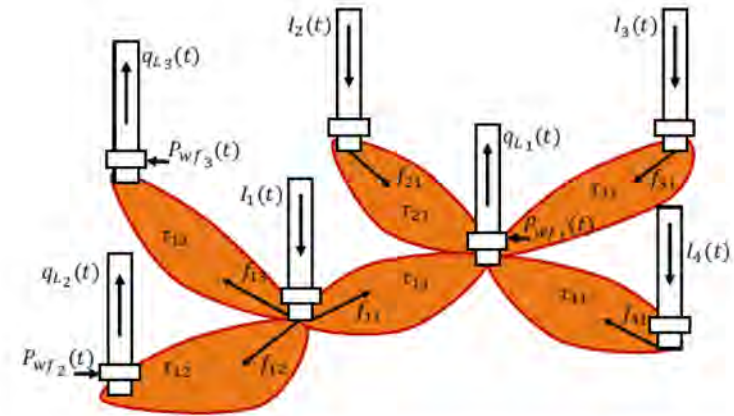


Рис. 2: Схема взаимодействия скважин в модели CRMIP

$$\tau_{ij} \frac{dq_{ij}(t)}{dt} + q_{ij}(t) = f_{ij} w_i(t) - \tau_{ij} J_{ij} \frac{dp_j(t)}{dt}$$

Решением которого является уравнение (учитывая ограничения на входные данные):

$$q_{ij}^k = q_{ij}^{k-1} e^{-\frac{\Delta t}{\tau_{ij}}} + \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_{ij}}}\right) \left(f_{ij} w_i^k - J_{ij} \tau_{ij} \frac{p_j^k - p_j^{k-1}}{\Delta t}\right),$$

где  $w_i(t)$  – расход  $i$ -ой нагнетательной скважины,  $p_j(t)$  – давление на забое  $j$ -ой добывающей скважины,  $q_{ij}(t)$  – дебит  $j$ -ой добывающей скважины (нефть и вода), приходящийся на влияние от  $i$ -ой нагнетательной скважины.

#### Тестирование на промысловых данных

Тестирование работоспособности алгоритма было проведено на трех участках месторождений, на двух из которых взаимовлияние было определено с помощью гидропрослушивания, а на другом – с помощью анализа данных нормальной эксплуатации.

#### 1. Нагнетательные скважины YY23, YY21, YY42 → добывающая скважина XX69Г

На первом месторождении (рис. 3) с помощью метода гидропрослушивания было выявлено взаимовлияние между нагнетательной скважиной YY42 и добывающей скважиной XX69Г:

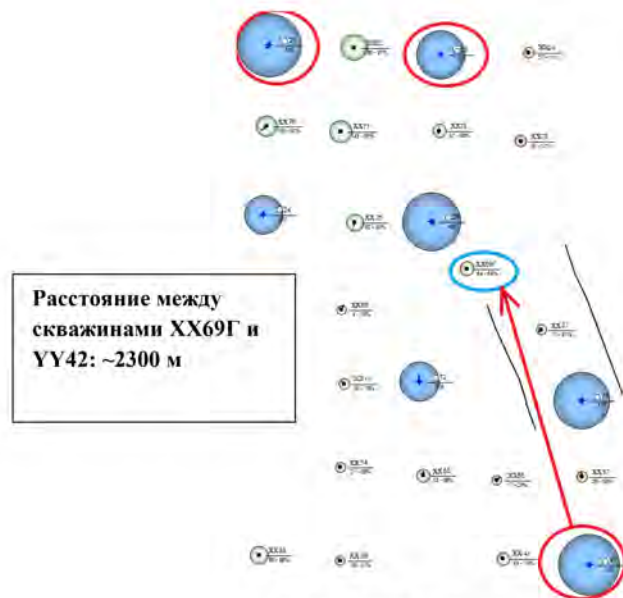


Рис. 3: Карта расположения скважин

Таблица 1

XX69Г	$f$	$\tau$	$J$
YY42	<b>0.0455</b>	<b>0.0037</b>	<b>0.1828</b>
YY21	0.0115	1.0000	0.1028
YY23	0	0.0002	0

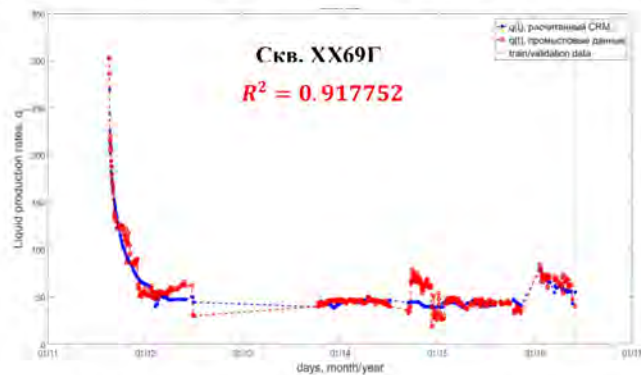


Рис. 4. график рассчитанных и промысловых дебитов

Согласно расчётам (таблица 1), влияние скважины YY42 на скважину XX69Г подтвердилось программным модулем (более высокий коэффициент взаимовлияния среди остальных). По рисунку (рис. 4) рассчитанный дебит (синий цвет) коррелирует с промысловым дебитом (красный цвет), коэффициент детерминации  $R^2 \approx 0.912$ .

## 2. Нагнетательная скважина YY11 → добывающие скважины XX99\_2C, XX56

В данном примере (рис.5) выявлена гидродинамическая связь между скв. YY11 и скв. XX99\_2C – трещина автоГРП.

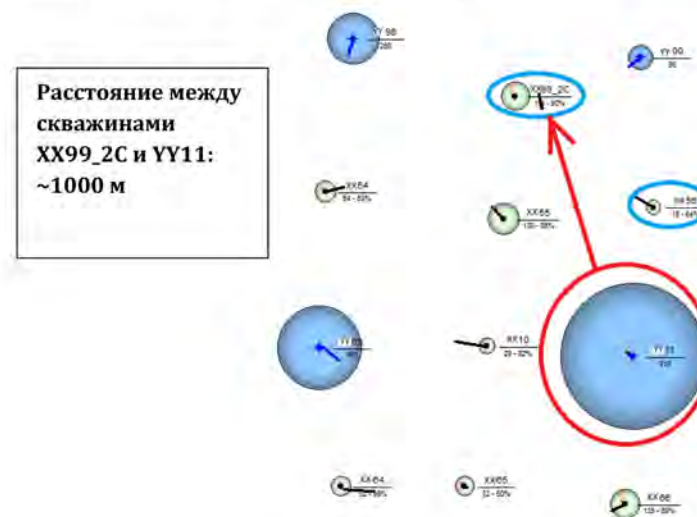


Рис. 5: Карта расположения скважин

Таблица 2

YY11	$f$	$\tau$	$J$
XX99_2C	<b>0.0843</b>	<b>32.0485</b>	<b>0</b>
XX56	0.0404	186.2245	0

YY14	$f$	$\tau$	$J$
<b>XXX50</b>	<b>0.1925</b>	<b>0.0085</b>	<b>0.4120</b>
XXX66	0.0336	0.1733	0
XX70	0.0470	0.1288	0.1288

тестирования брались дополнительные добывающие скважины (XXX66, XX70), чтобы выявить взаимовлияние на фоне других пар скважин.

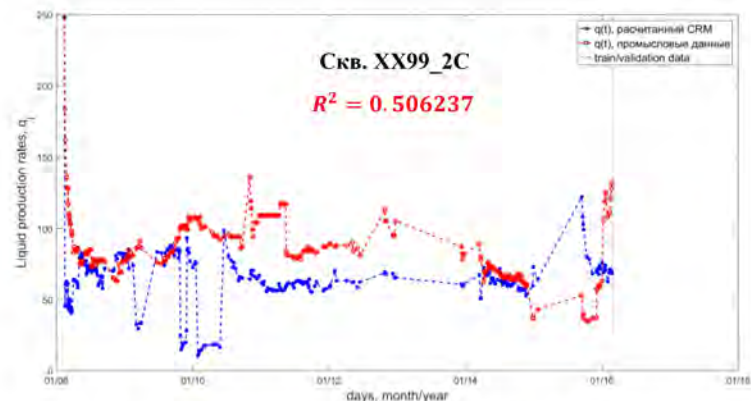


Рис. 6. График рассчитанных и промысловых дебитов

В данном примере мы получили набор коэффициентов (таблица 2), исходя из которых можно предположить, что между скважинами XX99\_2C и YY11 прослеживается взаимосвязь, т.к. другая добывающая скважина XX56 показывает меньший коэффициент взаимовлияния и больший временной параметр.

**3. Нагнетательная скважина YY4 → Добывающие скважины XXX50, XXX66, XX70**

В данном примере (рис. 7) взаимовлияние между скважинами было выявлено путем анализа данных нормальной эксплуатации. Для

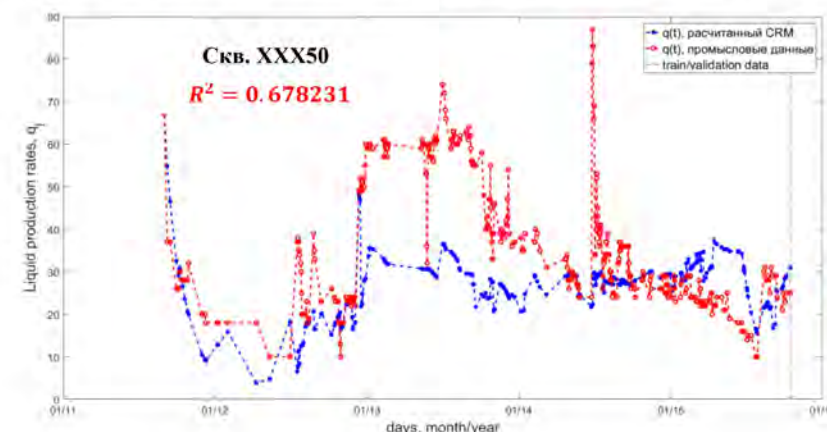


Рис. 8. график рассчитанных и промысловых дебитов

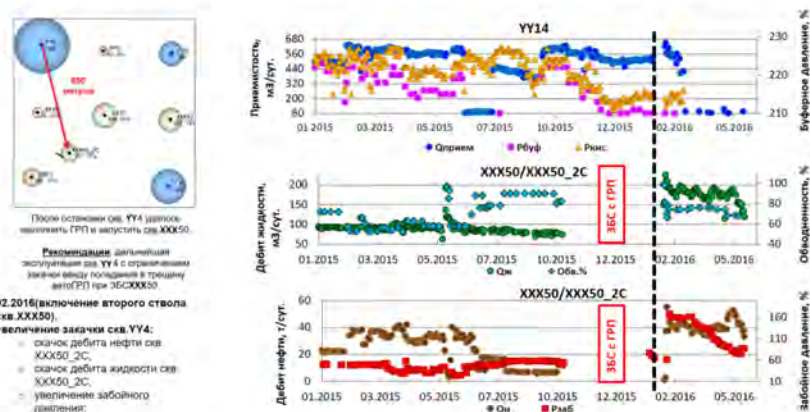


Рис. 7. Графики анализа данных нормальной эксплуатации

Здесь наблюдаем следующую картину: на фоне остальных пар, у пары нагнетательная скважина YY4-добывающая скважина XXX50 сильнее всех прослеживается взаимосвязь (коэффициент взаимовлияния значительно больше остальных).

**Заключение**

Таким образом, мы выяснили, что использование метода, основанного на модели CRM с аналитическим решением, позволяет достаточно быстро проводить расчеты, что необходимо в дальнейшем для быстрого реагирования на изменение добычи на промысле.

Стоит отметить, что при проведении расчётов нельзя рассматривать лишь пару скважин – нужно охватывать как минимум элемент разработки. Так же, пока что не ясна зависимость параметров CRM и наличия корреляции на получаемых графиках.

Программная реализация задачи автоматизированного анализа взаимовлияния скважин в будущем может позволить получить инструмент, который будет воссоздавать и предсказывать ситуации с прорывом закачиваемой воды в добывающие скважины по трещинам автоГРП, и из этого определять взаимовлияние между скважинами, предупреждая в дальнейшем случаи обводнения.

#### Литература

1. Holanda, R. W. d., 2015. Capacitance Resistance Model in a Control Systems Framework: a Tool for Describing and Controlling Waterflooding Reservoirs. Texas, USA.
2. Sayarpour, M., Kabir, C. S., Lake, L. W., 2008. Field applications of capacitance resistive models in waterfloods, USA.
3. Weber, D., 2009. The Use of Capacitance-Resistance Models to Optimize Injection Allocation and Well Location in Water Floods, USA.
4. Yousef, A. A., Gentil, P. H., Jensen, J. L., Lake, L. W., 2006. A Capacitance Model to Infer Interwell Connectivity from Production and Injection Rate Fluctuations, USA.
5. Д.Ф. Марьин, Т.С. Усманов, А.Я. Давлетбаев, Д.С. Иващенко, 2016. Автоматизированный анализ гидродинамического воздействия добывающих и нагнетательных скважин как инструмент быстрого поиска источников обводнения низкопроницаемых коллекторов с развитием трещин автоГРП.

© Марьин Д.Ф., Иващенко Д.С., Сахибгареев Э.Э., 2016 г.

УДК 538.911

#### ВЛИЯНИЕ ГОМОГЕНИЗАЦИИ НА ИЗМЕЛЬЧЕНИЕ ЗЕРЕН АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ВСЕСТОРОННЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКЕ

Мухаметдинова О.Э., Автократова Е.В.,  
Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Поскольку промышленные алюминиевые сплавы в большинстве своем являются многофазными и содержат частицы вторых фаз различной природы, то понимание роли этих фаз в формировании ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры и свойств сплавов при интенсивной пластической деформации (ИПД) является важным. Прежде всего, это вызвано тем, что частицы оказывают заметное влияние на кинетику рекристаллизации [1]. Так установлено, что в присутствии крупных жестких недеформируемых частиц в более мягкой алюминиевой матрице при нагружении возникают значительные деформационные градиенты, которые, в итоге, и обеспечивают деление (измельчение) зерен [2]. А в присутствии дисперсных фаз уменьшается мобильность высокоугловых границ при нагревах и деформации (Зинеровский эффект) [3]. По значимости влияния на рекристаллизацию при ИПД, контроль последних, конечно же, более важен. В том числе по причине того, что когда формирующиеся субграницы стабилизированы мелкими частицами, то при развитии основного механизма ИПД - непрерывной динамической рекристаллизации, трансформация малоугловых границ в высокоугловые происходит интенсивнее [4]. Не смотря на эти и ряд других известных эффектов, к сожалению, необходимо констатировать тот факт, что роль частиц в формировании УМЗ структур при ИПД сплавов с матричной структурой изучена крайне слабо и информация об этом представлена лишь в единичных работах. Так в предыдущем исследовании [5], мы показали, что когерентные дисперсоиды  $Al_3(Sc, Zr)$  хорошо стабилизируют структуру Al-Mg сплава при горячей деформации, и обеспечивают измельчение его зерен при обработке методом всесторонней изотермическойковки (ВИК). А также получение УМЗ массивных заготовок, даже при деформации при температуре 450°C (0,77Тпл).

Цель настоящего исследования - изучение эффекта размера дисперсоидов на формирование УМЗ структуры сплава при ВИК в тех же температурно-скоростных условиях.

### Материал и методы исследования.

Слиток сплава 1570С (Al-5Mg-0,18Mn-0,2Sc-0,08Zr, вес.%) подвергали одно- и двухступенчатой гомогенизации: при температуре 350°C в течение 6 часов (далее состояние I) и затем при 520°C 1 час (состояние II). Заготовки с размерами 18×17×10 мм осаживали с переменной осью нагружения (каптовкой) при 450°C и начальной скорости  $10^{-2} \text{ с}^{-1}$  до суммарной степени  $\epsilon \sim 4,2$  (однократная  $\sim 0,7$ ). Структуру сплава исследовали с использованием стандартных методов просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии (ПЭМ и СЭМ). Угловые параметры формирующейся структуры - средний угол разориентировки межкристаллитных границ,  $\theta_{ave}$ , и долю высокоугловых границ,  $f_{HVG}$ , оценивали методом EBSD анализа.

### Результаты и обсуждение.

Сплав после низкотемпературной гомогенизации (состояние I) имел структуру, состоящую из равноосных зерен со средним размером  $\sim 25$  мкм, внутри которых были сравнительно равномерно распределены когерентные выделения  $\text{Al}_3(\text{Sc,Zr})$  размером 5-10 нм (рис. 1а). Последующий часовой отжиг при 520°C не повлиял на размер зерна. Однако размер частиц увеличился до 20-50 нм и соответственно, уменьшилась и их плотность (рис. 1б), но при этом без потери частицами когерентности с алюминиевой матрицей.

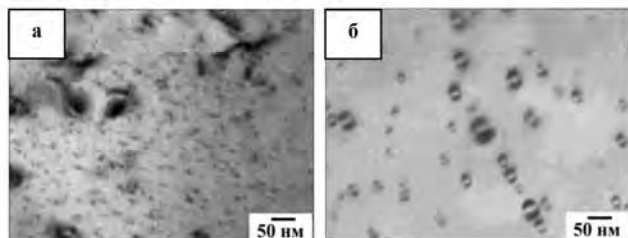


Рис. 1. ПЭМ структура гомогенизированного слитка сплава 1570С. а- состояние I, б - состояние II

Типичные EBSD карты микроструктур, сформировавшихся при ковке до различных степеней деформации, представлены на рисунке 2. Видно, что области новых ультрамелких (суб)зерен, окруженных мало- и высокоугловыми границами, формировались сначала на границах исходных зерен (рис.2а,а'), а затем их объемная доля увеличивалась (рис.2в,в'), что приводило к образованию чередующихся областей старых крупных и новых мелких зерен. При этом межкристаллитные границы приобретали преимущественно высокоугловую разориентировку.

Следует отметить, что доля рекристаллизованных зерен после всех исследованных степеней деформации была выше в состоянии II. В итоге, после ВИК с  $\epsilon \sim 4,2$  она составила около 75% (рис.2в'), в то время как в состоянии I (рис.2в) - не превысила 60%.

Рисунок 3 показывает изменение распределения разориентировок границ в обоих состояниях сплава в зависимости от степени деформации. Видно, что после  $\epsilon \sim 1,4$  большинство новых границ имело малоугловую разориентировку, тогда как границы с углами более  $15^\circ$  были преимущественно унаследованы из исходной структуры сплава (см. рис.2а,а'). При последующей деформации доля малоугловых границ уменьшалась, что могло быть связано с развитием мелкозернистых областей на месте субзерен (рис. 2б,б' и в,в') при трансформации малоугловых границ в высокоугловые. Наличие первых даже после больших степеней деформации указывало на деформационно-индуцированную природу формирующейся структуры, в которой малоугловые границы непрерывно генерировались в процессе деформации [6,7]. Следует отметить, что в состоянии I, содержащем более мелкие частицы (рис. 1а), малоугловые границы трансформировались в высокоугловые труднее, вследствие чего на всех стадиях ВИК в его структуре доля малоугловых границ была больше (рис. 3 а,б).

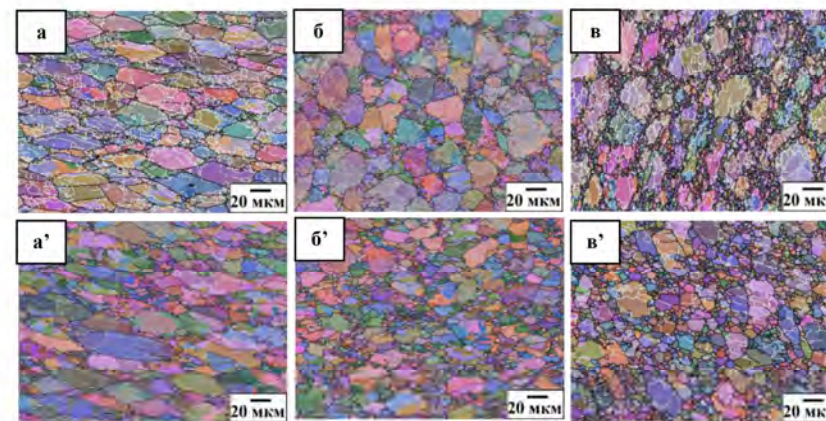


Рис. 2 . Восстановленные структуры сплава 1570С после ВИК: состояние I (а-в) и II (а'-в') с  $\epsilon \sim 1,4$  (а, а'); 2,1 (б,б') и 4,2 (в,в')

Зависимости среднего размера зерна, определенного по данным EBSD анализа как средний размер кристаллитов, окруженных границами



от  $15^\circ$ , средней разориентировки (суб)зеренных границ и доли высокоугловых границ в формирующейся структуре от степени деформации представлены на рисунке 4. В обоих состояниях угловые параметры микроструктуры сплава были одинаковыми. На начальных этапах ВИК (до  $\epsilon=1,4$ ) формировались преимущественно малоугловые границы, что приводило к уменьшению угловых параметров структуры обоих состояний. В дальнейшем  $\theta_{ave}$  и  $f_{ВУГ}$  увеличивались в результате трансформация малоугловых границ в высокоугловые, а средний размер зерен при этом снижался в состоянии I и практически не изменялся в состоянии II (рис. 4 а), приводя после  $\epsilon \sim 4,2$  к формированию структур с размером мелких зерен  $\sim 2,7$  и  $\sim 3,8$  мкм, соответственно. При этом важно отметить, что при всех исследованных степенях деформации в сплаве с более мелкими дисперсоидами (состояние I) и размер зерна, и угловые параметры структуры были меньше, чем в состоянии II.

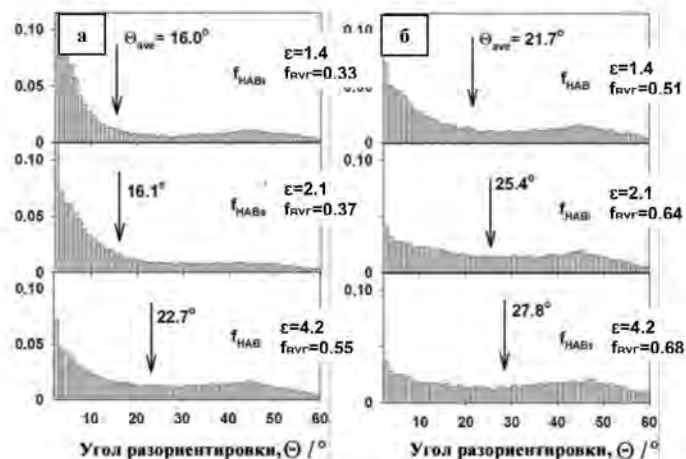


Рис. 3. Распределение по углам разориентировок (суб)зеренных границ в сплава 1570C при разных степенях деформации: состояние I – (а); состояние II – (б)

Полученные результаты обусловлены следующим. Как уже упоминалось, основной механизм формирования новых зерен в процессековки сплава заключался в формировании малоугловых дислокационных границ и последующей их трансформации в высокоугловые границы. Судя по ПЭМ изображению структуры состояния II после ВИК с  $\epsilon=2,1$  (рис. 5) можно сказать, что индивидуальные решеточные дислокации и (суб)зеренные границы закреплены на дисперсных частицах  $Al_3(Sc, Zr)$ .

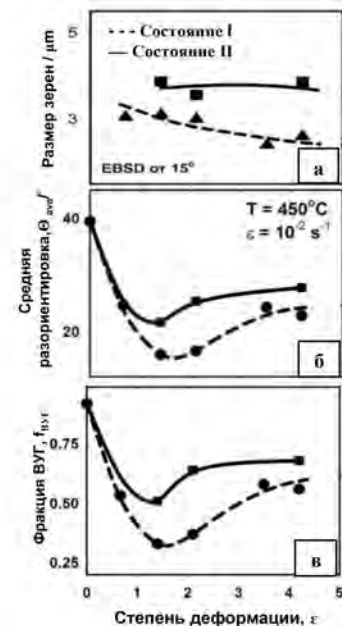


Рис. 4. Зависимости параметров структуры сплава 1570C от степени деформации



Рис. 5. ПЭМ структура сплава 1570C после ВИК с  $\epsilon \sim 2,1$  (состояние II)

подавляет их трансформацию в высокоугловые, сдерживая формирование новых зерен. Полученные же данные свидетельствуют о том, что более крупные частицы, облегчая протекание динамического возврата и обеспечивая более быстрое совершенствование структуры во время ВИК, активизируют перераспределение дислокаций внутри (суб)границ и трансформацию последних в более равновесные границы с большим углом разориентировки. Это приводит к более быстрому увеличению

При этом частицы в основном остаются когерентными с алюминиевой матрицей и эффективно сдерживают миграцию границ зерен. Кроме того они также ограничивают переползание решеточных дислокаций на большие расстояния и их аннигиляцию в условиях деформации, обеспечивающих высокую скорость динамического возврата. В результате, становится возможным накопление дислокаций, последующее формирование дислокационных границ высокой плотности и их трансформация в большеугловые границы зерен.

Также в процессе деформации дисперсоиды активно взаимодействуют с границами зерен и сильно подавляют их миграцию, соответственно, и рост зерен. Последнее, видимо, является определяющим фактором, обеспечивающим измельчение зерен и формирование (ультра)мелкозернистой структуры при столь высоких температурах деформации. При этом размер и распределение дисперсоидов играют важную роль в увеличении угла разориентировки дислокационных границ и, следовательно, кинетики формирования новых зерен.

В недавних работах [8,9] было показано, что в алюминиевых сплавах, содержащих дисперсоиды, динамический возврат может быть сильно подавлен даже при повышенных температурах. Это делает субграницы более диффузными и

разориентировки межкристаллитных границ и, соответственно, формированию новой зеренной структуры, содержащей более крупные зерна.

#### Закключение.

Мелкозернистые структуры с размером зерна порядка 3 мкм были получены в сплаве 1570С с наноразмерными когерентными частицами  $Al_3(Sc, Zr)$  в результате обработки методом ВИК при температуре  $\sim 0,77T_{пл}$ . Они формировались путем образования деформационно-индуцированных дислокационных границ с последующим увеличением их количества и разориентировки. Структура, сформированная в сплаве с более мелкими алюминидными переходных металлов, характеризуется меньшим размером новых зерен, меньшей долей высокоугловых границ и меньшим средним углом разориентировки межкристаллитных границ. Результаты работы свидетельствуют о том, что разориентировка деформационно-индуцированных субграниц и, соответственно, кинетика измельчения зерен сплава контролируются размером и распределением в объеме дисперсоидов.

#### Литература

1. F.J. Humphreys, M. Hatherly, Recrystallization and Related Annealing Phenomena, 2nd edition, Elsevier, Amsterdam, 2004.
2. F.J. Humphreys, P.N. Kalu. The plasticity of particle-containing polycrystals. Acta Metall Mater. 38, 917–930., 1990.
3. P.A. Manohar, M. Ferry, T. Chandra, Five Decades of the Zener Equation, ISIJ International, 38(9), 913-924, 1998.
4. T.R. McNelley, E.-W. Lee, M.E. Mills, Metall. Trans. 17A 1035–1041, 1986.
5. O.S. Sitdikov, R.N. Garipova, E.V. Avtokratova, O.E. Mukhametdinova, M.V. Markushev, Letters on materials, 2016.
6. O.Sh. Sitdikov, T. Sakai, A. Goloborodko, H. Miura, R. Kaibyshev. Philos. Mag. 85, 1159-1175, 2005.
7. T. Sakai, H. Miura, A. Goloborodko, O. Sitdikov. Acta Mat. 57, 153-162, 2009.
8. O. Sitdikov, E. Avtokratova, T. Sakai, K. Tsuzaki. Met. Mat. Trans. A 44, 1087-1100, 2013.
9. O. Sitdikov, T. Sakai, H. Miura, C. Hama. Mater. Sci. Eng. A 516, 180–188, 2009.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 16-19-10152

© Мухаметдинова О.Э., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В., 2016г.

УДК 538.7

#### ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ DWDM

Салимгареев Р.Р., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Объемы потребляемого трафика постоянно растут. Перед операторами связи встает вопрос о модернизации существующих транспортных сетей. Пропускную способность волоконно-оптических сетей можно увеличить двумя основными способами: повысив уровень STM-сигнала или внедрив технологию плотного волнового мультиплексирования (Dense Wavelength Division Multiplexing - DWDM). Эта технология подразумевает спектральное разделение полосы пропускания волокна на несколько оптических каналов. В данной работе смоделирована 4-х канальная линия связи с применением EDFA усилителей со скоростью передачи данных, соответствующей уровню синхронной цифровой иерархии STM-16.

Так как в работе используется 4-х канальная система передачи с разными длинами волн ( $\lambda_1=1547,72$  нм,  $\lambda_2=1548,51$  нм,  $\lambda_3=1549,32$  нм,  $\lambda_4=1550,12$  нм), то необходимо рассчитать коэффициент дисперсии для первого и последнего канала.

Коэффициент дисперсии материала волокна определяется по следующей формуле:

$$D(1550,12) = \frac{1550,12 \text{ нм} \cdot 0,063 \text{ пс} / \text{нм}^2 \cdot \text{км}}{4} \left[ 1 - \left( \frac{1374,09 \text{ нм}}{1550,12 \text{ нм}} \right)^4 \right] \approx 9,34 \text{ пс} / \text{нм}^2 \cdot \text{км}$$

$$D(1547,72) = \frac{1547,72 \text{ нм} \cdot 0,063 \text{ пс} / \text{нм}^2 \cdot \text{км}}{4} \left[ 1 - \left( \frac{1374,09 \text{ нм}}{1547,72 \text{ нм}} \right)^4 \right] \approx 9,23 \text{ пс} / \text{нм}^2 \cdot \text{км}$$

Отсюда получим:

$$L_{\lambda 1} = \frac{1}{4 \cdot 2488,32 \text{ Мбит} / \text{с} \cdot 9,34 \text{ пс} / \text{нм}^2 \cdot \text{км} \cdot 0,1 \text{ нм}} = 107,6 \text{ км}$$

$$L_{\lambda 2} = \frac{1}{4 \cdot 2488,32 \text{ Мбит} / \text{с} \cdot 9,23 \text{ пс} / \text{нм}^2 \cdot \text{км} \cdot 0,1 \text{ нм}} = 108,9 \text{ км}$$

Длина регенерационного участка, вычисленная по дисперсии, на конце которого необходимо ставить 3R-регенератор, восстанавливающий форму, амплитуду и фазу сигнала, составила 107,6 км.

Длина регенерационного участка по энергии вычисляется по формуле, в которой учтены потери всех компонентов и соединений на линии.

Она выведена из формулы  $P_{\text{лм}} - \alpha_{\text{оп}} - \alpha_{\text{н-вс}} - N_{\text{с}} \cdot \alpha_{\text{н}} - \alpha \cdot L_{\text{с}} - \alpha_{\text{вс-фл}} \geq P_{\text{флм}} + \mathcal{E}$  и имеет следующий вид:

$$L_{\text{с}} \leq \frac{P_{\text{лм}} - \alpha_{\text{н-вс}} + \alpha_{\text{н}} - \alpha_{\text{вс-фл}} - \alpha_{\text{оп}} - P_{\text{флм}} - \mathcal{E}}{\frac{\alpha_{\text{н}}}{L_{\text{сд}}} + \alpha}, \text{ км}$$

где  $P_{\text{лм}} = 10 \cdot \lg \frac{40 \text{ мВт}}{1 \text{ мВт}} = 16 \text{ дБм}$  – уровень мощности на выходе лазера по отношению к 1 мВт;

$\alpha_{\text{вс-фл}} = 1 \text{ дБ}$  – потери на соединении оптическое волокно – фотоприемник;

$\alpha_{\text{н-вс}} = 1 \text{ дБ}$  – потери при вводе излучения в волокно;

$\alpha_{\text{оп}} = 2,6 + 4,5 = 7,1 \text{ дБ}$  – потери в мультиплексоре и модуляторе;

$P_{\text{флм}}$  – уровень мощности на входе фотоприемника, определяется по формуле  $P_{\text{флм}} = -53 + 10 \cdot \lg B = -53 + 10 \cdot \lg(2488,32 \text{ Мбит/с}) = -19,04 \text{ дБм}$ ;

$\mathcal{E} = 6 \text{ дБ}$  – энергетический запас системы (эксплуатационный запас на аппаратуру и на кабель);

$\alpha_{\text{н}} = 0,1$  – потери на неразъемных соединениях, типичные значения потерь при сварке волокон современными сварочными аппаратами;

$\alpha = 0,22 \text{ дБ/км}$  – затухание в волокне;

$L_{\text{сд}} = 4 \text{ км}$  – строительная длина кабеля (стандартное значение);

Подставляем значения, входящие в соотношение для  $L_{\text{с}}$ , получим:

$$L_{\text{с}} = \frac{16 - 1 + 0,1 - 1 - 7,1 + 19,04 - 6}{\frac{0,1}{4} + 0,22} = 81,7 \text{ км}$$

Из полученных данных следует, что при применении EDFA усилителей длина регенерационного участка будет равной длине, рассчитанной с учетом дисперсии 107,6 км, после которой необходимо также установить компенсатор дисперсии, который будет располагаться в приемной части оборудования.

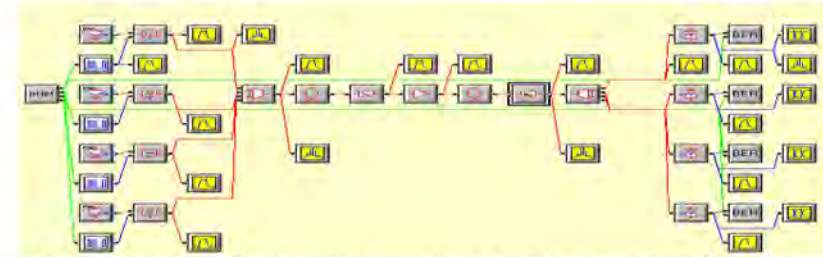


Рис.1 Модель ВОЛП со спектральным разделением каналов, разработанная в системе автоматического проектирования LinkSim

Модель линии связи (рис.1) представляет собой четырёхканальную оптическую линию связи STM-16, со скоростью передачи каждого канала 2488,32 Мбит/с. Блоки PRBS генерируют четыре псевдослучайные двоичные последовательности, которые поступают на генераторы электрических импульсов со скоростью 2488,32 Мбит/с. Затем эти импульсы поступают на CW-лазер. Формы и амплитуды сигналов после генераторов электрических импульсов и источника излучения можно посмотреть с помощью электронного осциллографа.

Затем четыре оптических сигнала на разных длинах волн, соответствующих частотному плану, поступают в оптический мультиплексор. Далее сигнал поступает в волокно Sumitomo(SEI) PureGuide протяженностью 69 км.

Через 69 км устанавливается линейный оптический усилитель с целью компенсации ослабления сигнала, которое происходит из-за затухания в оптическом волокне и потерь на неразъемном и разъемном соединениях. Потери на соединениях фиксируются блоком аттенуатора. После усилителя сигнал поступает в волокно Sumitomo(SEI) PureGuide протяженностью 38 км, которая меньше регенерационной длины по энергии. Оптический сигнал с выхода последнего участка волокна идёт к демультиплексору, перед которым установлен блок нормализатора мощности. После демультиплексирования оптический сигнал попадает на четыре блока Receiver (приёмники) и преобразуется в электрические потоки по 2488,32 Мбит/с. Электрические сигналы, выходящие из приёмников могут быть рассмотрены с помощью осциллографов. Также можно рассмотреть глаз-диаграммы прошедших через линию связи сигналов.

Каждый электрический сигнал с выхода моделей приёмников передаётся BER-тестеру. Этот блок использует форму сигнала и зависящий от времени шум, который сопровождает его для определения средней частоты передачи ошибочных битов. Блок BER автоматически

определяет идеальное время выборки и порог срабатывания исходя из формы входного сигнала.

Для волоконно-оптической линии были подобраны следующие компоненты:

- DFB лазерный диодный модуль Gooch & Housego EM650;
- электрооптический модулятор AC Photonics LNM-CL-02500;
- мультиплексор GoFoton DWDM-01M-D-C37-C34-1-1-4;
- одномодовое ОВ с ненулевой смещенной дисперсией G.655 Sumitomo (SEI) PureGuide;
- EDFA усилитель Amonics AEDFA-PKT-DWDM-15B;
- фотоприемник OSI LaserDiode LPD 3080.

Рассмотрим полученные осциллограммы, глаз-диаграммы, спектры сигнала.

На рисунке 2а изображена осциллограмма сигнала на выходе из генератора электронных сигналов. Сигналы смоделированы по псевдослучайной комбинации PRBS-генератора. Амплитуда единицы составляет 2 В, а нуля соответственно 0 В.

На рисунке 2б изображена осциллограмма сигнала после источника излучения. Из неё видно, что нет никаких помех и искажений. Уровень сигнала равен 8,3 дБм.

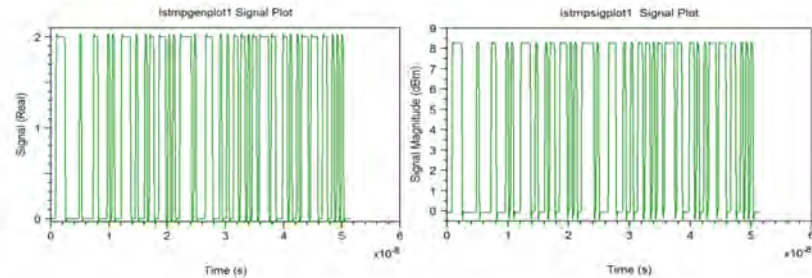


Рис. 2 Сигнал с генератора электронных сигналов(а) и после источника излучения (б)

На рисунке 3а изображен спектр сигнала после мультиплексора. Он имеет четыре основных пика, которые соответствуют длинам волн используемых излучателей.

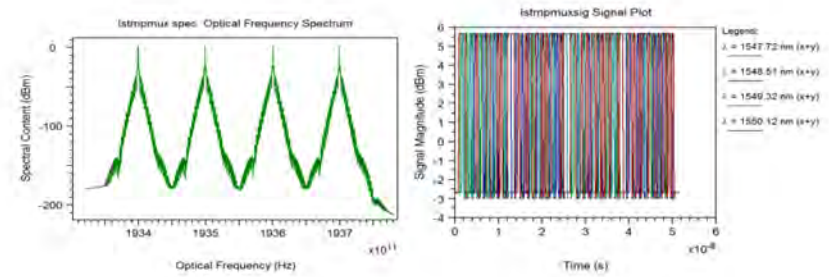


Рис. 3 Спектр сигнала после мультиплексора(а) и сигнал после мультиплексора(б)

На рисунке 3б видим, что уровень мультиплексированного сигнала равен примерно 5,7 дБм, то есть затухание на мультиплексоре составило  $8,3-5,7=2,6$  дБ.

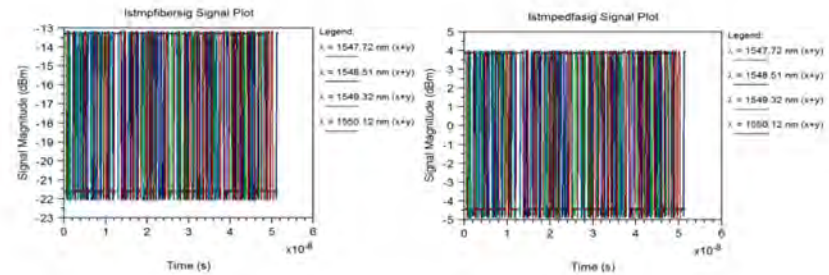


Рис. 4 Сигнал перед усилителем(а) и сигнал после усиления(б)

Перед усилением уровень сигнала был равен -13,2 дБм (рисунок 4а). По рисунку 4б видим, что сигнал усилился до 4 дБм, то есть на 17,2 дБ.

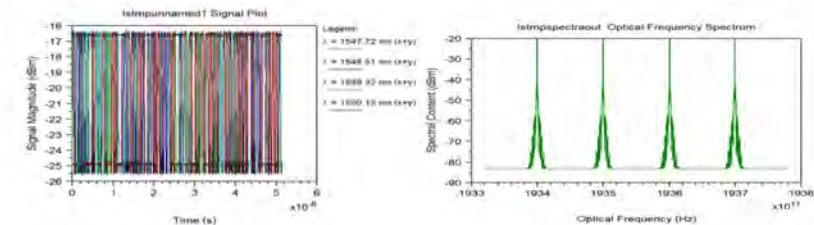


Рис. 5 Сигнал перед демультиплексированием(а) и его спектр(б)

На рисунке 5а представлен сигнал перед демультиплексором. Видим, что уровень мощности упал до -16,4 дБм, при этом фотоприемник обнаруживает сигналы до -19 дБм. На рисунке 5б изображён спектр сигнала после прохождения оптической линии связи, т.е. перед входом в демультиплексор. Видим, что сигналы сохранили своё положение в соответствии с частотным планом, но претерпели сужение и затухание по амплитуде.

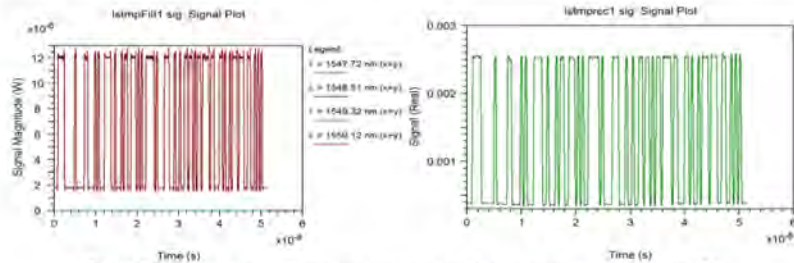


Рис. 6 Сигнал после демультиплексора(а) и выходной сигнал(б)

На рисунке 6а изображена осциллограмма сигнала после демультиплексора, по которой видно, что помехи и нелинейные искажения слабо изменили сигнал. Этот сигнал после попадания на фотодетектор будет выглядеть как на рисунке 6б.

Как сильно изменился выходной сигнал можно сказать, сравнив исходный и конечный сигналы. Видно, что сигнал претерпел минимум искажений.

По глаз-диаграмме, изображённой на рисунке 7а можно сказать, что качество сигнала достаточно хорошее, учитывая пройденное расстояние в 107,6 км. Определим Q-фактор:

$$Q = \frac{|E1 - E0|}{\sigma_1 + \sigma_0} = \frac{0,00255 - 0,00038}{0,00013 + 0,00015} = 7,75$$

Главной характеристикой линии связи и оборудования является BER-тест. Модель BER-тестера вычисляет вероятность передачи ошибочных битов для входного электрического сигнала. Полученный результат BER =  $10^{-14,73}$  меньше предельно допустимого значения BER =  $10^{-12}$ , поэтому можно сказать, что сигнал от источника до приёмника проходит практически без потерь информации. Значение коэффициента битовой ошибки изображено на рисунке 7б.

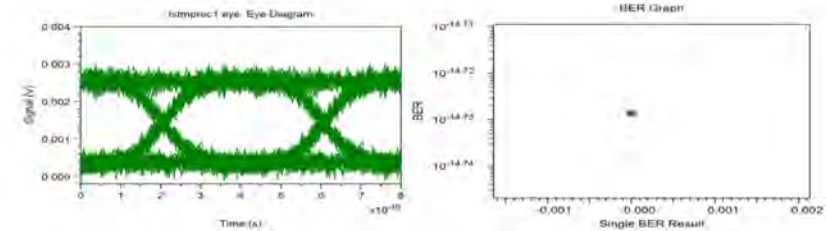


Рис. 7 а) Глаз-диаграмма выходного сигнала б) показание BER-тестера

По данным рис.7б. видно, что качество сигнала хорошее, коэффициент битовой ошибки(BER) ниже предельно допустимого значения.

Рассмотрим как повлияет на линию связи мощность излучения источника и скорость передачи данных.

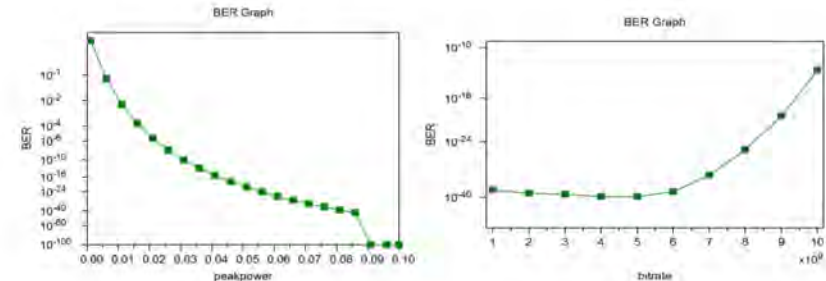


Рис. 8 Зависимость показания BER тестера от мощности излучателя (а) и от скорости передачи данных (б)

Требуемое качество передачи достигается при мощности излучения источника 35 мВт. По полученным результатам рис.8б можем сказать, что и при скорости передачи данных, соответствующей уровню STM-64, достигается приемлемое значение коэффициента битовой ошибки для линии связи.

### Литература

1. Сагитов Р. Г., Лопатюк А. В. Лабораторные работы по спецпрактикуму «Оптические системы передачи». – Уфа: РИО БашГУ, 2002
2. Дмитриев. А. Л. Оптические системы передачи информации. - СПб: СПбГУИТМО, 2007. - 96 с.

© Салимгареев Р.Р., Лопатюк А.В., 2016 г.

## ИССЛЕДОВАНИЕ КРИВЫХ ВРАЩЕНИЯ ГАЛАКТИК В ПРОСТРАНСТВЕ-ВРЕМЕНИ КРотовых НОР

Тулеганова Г.Ю., Лукманов А.Р.

Башкирский государственный педагогический университет  
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

### Аннотация

Возможность существования кротовых нор во внешней области галактик было подтверждено недавними исследованиями Рахамана и др. [3-4]. Следуя методу указанных исследований, нами были решены уравнения поля Эйнштейна для получения таких физических параметров, как тангенциальная скорость пробной частицы и параметров, связанных с геометрией кротовой норы. Пространство-время области галактического гало описывается линейным элементом кротовой норы. В качестве исходных данных для проверки метода был использован Псевдо-Изотермический профиль плотности темной материи [5]. Нами получено удовлетворительное соответствие наблюдаемой кривой и кривой, полученной из рассматриваемой теории для радиальных расстояний в диапазоне от 9 до 100 КПК, что показано в графике.

### Введение

Кротовые норы являются объектами исследований в области теоретической физики. Уравнения гравитационного поля Эйнштейна предсказывают существование кротовых нор, а наблюдательные данные не исключают их существования. Они подобны туннелю, связывающему две удаленные области пространства-времени или различные вселенные. Подробно кротовые норы были изучены в работах [1-2].

Недавние исследования Рахамана и др. [3-4] подтвердили, что существование кротовых нор возможно во внешней области галактик. Для поддержания открытой кротовой норы необходимо нарушение одного или нескольких энергетических условий в горловине кротовой норы, в частности, слабого энергетического условия  $\rho > 0$  и (или) изотропного энергетического условия  $\rho + p_r \geq 0$  (где  $\rho$  – плотность энергии материи и  $p_r$  – радиальное давление), и выполнение условия  $\Phi'(b) \neq 0$ . В данных работах проанализированы свойства областей галактического гало, из которых следует, что пространство-время галактического гало допускает характеристики, необходимые для существования кротовой норы.

Плоские кривые вращения пробных частиц в отдаленных областях гало галактик, таких как нейтральные молекулы водорода, подтверждены различными наблюдениями. Ньютоновская физика или Общая теория относительности предсказывают Кеплеровское падение кривых вращения

с увеличением расстояния. Однако наблюдения демонстрируют плоские кривые вращения с увеличением расстояния во внешних областях гало. Исходя из этого, необходимо допустить существование темной (т.е. не взаимодействующей электромагнитно) материи. Чтобы проверить метод, предложенный Рахаманом, мы взяли за основу два профиля плотности темной материи: часто используемую модель для галактического гало – Псевдо-Изотермический профиль плотности темной материи:

$$\rho^{PI}(r) = \frac{\rho_0^{PI}}{1 + \left(\frac{r}{r_c}\right)^2}, \quad (1)$$

где  $\rho_0^{PI}$  центральная плотность и  $r_c$  радиус ядра [5,6]. Вторым профилем, который мы рассмотрим, является профиль плотности темной материи Конденсат Бозе-Эйнштейна [7]:

$$\rho^{BEC}(r) = \rho_0^{BEC} \left[ \frac{\sin(\xi r)}{\xi r} \right], \quad (2)$$

где  $\rho_0^{BEC}$  обозначает конечную центральную плотность и  $\xi = \frac{\sqrt{6}}{r_c}$  [7].

Распределение массы нарушает нулевое энергетическое условие  $\rho + p_r \geq 0$ . В данной работе рассматривается кротовая нора, обусловленная профилем плотности галактической темной материи. Исходя из этого, решаем уравнения поля и определяем структуру галактического пространства-времени на расстоянии  $r$  от характеристического масштабного радиуса  $r_s$ . Из геодезического уравнения пространства-времени мы получаем формулу для скоростей вращения облаков нейтрального водорода во внешних областях. В заключении сравниваем наши результаты в виде графиков с наблюдаемыми кривыми вращения галактик.

### 2 Основные уравнения и их решения

Для того, чтобы объединить темную материю и галактические кривые вращения с кротовыми норами необходимо представить метрику для статического сферически симметричного пространства-времени. Следуя Моррису и Торну [1], рассмотрим линейный элемент для области галактического гало в связи с пространством-временем кротовой норы в следующем виде:

$$ds^2 = -e^{2f(r)} dt^2 + \left(1 - \frac{b(r)}{r}\right)^{-1} dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2), \quad (3)$$

Здесь  $f = f(r)$  – функция красного смещения, которая должна быть повсюду конечной для предотвращения горизонта событий. Функция  $b = b(r)$  называется функцией формы со свойством  $b(r_{th}) = r_{th}$ , где  $r = r_{th}$  – горловина кротовой норы. Ключевым требованием является условие расходимости в горловине  $b'(r_{th}) < 1$  вблизи горловины.

До сих пор неизвестна точная физическая природа темной материи, которая образует геометрию, подобную кротовой норе, поэтому можно предположить, что темная материя описывается общим анизотропных тензором энергии-импульса [8]:

$$T_{\nu}^{\mu} = (\rho + p_t)u^{\mu}u_{\nu} - p_t g_{\nu}^{\mu} + (p_r - p_t)\eta^{\mu}\eta_{\nu}, \quad (4)$$

где  $u^{\mu}u_{\nu} = -\eta^{\mu}\eta_{\nu} = -1$ . Здесь  $p_t$  и  $p_r$  – поперечное и радиальные давления соответственно.

Так как мы рассматриваем существование кротовой норы в области галактического гало, то согласно теории Эйнштейна, для того чтобы кротовая нора оставалась открытой, необходимо нарушение нулевого энергетического условия, т.е.  $\rho + p_r(r) < 0$ . Кроме того, при  $r \rightarrow \infty$  выражение  $\rho + p_r(r) \rightarrow 0$ . Таким образом, мы рассмотрим выражение, которое удовлетворяет вышеуказанным условиям:

$$\rho + p_t(r) = -\frac{\alpha}{r^n}, \quad (5)$$

где  $\alpha$  и  $n$  произвольные положительные константы, введенные для того, чтобы сделать уравнение размерно-совместимым, необходимо выбрать  $\alpha$  как  $L^{-2+n}$ . При  $n = 2$  уравнение является размерно совместимым с  $\alpha$ , как безразмерной константой. Однако для дробного  $n$  его размерность будет дробной. В нашем случае можно рассматривать дробную размерность.

Таким образом, уравнения поля Эйнштейна соответствуют уравнениям (1), (2) и (4), используя геометрические единицы, примут следующий вид:

$$\frac{b'(r)}{r^2} = 8\pi\rho(r), \quad (6)$$

$$2\left(1 - \frac{b}{r}\right)\frac{f'}{r} - \frac{b}{r^3} = 8\pi p_r(r), \quad (7)$$

## 2.2 Псевдо-Изотермический профиль

Интегрируя вышеприведенное уравнение для профиля плотности (1), мы получаем

$$b(r) = 8\pi r_c^2 \rho_0 (r - r_c \text{Arctan}[r/r_c]) \quad (8)$$

Мы использовали критерий  $b(r_{th}) = r_{th}$  в горловине  $r_{th}$ , чтобы получить значение константы интегрирования.

Ввиду уравнений (1) и (5) мы получаем радиальное давление

$$p_r(r) = -r^{-n}\alpha - \frac{\rho_0}{1 + \frac{r^2}{r_c^2}} \quad (9)$$

Взяв значения  $b(r)$  и  $p_r(r)$  из вышеприведенных уравнений (8)-(9) и вставив в уравнение (7), мы вычислим  $f'(r)$  как

$$f'(r) = \frac{r \left[ 8\pi \left( \frac{\rho_0}{1 + \frac{r^2}{r_c^2}} - r^{-n}\alpha \right) + \frac{r_c - 2\rho_0(\pi-4)\pi r_c^3 + 8\rho_0\pi r_c^2 \{r - r_c \text{Arctan}(\frac{r}{r_c})\}}{r^3} \right]}{2 \left[ 1 - \frac{r_c - 2\rho_0(\pi-4)\pi r_c^3 + 8\rho_0\pi r_c^2 \{r - r_c \text{Arctan}(\frac{r}{r_c})\}}{r} \right]} \quad (10)$$

Тангенциальная скорость может быть найдена из плоских кривых вращения для стабильных круговых орбит движения геодезической в экваториальной плоскости [9-10]

$$(v^{\phi})^2 = r f'(r), \quad (11)$$

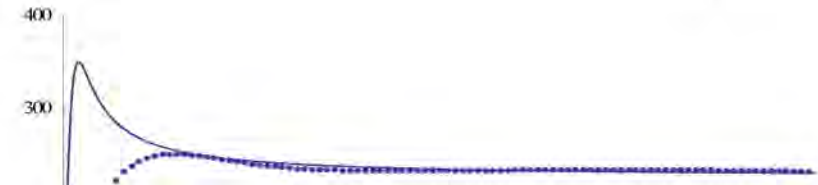
Следовательно, выражение скорости  $v^{\phi}$  в км/ч получим следующем виде:

$$v^{\phi} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{r^2 \left[ 8\pi \left( \frac{\rho_0}{1 + \frac{r^2}{r_c^2}} - r^{-n}\alpha \right) + \frac{r_c - 2\rho_0(\pi-4)\pi r_c^3 + 8\rho_0\pi r_c^2 \{r - r_c \text{Arctan}(\frac{r}{r_c})\}}{r^3} \right]}{1 - \frac{r_c - 2\rho_0(\pi-4)\pi r_c^3 + 8\rho_0\pi r_c^2 \{r - r_c \text{Arctan}(\frac{r}{r_c})\}}{r}}} \quad (12)$$

## 2.2 Профиль плотности Конденсат Бозе-Эйнштейна

Рассмотрим вторую модель для галактического гало – профиль плотности темной материи Конденсат Бозе-Эйнштейна [7]. Интегрируя уравнение (7) для профиля плотности (2), получим

$$b(r) = r_c - 4 \sqrt{\frac{2}{3}} \pi r_c \rho_0^{BEC} \left( -\frac{r_c^2 \cos[\sqrt{6}]}{\sqrt{6}} + \frac{1}{6} r_c^2 \sin[\sqrt{6}] \right) + 4 \sqrt{\frac{2}{3}} \pi r_c \rho_0^{BEC} \left( -\frac{r + r_c \cos[\frac{r\sqrt{6}}{r_c}]}{\sqrt{6}} + \frac{1}{6} r_c^2 \sin \left[ \frac{r\sqrt{6}}{r_c} \right] \right) \quad (13)$$



Взяв значения  $b(r)$  из уравнения (13) и  $p_r(r)$  из уравнения (9), вставив в уравнение (7), найдем  $f'(r)$  и получим тангенциальную скорость вращения  $v^\phi$  в виде:

$$v^\phi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -1 + \frac{3r \left( 3 - 24\pi r^2 - n - 4\sqrt{6}\pi r^* r_c \rho_0^{BEC} \sin\left[\frac{r\sqrt{6}}{r_c}\right] \right)}{9r - 3r_c(3 + 4\pi r_c^2 \rho_0^{BEC} \cos[\sqrt{6}]) + 2\pi r_c^2 \rho_0^{BEC} \left[ 6r \cos\left[\frac{r\sqrt{6}}{r_c}\right] + r_c \sqrt{6} \left( \sin[\sqrt{6}] - \sin\left[\frac{r\sqrt{6}}{r_c}\right] \right) \right]} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

Скорость  $v^\phi$  в км/ч кривых вращения объектов с общей вириальной массой  $3 \times 10^{12}$  масс солнца в разных радиусах  $r$  в КПК взяты из исследований [11]. Далее сравним результаты данных наблюдений скоростям с теоретическими предсказаниями.

### 3 Заключение

В области галактического гало предполагается нарушение нулевого энергетического условия, которое является критерием стабильности кротовых нор. В качестве исходных данных в статье взяты метрика кротовой норы типа Морриса-Торна и две профили плотности темной материи - Псевдо-Изотермический профиль и профиль плотности Конденсат Бозе-Эйнштейна. Мы получили тангенциальные скорости  $v^\phi$  пробных частиц в галактическом гало из функции красного смещения кротовой норы. Так как до сих пор не существует неоспоримых данных о кривых вращения в ядре галактик (до 9 КПК) мы рассматривали только центральную и внешнюю области галактик. Графики, изображенные на рисунках 1-2 показывают, что полученные теоретические значения хорошо соответствуют наблюдаемым значениям в диапазоне  $9 \text{ КПК} \leq r \leq 100 \text{ КПК}$ . Таким образом, мы получили подтверждение жизнеспособности нового метода, предложенного Рахаманом и др. [3-4].

### Литература

1. Morris M.S., Thorne K.S. Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity // Am. J. Phys., 1988, pp. 56 – 395.
2. Bhattacharya A., Nigmatzyanov I., Izmailov R., Nandi K.K. Brans-Dicke Wormhole Revisited // Class.Quant.Grav., 2009, 26:235017.
3. Rahaman F. et al. Could wormholes form in dark matter galactic halos? // Astrophys. Space Sci., 2016, pp. 361 – 37.

Рис. 1. Сравнение наблюдаемых кривых вращений (пунктирная линия) и теоретических предсказаний (сплошная линия) для Псевдо-изотермического профиля. Горизонтальная и вертикальная линии расстояние  $r^*$  в КПК и скорость вращения  $v^\phi$  в км/сек соответственно.

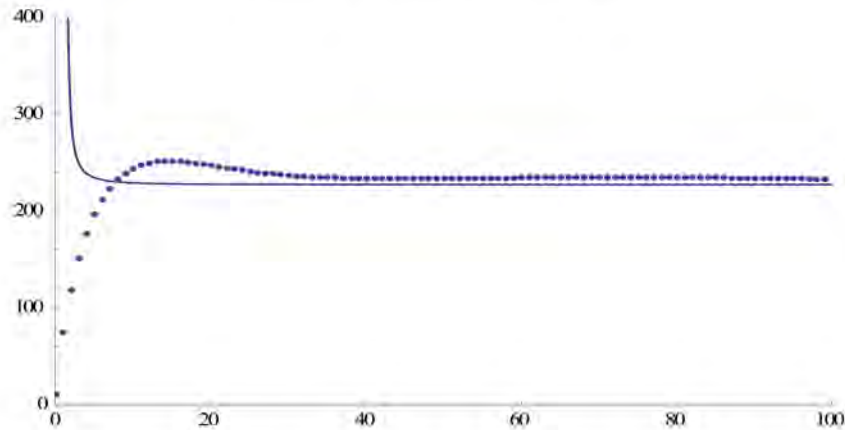


Рис. 2. Сравнение наблюдаемых кривых вращений (пунктирная линия) и теоретических предсказаний (сплошная линия) для профиля плотности Конденсат Бозе-Эйнштейна. Горизонтальная и вертикальная линии расстояние  $r^*$  в КПК и скорость вращения  $v^\phi$  в км/сек соответственно.



4. Rahaman F. et al. Study of galactic rotation curves in wormhole spacetime // *Astrophys. Space Sci.*, 2016, pp. 361 – 90.
5. Begeman K.G., Broeils A.H., Sanders R.H. Extended rotation curves of spiral galaxies: Dark haloes and modified dynamics // *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, 1991, pp. 249 – 523.
6. Potapov A., Izmailov R., Mikolaychuk O., Mikolaychuk N., Ghosh Mithun, Nandi K.K. Constraint on dark matter central density in the Eddington inspired Born-Infeld (EiBI) gravity with input from Weyl gravity // *JCAP.*, 2015, 07, 018
7. V.H. Robles and T. Matos, Flat Central Density Profile and Constant DM Surface Density in Galaxies from Scalar Field Dark Matter, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 422 (2012) 282 [arXiv:1201.3032] [INSPIRE].
8. Bozorgnia N., et al. // *J. Cosmol. Astropart. Phys.* 2013, 1312 – 050
9. Chandrasekhar S. *Mathematical Theory of Black Holes* // Oxford Classic Texts. 1983
10. Nandi K.K., Filippov A.I., Rahaman F., Ray S., Usmani A.A., Kalam M., De Benedictis A. Features of galactic halo in a brane world model and observational constraints // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2009, 399 – 2079
11. Persic M., Salucci P., Stel F. The universal rotation curve of spiral galaxies - I. The dark matter connection // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 1996, 281 – 27.

© Тулеганова Г.Ю., Лукманов А.Р., 2016 г.

УДК 538.9

### **ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПРОДУКТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИТИТАНАТА КАЛИЯ С РАСТВОРАМИ СОЛЕЙ ХРОМА**

Хайрзаманова<sup>1</sup>Э.Э., Шиндров<sup>2</sup> А.А., Саунина<sup>1</sup>С.И., Третьяченко<sup>2</sup> Е.В.,  
Гороховский<sup>2</sup> А.В., Фазлитдинова<sup>1</sup> А.Г., Сафошкин<sup>2</sup> Д.З.

<sup>1</sup>Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

<sup>2</sup>Саратовский государственный технический университет  
им. Гагарина Ю.А., г. Саратов, Россия

#### **Введение**

В настоящее время существует множество различных композитных материалов, широко применяемых в технике. Полититанаты калия (ПТК), модифицированные различными металлами, представляют интерес в области создания материалов с высокой диэлектрической проницаемостью и ионной проводимостью. Этот факт позволяет рассматривать их в качестве высокочастотных конденсаторов, а также приборов, использующих высокую диэлектрическую проницаемость[1].

Целью данной работы было исследование фазового состава формирующейся структуры полититаната калия, модифицированного в растворе  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$  при различных значениях водородного показателя (рН), определение электрофизических характеристик конечных продуктов.

Исследование фазового состава образцов проводилось методом рентгенофазового анализа ( $\text{CuK}_\alpha$  излучения) с применением программного обеспечения «EVA» и картотеки PDF-2. Количественный анализ образцов проводился на спектрометре QUANT'X EDXRF Spectrometer. Определение электрофизических характеристик проводилось методом импедансной спектроскопии на переменном токе в диапазоне частот  $10^{-2}$ - $10^6$  Гц с амплитудой сигнала 100 мВ с помощью импедансметра NovocontrolAlpha.

#### **Объекты исследования**

В работе исследовалось 12 образцов порошкообразного полититаната калия, модифицированного солью хрома при различных значениях рН (3,5,7,9). Образцы прошли термообработку при 25, 500 и 900 °С. Элементный состав исходных образцов (прошедших термическую обработку при 25°С) представлен в табл.1.

Таблица 1. Элементный состав образцов

Образец	Содержание элемента в продукте, масс.%							
	Al	Si	S	K	Ca	Ti	V	Cr
1(pH=3)	0	0	0	6.094	0.011	85.13	0.792	7.972
2(pH=5)	2.4	0	0	1.960	0	86.11	0.610	8.950
3(pH=7)	0.3	0.15	0.30	6.437	0.021	77.43	0.638	14.716
4(pH=9)	0	0.27	0.41	12.410	0.003	72.78	0.706	13.433

### Результаты исследования и их обсуждение

Рентгенограмма ПТК модифицированного солью хрома термообработанного при 25 °С представлена на рис.1. Основной фазой, которая формируется в данном образце является диоксид титана модификации анатаз. На рентгенограмме наблюдаются широкие дифракционные максимумы в области углов  $2\theta \sim 30$  градусов, которые, по-видимому, образуются путем наложения интенсивных максимумов нанодисперсного  $K_2Ti_6O_{13}$ . В исходном образце со значением pH=5 вышеописанные широкие дифракционные максимумы отсутствуют, рис.1.(2).

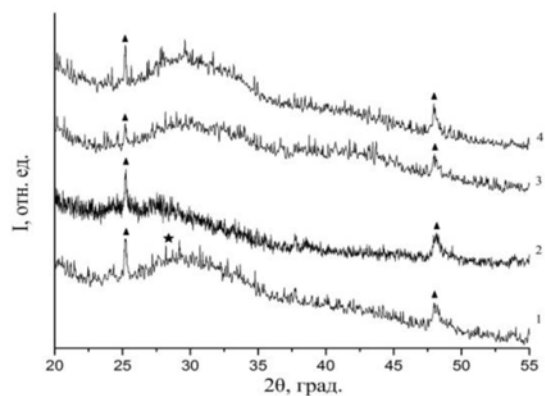


Рис. 1. Фазовый состав ПТК модифицированного солью  $Cr(NO_3)_3$ : 1 - pH 3; 2 - pH 5; 3 - pH 7; 4 - pH 9, где  $\blacktriangle$   $TiO_2$  (анатаз),  $\star$   $K_2Ti_6O_{13}$

Фазовый состав образцов, прошедших термическую обработку при 500 °С представлен фазой анатаза, рис.2(а). При pH=9 кристаллическую

структуру принимает  $K_2Ti_6O_{13}$ . В данном образце также присутствуют дифракционные максимумы, принадлежащие фазе хромата калия ( $K_2CrO_4$ ).

Анализ рентгенограмм ПТК термообработанных при  $T=900^\circ C$ , рис.2(б), показал, что в образцах с pH=3,5,7 формируется диоксид титана в модификациях рутила и анатаза, однако в образце с pH=9 данная фаза отсутствует. Также на рис.2(б) отчетливо видны максимумы принадлежащие  $K_2Ti_6O_{13}$  и хромату калия ( $K_2CrO_4$ ). Нельзя не заметить наличие во всех образцах фазы  $KTi_8O_{16,5}$ .

Таким образом, можно сказать, что изменение фазового состава зависит от количественного содержания ионов хрома и pH, а также температуры обработки. В таблице 2 представлено процентное содержание фаз в образцах. Также присутствует зависимость образования  $TiO_2$  модификации рутил от количественного содержания калия в исходных образцах, табл.1. А именно, чем меньше калия, тем больше образуется рутила в конечных продуктах, табл.2. (900 °С).

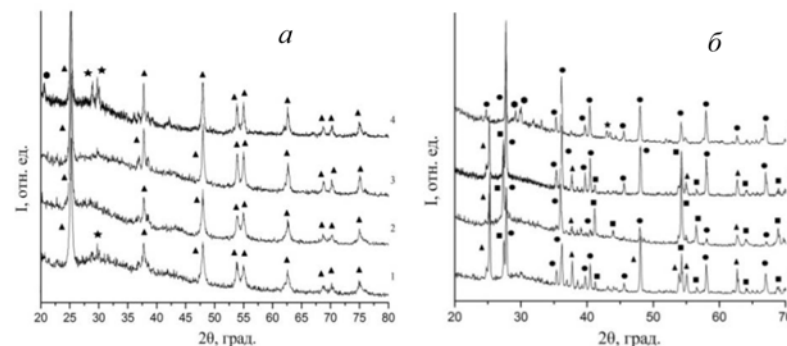


Рис.2. Фазовый состав ПТК модифицированного солью  $Cr(NO_3)_3$  термообработанного при 500 °С (а) и 900 °С (б): 1 - pH 3; 2 - pH 5; 3 - pH 7; 4 - pH 9, где  $\blacksquare$   $TiO_2$  (анатаз),  $\star$   $TiO_2$  (рутил),  $\bullet$  -  $K_2Ti_6O_{13}$ ,  $\blacktriangle$  -  $KTi_8O_{16,5}$ ,  $\blacksquare$  -  $K_2CrO_4$

Таблица 2. Процентное содержание фаз в образцах

Температура обработки	pH	$TiO_2$ (анатаз)	$TiO_2$ (рутил)	$KTi_8O_{16,5}$	$K_2Ti_6O_{13}$ (jeppete)	$K_2CrO_4$
500 °С	3	73,6			26,4	
	5	76,9			23,1	

	7	76,6			23,4	
	9	59,9			22,4	17,7
900°C	3	17,9	9,5	59,5	13,1	
	5	12,7	59	28,3		
	7	5,6	9,5	84,2		
	9			81,5	13,7	4,8

Рассмотрим электрофизические свойства исследуемых образцов. Методом импедансной спектроскопии на переменном токе в диапазоне частот  $10^{-2}$ - $10^6$  Гц была получена частотная зависимость проводимости ПТК с добавлением соли  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$  при различных значениях pH, рис.3. На рисунке для pH=3,5 независимо от температуры обжига на высоких частотах наблюдается практически одинаковая проводимость. Однако, с

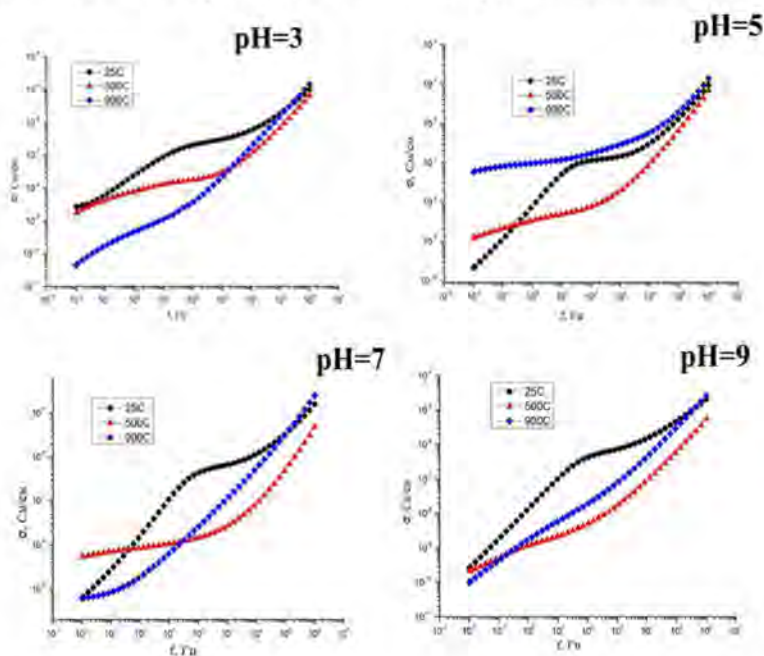


Рис.3. Частотная зависимость проводимости ПТК с добавлением соли  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$  при различных значениях pH

понижением частоты проводимость в зависимости от термообработки изменяется, и на низких частотах она имеет значительные различия. При  $f=10^{-2}$  Гц проводимость с ростом температуры уменьшается (pH=3,7,9), а для образцов с pH=5 зависимость обратная: с ростом температуры проводимость увеличивается и при 900 °C достигает максимального значения  $5 \cdot 10^{-8}$  См/см.

Анализ таблиц 2,3 показал, что максимальному значению проводимости соответствует максимальное содержание фазы рутила ~59%. Отсюда следует, что наибольший вклад в удельную проводимость привносит рутил.

Таблица 3, значения проводимости (частота  $10^{-2}$  Гц)

Температура, °C	Значение pH			
	3	5	7	9
25	$2 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-10}$	$4 \cdot 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-10}$
500	$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$4 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-10}$
900	$3 \cdot 10^{-11}$	$5 \cdot 10^{-8}$	$4 \cdot 10^{-10}$	$9 \cdot 10^{-11}$

Одной из немаловажных характеристик материалов является диэлектрическая проницаемость. Как видно из рис.4  $\epsilon$  растет с понижением частоты. Причиной этого может быть накопление электрических зарядов вблизи блокирующих электродов за счет объемно-зарядной поляризации или же максвелл-вагнеровская релаксация, характерная для слоистых структур с разной проводимостью [2]. Для образцов со значением pH=3,5,7,9 термообработанных при 25 °C в диапазоне частот  $10^1$ - $10^4$  Гц отчетливо прослеживается «выключение» одного из видов поляризации, связанного с дефектностью и неоднородностью образцов. Другой характер поведения  $\epsilon$  при 500 и 900 °C можно объяснить уменьшением дефектности и увеличением упорядочения образцов, удалением  $\text{H}_2\text{O}$  вследствие температурного воздействия. Образец модифицированный при температуре 900 °C со значением pH=5 помимо максимального значения проводимости также имеет максимальное значение диэлектрической проницаемости  $1,5 \cdot 10^6$  в области низких частот, таблица 4. Наибольшее значение  $\epsilon \cdot 4 \cdot 10^7$  у образца с pH=7, T=25 °C объясняется дополнительным «подключением» другого вида поляризации, который исчезает при термическом воздействии при 500 и 900 °C.

Таблица 4, значения диэлектрической проницаемости (частота  $10^{-2}$  Гц)

Температура, °C	Значение pH			
	3	5	7	9
25	$3 \cdot 10^5$	$2,5 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^7$	$3,5 \cdot 10^4$
500	$1 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^5$	$1 \cdot 10^4$
900	$5 \cdot 10^3$	$1,5 \cdot 10^6$	$0,7 \cdot 10^4$	$0,6 \cdot 10^4$

Выявлено, что наибольший вклад в проводимость образцов оказывает фаза рутила. Отмечена зависимость между количеством фазы рутила и содержанием калия в исходных образцах. Прямой взаимосвязи диэлектрической проницаемости с фазовым составом не наблюдается.

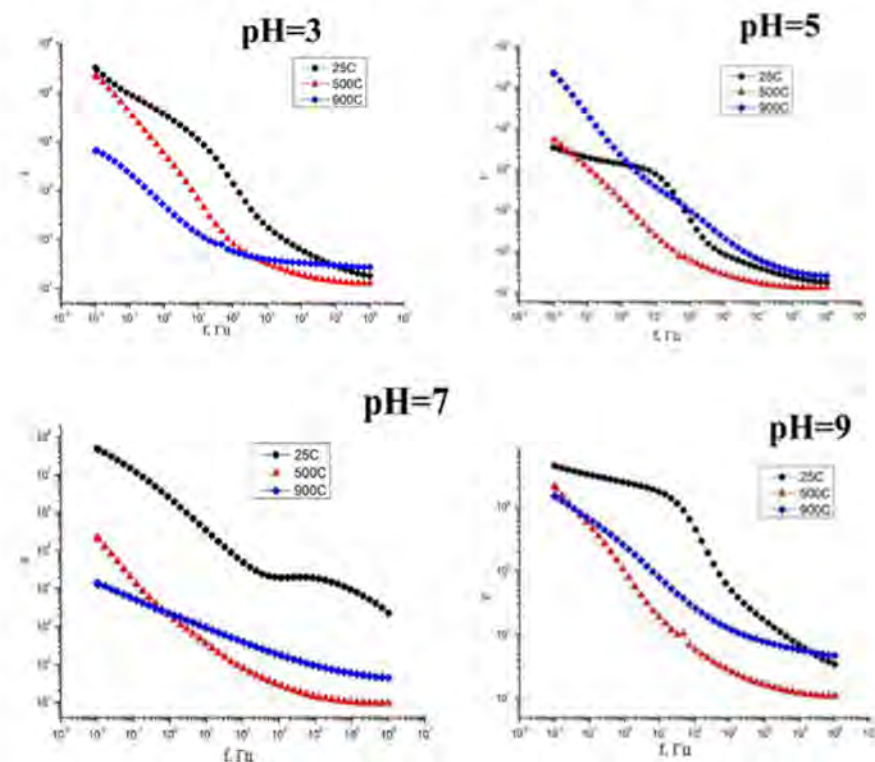


Рис. 4. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости ПТК с добавлением соли  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$  при различных значениях pH

Таким образом, модификация полтитаната калия в растворах солей хрома при различных значениях pH и температуры обработки позволяет получать материалы различного фазового состава, что в свою очередь влияет на их электрофизические свойства в широких пределах. Материалы с высокой диэлектрической проницаемостью, рассматриваются как материалы для создания керамических конденсаторов и приборов, использующих высокую диэлектрическую проницаемость.

*Работа выполнена в рамках проекта № 1242: «Синтез композитных метаматериалов для использования в качестве активных сред накопителей и преобразователей энергии и информации» государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации.*

#### Литература

1. Goffman V. G. Electrical properties of the potassium polytitanate compacts / V.G. Goffman, A.V. Gorokhovskiy, M.M. Kompan, E.V. Tretyachenko, O.S. Telegina, A.V. Kovnev, F. S. Fedorov // J. Alloys and Compounds. - 2014. - Vol. 615, №. 12. - P. 526–529.
2. Гоффман, В. Г. Синтез и электрохимические свойства полтитаната калия, допированного серебром / А.В. Гороховский., Н.В. Горшков, Е.В. Третьяченко, О.С. Телегина., А.В. Ковнев // Вестник СГТУ. - 2011. - №2с. - С.107-111.

© Хайрзаманова Э.Э., Шиндров А.А., 2016 г.

## ХИМИЯ

УДК 66.097.4

### **ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ДИМЕТИЛДИАЛЛИЛАММОНИЙ ХЛОРИДА**

\*Залимова М.М, Залимов Т.Р.

\*СФ БашГУ, г. Стерлитамак

АО «Салаватский химический завод»

Синтетические полиэлектролиты приобретают все большее значение в науке, технике, медицине и сельском хозяйстве. Они используются в качестве флокулянтов в химической и нефтехимической промышленности и в ряде других производств: для очистки промышленных оборотных и сточных вод, сахара, ультрафильтрации ферментов, для осаждения полимерных латексов, стабилизации взвесей и пищевых жидкостей.

Широкое применение полимерных полиэлектролитов в предприятиях водоканалов, районных очистных сооружениях определяет необходимость промышленного производства полимерных флокулянтов в достаточных количествах и разнообразии.

Рост требований к получению новых полимеров и сополимеров заданного стереохимического строения и молекулярной массы стимулирует исследования по проблемам синтеза и механизма образования этого класса полимерных соединений. В связи с этим разработка путей целенаправленного синтеза полиэлектролитов ряда N,N-диалкил -N,N- диаллиламмоний галогенидов (ДАДААГ) заданного химического состава, строения и молекулярных масс является актуальной задачей.

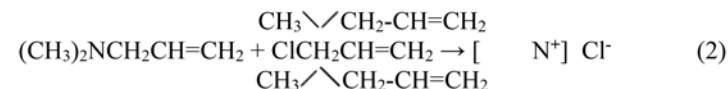
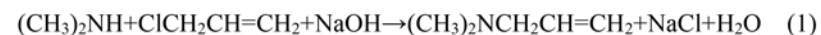
Для очистки питьевой воды в системах хозяйственно-питьевого водоснабжения содержание остаточного мономера в полиэлектролитах должно быть менее 0,5%, что соответствует требованиям МУ 2.1.4.1060-01 «Санитарно-эпидемиологический надзор за использованием синтетических полиэлектролитов в практике питьевого водоснабжения»;

Одним из основных способов получения полиэлектролитов является радикальная полимеризация и сополимеризация ионогенных мономеров, в частности, диаллиловых мономеров [1].

Для получения полиэлектролита, не содержащего хлорида натрия, предлагается проводить синтез мономера диметилдиаллиламмоний хлорида (ДМДААХ) в две стадии. На первой стадии согласно уравнению (1) образуется диметилаллиламин (ДМАА), который выделяют из реакционной смеси. На второй стадии реакции ДМАА с хлористым аллилом (ХА) получают ДМДААХ (2).

153

Далее ДМДААХ, не содержащий хлорида натрия, полимеризуют в водном растворе под действием радикального инициатора с получением бессолевого водного раствора полидиметилдиаллиламмоний хлорида (ПДМДААХ).



Полидиметилдиаллиламмоний хлорид марки ВПК-402 ранее получали полимеризацией диметилдиаллиламмоний хлорида (ДМДААХ) в присутствии радикал образующих инициаторов: персульфата аммония  $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$  или персульфата калия  $(\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8)$ , причем инициатор загружали в виде 30% водного раствора. Водородный показатель раствора мономера перед загрузкой инициатора рН (7÷8) и во время полимеризации рН (5÷8) в реакторе поддерживается добавлением водного раствора натра едкого. По окончании полимеризации (если при очередной загрузке порции инициатора температура не повышается) определяется массовая доля мономера (не более 1,34 - 2,2 %.)

Оптимизация процесса полимеризации диметилдиаллиламмоний хлорида включает полимеризацию мономера ДМДААХ в присутствии радикалообразующего инициатора, в количестве 0,6-0,8% персульфата аммония (ПСА) или персульфата калия (ПСК) по отношению к ДМДААХ и 0,13% перекиси водорода при температуре 60-90°С в токе азота. Кислород воздуха оказывает ингибирующее действие на инициатор [2].

Дозировку инициаторов - (ПСА) или ПСК производят в сухом виде при начальном рН = 5 - 6. Процесс полимеризации ведут в кислой среде при рН = 2 - 5, поддерживая данную величину рН дозировкой инициатора: собственная кислотность инициаторов: перекись водорода и ПСА имеет рН = 3 - 3,5. В присутствии влаги и в щелочной среде идет разложение инициатора, приводящее к снижению его активности.

Отрицательное влияние на полимеризацию ДМДААХ оказывают ионы  $\text{Fe}_3^+$ , приводя к дезактивации инициатора, тем самым уменьшают выход полимера, и как следствие вязкость образующегося полиДМДААХ. Реагентами, связывающими ионы  $\text{Fe}_3^+$  в комплекс, могут служить динатриевая соль этилендиаминтетрауксусной кислоты, а также уротропин, трибутилфосфат и ортофосфорная кислота. Последние являются более доступными и дешевыми.

Результаты лабораторных экспериментов по изучению влияния количества инициатора и скорости его дозирования на содержание

154

остаточного мономера и продолжительность полимеризации приведены в таблице 1.

Таблица 1

Кол-во инициатора на 100% ДАДМАХ, г/%	5,5г/0,7%	6,8г/0,9%	8г/1,1%	9,3г/1,2%	11,3г/5%
Массовая доля остаточного мономера, (в пересчете на 100% ДАДМАХ), %	3,0	1,02	0,87	0,65	0,22
Продолжительность полимеризации, час	2,5	5	7,5	10	12,5

Условия полимеризации: концентрация исх. мономера -50÷60%, объем мономера 1,5 л (1,6 кг), рН=3; температура 80-90°C; Трилон «Б»-1% (от 100% мономера); продувка азотом. Инициатор дозируют с интервалом 2 - 2,5 часа.

Из полученных результатов видно, что для достижения наименьшего значения остаточного мономера необходимо инициатор дозировать медленно по мере его срабатывания. В готовом ВПК-402 доводят величину рН до нормы (рН = 6 - 8) дозировкой (30 - 35)% раствора натрия гидроксида

Механизм распада персульфата калия (персульфата аммония) на свободные радикалы включает гидролиз пероксидисульфата калия в водной среде, ускоряемый при нагревании, с образованием гидросульфата калия и пероксида водорода по реакции (3):



Очевидно, что инициатором реакции полимеризации ДМДААХ является пероксид водорода.

Известно, что распад пероксида водорода на радикалы ускоряют водородные ионы (кислая среда) или присутствие аминов [3]. Из патента [4] следует, что для получения высокомолекулярного полимера процесс проводят при равномерном и медленном дозировании инициатора [5]. Следует отметить, что для состава продуктов реакции определяющим является не иницирование, а развитие цепи, прежде всего природа

передающих цепь радикалов, часто отличающихся от иницирующих радикалов.

В этой связи положительным моментом при получении высокомолекулярного полимера, может оказаться частичная замена инициатора - персульфата калия на пероксид водорода.

В начальный момент целесообразно полимеризацию ДМДААХ проводить в присутствии персульфата калия или персульфата аммония, а затем заменить его на пероксид водорода. Смесь не прореагировавшего ДМДААХ и пероксида водорода может оказаться эффективным низкотемпературным инициатором полимеризации ДМДААХ взамен дорогостоящего и дефицитного персульфата калия (персульфата аммония). Особое достоинство пероксида водорода состоит в том, что в противоположность многим другим подобным реагентам от его участия в реакциях никаких примесей кроме воды не образуется.

В массообменных процессах важное значение имеет эффективность перемешивания. Опытно-промышленные испытания по получению ВПК-402 в эмалированных аппаратах поз.30, снабженных якорными мешалками и волнорезами, обеспечивающими перемешивание реакционной массы во всем объеме: центральное и периферийное перемешивание позволяют провести полимеризацию ДМДААХ с высокой эффективностью и конверсией 96-99% и достаточно высокими значениями вязкости полимера.

Результаты анализов опытно-промышленных испытаний проведенных в аппарате поз.30 по срабатыванию остаточного мономера приведены в таблице 2.

Таблица 2

Кол-во инициатора к 100% ДАДМАХ, г/%	35г/ 1%	49г/1,4%+ 10г/0,3% H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	56г/ 1,6%	63г/ 1,8%
Массовая доля остаточного мономера, (в пересчете на 100% ДАДМАХ, %)	1,74	1,57	0,05	0,012

Оптимизация способа полимеризации ДМДААХ позволяет получить высокомолекулярный полимер с остаточным содержанием мономера менее 0,5%, рассчитанный на 100% ПДМДААХ.

Полиэлектролит ВПК-402, полученный по данному способу, соответствует требованиям МУ 2.1.4.1060-01 «Санитарно-эпидемиологический надзор за использованием синтетических

полиэлектролитов в практике питьевого водоснабжения». Полиэлектролит ВПК-402 является аналогом французского полиэлектролита SNF-4540 и поэтому в настоящее время особенно актуальным является замещение импортной продукции на отечественные флокулянты - коагулянты для очистки питьевой воды на водоканалах России и странах ближнего зарубежья.

Таким образом, данный способ получения полиДМДААХ марки ВПК-402 позволяет получить высокомолекулярный полимер с остаточным содержанием мономера менее 0,5% и заменить полиэлектролит марки SNF-4540 французского производства на отечественный ВПК-402.

### Литература

1. Д.А. Топчиев, Ю.А. Малкодуев. Катионные полиэлектролиты. - М.: ИКЦ «Академкнига», 2004. - 232с.
2. Патент РФ 2223282. Б.И. - 2004.-№4.
3. Р.Х. Фрейдлина, Ф.К. Величко, С.С. Злотский, Д.Л. Рахмангулов, А.Б. Терентьев. Радикальная теломеризация. - М.: Химия, 1988. - 288с.
4. Патент РФ 2062274. Б.И. 1996. - №17.
5. Химия и технология перекиси водорода. /Под редакцией Г.А. Серышева. - Л.: Химия, 1984. - 200с.

© Залимова М.М, Залимов Т.Р., 2016 г.

УДК 547.222

### ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ТРЕТ-БУТИЛХЛОРИДА

Залимова М.М.\* , Залимов Т.Р.

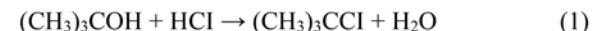
\*СФ БашГУ, г. Стерлитамак

АО «Салаватский химический завод»

Трет-бутилхлорид (ТБХ) используется в качестве алкилирующего агента для синтеза ряда соединений, используемых в нефтехимии, а также в качестве сокатализатора в комбинации с  $AlCl_3$  или алюминийорганическими соединениями в процессах катионной полимеризации. По совокупности физико-химических свойств трет-бутилхлорид является идеальным катионным сокатализатором в процессах получения ненасыщенных, гидрированных и ароматизированных полиолефиновых основ синтетических смазочных материалов [1].

Отсутствие производства трет-бутилхлорида в России и трудности, сопряженные с закупкой его за границей, являлись сдерживающим факторами использования трет-бутилхлорида в отечественной химической и нефтехимической промышленности.

Одним из первых опубликованных способов получения ТБХ было взаимодействие трет - бутилового спирта с концентрированной соляной кислотой (1):



Ранее был разработан способ получения трет-бутилхлорида прямым синтезом из изобутилена и хлористого водорода (2) в блочном графитовом теплообменнике полочного типа. Температура процесса -20 до -25 °С, объемное соотношение хлористого водорода и изобутилена 1,03-1,05:1, объемная скорость подачи реагентов 803,9-1265 ч-1 [2].

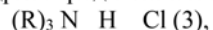


Скорость процесса зависит от растворимости хлористого водорода в изобутилене. В условиях синтеза изобутилен сконденсирован, но в виду малой растворимости хлористого водорода в жидком изобутилене высокий выход третичного бутилхлорида, равный 98,7% достигается при проведении процесса в реакторе с соотношением длины к его сечению 375-1250:1.

Удаление растворенного хлористого водорода (HCl) из ТБХ - сырья производится отпаркой HCl с последующей абсорбцией хлористого водорода оборотной водой с получением слабого раствора соляной

кислоты, не находящего квалифицированного потребления. Нагревание кислого нестабильного ТБХ – сырца в процессе отпарки ведет к дегидрохлорированию с выделением исходного изобутилена, с последующим образованием продуктов его осмоления.

Третичный бутилхлорид, соответствующий требованиям ТУ 2412-239-00203312-2003 (массовая доля влаги - не более 0,02 %, массовая доля ТБХ - не менее 99,0 %, массовая доля HCl – не более 0,015%), получают взаимодействием изобутилена с хлористым водородом при температуре минус минус 15 ÷ +5°C и давлении 0,1 МПа в среде продуктов реакции, организованной рециклом части образующегося ТБХ, при мольном соотношении изобутилен хлористый водород =1:1÷1,02 [5]. Гидрохлорирование изобутилена осуществляют абгазным хлористым водородом, образующимся в результате заместительного хлорирования углеводородов или пиролиза хлорпроизводных в присутствии гидрохлорида амина общей формулы:



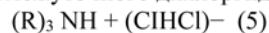
где R- метил-, этил и др.

или гидрохлорида диметилформамида (DMF):



Каталитический комплекс – гидрохлорид амина (амида) образуется in situ при смешении хлористого водорода с азотсодержащими соединениями (третичные амины или амиды), взятыми в количестве 0,001-0,05 % масс.от реакционной массы.

Гидрохлорид амина (амида) проявляет основные свойства, благодаря чему легко координирует хлористый водород с образованием промежуточного дихлоргидратного комплекса, общей формулы:



или  $(R)_2 NHCOH + (ClHCl) - (5)$ ,

где R- метил-, этил и др.,

легко вступающего в реакцию гидрохлорирования изобутилена с получением третичного бутилхлорида и регенерацией каталитического комплекса (3) или (4). Состав и структура образующихся комплексов приведены на основании литературных данных [4], которые были установлены путем исследования ионно-молекулярных взаимодействий в растворах HCl в DMF в широком диапазоне концентраций HCl на основании данных ИК-спектроскопии.

Трет- бутилхлорид - сырец, содержащий растворенный хлористый водород, подвергают нейтрализации органическими или неорганическими акцепторами хлористого водорода. Выделение готового продукта – ТБХ производится дистилляцией, фильтрацией или фильтрацией с последующей дистилляцией. Кубовый продукт дистилляции при взаимодействии с уротропином приводит к

образованию четвертичных аммониевых солей, обладающих бактерицидными и ингибирующими коррозию металлов свойствами.

### Литература

1. I Матковский П.Е., Старцева Г.П., Савченко В.И., Троицкий В.Н.,Алдошин С.М., Станкович В., Михайлович Дж. Технология получения ненасыщенных, гидрированных и ароматизированных поли-альфа-олефиновых основ синтетических масел // Наука-производству.-2001, № 8, с. 6-11.
2. 2 Пат. № 2129114// БИ. № 11. 1999.
3. 4.Ю.А. Сангалов, К.С. Минскер. Полимеры и сополимеры изобутилена. – Уфа.: Гилем, 2001.- 383с.

© Залимова М.М., Залимов Т.Р., 2016 г.

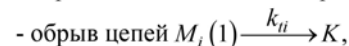
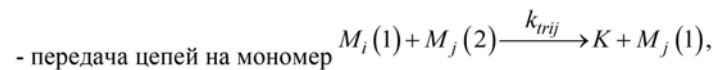
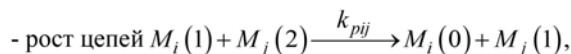
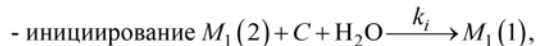


**МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКРОКИНЕТИКИ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА  
БУТИЛКАУЧУКА В ТРУБЧАТОМ ТУРБУЛЕНТНОМ РЕАКТОРЕ  
ДИФFUЗОР-КОНFUЗОРНОЙ КОНСТРУКЦИИ**

Захаров В.П.<sup>1</sup>, Ганиев Г.М.<sup>2</sup>, Круглова А.Е.<sup>2</sup>,Степанова В.А.<sup>2</sup>, Терещенко К.А.<sup>2</sup>, Улитин Н.В.<sup>2</sup><sup>1</sup> Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия<sup>2</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, Россия

Бутилкаучук – материал, отличающийся своей герметичностью, благодаря чему он нашел широкое применение от герметиков (низкомолекулярный бутилкаучук) до камер автомобильных шин (высокомолекулярный бутилкаучук) [1]. Синтез бутилкаучука представляет собой катионную сополимеризацию изобутилена с изопреном и протекает лишь в точке ввода катализатора в виде трудноуправляемого процесса с факельным фронтом. Факельный характер процесса негативно влияет на свойства бутилкаучука, так как приводит к неравномерности условий его синтеза в различных точках реактора и образованию низкомолекулярного бутилкаучука, налипающего на теплообменные поверхности реактора, [1]. Этого можно избежать, усилив перемешивание реакционной массы и не допуская образования точек ее локального перегрева. Тогда, как было показано в работах В.П. Захарова, К.С. Минскера, А.А. Берлина и др. [2], наиболее перспективными для проведения подобного рода быстрых химических процессов являются трубчатые турбулентные реактора цилиндрической и диффузор-конфузорной конструкций. Поэтому целью данной работы стало создание теоретического описания и установление теоретических закономерностей макрокинетики процессов синтеза бутилкаучука в трубчатых турбулентных реакторах цилиндрической и диффузор-конфузорной конструкций.

При разработке теоретического описания рассматривали используемый в промышленности процесс синтеза бутилкаучука на катализаторе  $AlCl_3$  в среде  $CH_2Cl$  [2, 3] в диапазоне температур 173-223 К. Кинетическая схема этого процесса, записанная с помощью модифицированной концепции блоков связей [4], имеет вид [5-8]:



где  $k$  – кинетические константы соответствующих реакций;  $C$  – молекула  $AlCl_3$ ;  $M_i(j)$  – молекула мономера ( $j = 2$ ), активное концевое ( $j = 1$ ) или внутреннее ( $j = 0$ ) звено цепи (при  $i = 1$  – изобутиленовое звено; при  $i = 2$  – изопреновое звено);  $K$  – неактивное концевое звено цепи.

На основе данной кинетической схемы разработали кинетическую модель, уравнения которой имеют общий вид:

$$d[C]/dt = f_1([M_i(j)], [K], \dots, k),$$

$$d[M_i(j)]/dt = f_i([M_i(j)], [K], \dots, k),$$

$$d[K]/dt = f_k([M_i(j)], [K], \dots, k),$$

Значения  $k_i$  взяли из работы [3]. Температурную (аррениусовскую) зависимость константы  $k_{p11}$  рассчитали по данным о значениях этой кинетической константы при двух температурах из работы [3].

Температурные зависимости остальных кинетических констант определили в ходе решения обратной кинетической задачи, заключающейся в минимизации расхождения между рассчитанными по модели и экспериментальными данными о кинетике рассматриваемого процесса и молекулярно-массовых характеристиках бутилкаучука. Решение разбили на этапы.

На первом этапе на основе данных о влиянии температуры на степень полимеризации полиизобутилена из работы [3] рассчитали температурные зависимости кинетических констант  $k_{r11}$  и  $k_{i1}$ .

На втором этапе на основе экспериментальной кинетической кривой изобутилена в процессе синтеза бутилкаучука [9] рассчитали температурные зависимости кинетических констант  $k_{p22}$  и  $k_{p21}$ . Температурные зависимости кинетических констант  $k_{p12}$  и  $k_{p21}$  задавали через температурные зависимости  $k_{p11}$  и  $k_{p22}$  и значения констант сополимеризации из работы [3].

На третьем этапе на основе данных о влиянии начальной концентрации изопрена на среднечисленную молекулярную массу бутилкаучука из работы [3] при температуре синтеза 173 К определили значения кинетических констант  $k_{r12}$  и  $k_{r21}$  температуре 173 К. Значение кинетической константы  $k_{r22}$  не определяли из-за низкой реакционной способности изопрена по сравнению с изобутиленом. Это значение приняли равным 0.

На четвертом этапе на основе данных о влиянии температуры на среднечисленную степень полимеризации бутилкаучука из работы [3] и

значениях  $k_{ir12}$  и  $k_{ir21}$  при 173 К рассчитали температурные зависимости кинетических констант  $k_{ir12}$  и  $k_{ir21}$ .

Таким образом, все константы кинетической схемы рассматриваемого процесса были установлены. Полученные результаты были использованы для моделирования макрокинетики процессов синтеза бутилкаучука в трубчатых турбулентных реакторах цилиндрической и диффузор-конфузорной конструкции в программном пакете вычислительной гидродинамики ANSYSFluent. Результаты расчета полей концентраций компонентов реакционной массы в реакторе цилиндрической конструкции приведены на рис. 1 и 2.

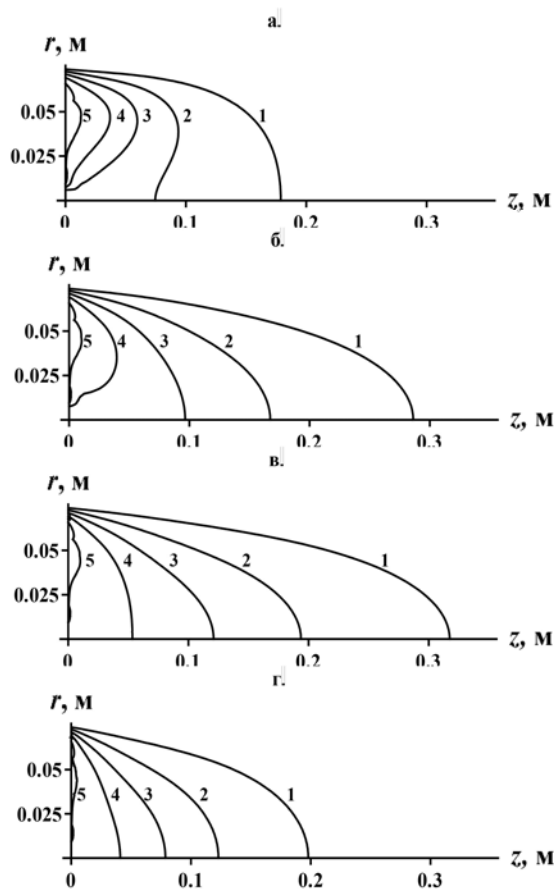


Рис. 2. Полученное в результате расчета в программном пакете вычислительной гидродинамики ANSYS Fluent поле концентраций изобутилена (показан разрез реактора вдоль его оси) в трубчатом турбулентном реакторе цилиндрического типа (диаметр реактора – 0.15 м) для процесса синтеза бутилкаучука при различных скоростях движения реакционной массы по реактору  $v$ : а) 1; б) 3; в) 6; г) 10 м/с;  $r$  – радиальная координата;  $z$  – осевая координата; числа вблизи изолиний показывают концентрацию изобутилена (моль/л)

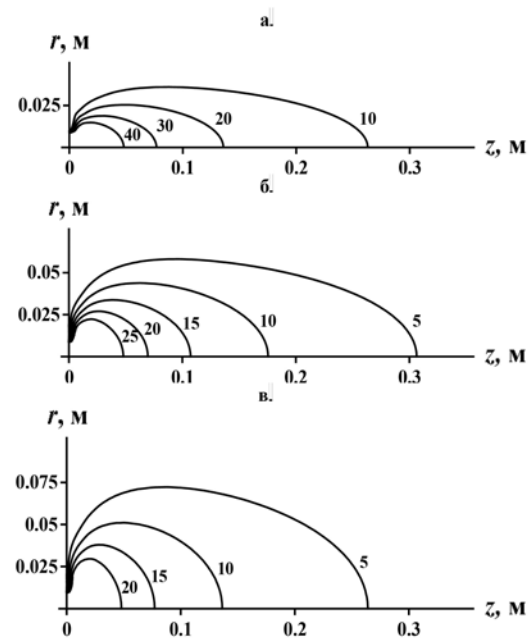


Рис. 3. Полученное в результате расчета в программном пакете вычислительной гидродинамики ANSYSFluent поле концентраций активных центров (показан разрез реактора вдоль его оси) в трубчатом турбулентном реакторе цилиндрического типа для процесса синтеза бутилкаучука (скорость движения реакционной массы 3 м/с) при различных диаметрах реактора  $d$ : а) 0.1; б) 0.15; в) 0.2 м;  $r$  – радиальная координата;  $z$  – осевая координата; числа вблизи изолиний показывают концентрацию активных центров (ммоль/л)

Созданное теоретическое описание может быть использовано в дальнейшем для настройки режимов работы трубчатых турбулентных реакторов синтеза бутилкаучука цилиндрической и диффузор-конфузорной конструкций.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-50183 мол\_нр.*

## Литература

1. Chemical Weekly, 2009, v. 55, № 12, pp. 207.
2. Deberdeev, R.Ya. Fast chemical reaction in turbulent flows: theory and practice. R.Ya. Deberdeev, A.A. Berlin, G.S. Dyakonov, V.P. Zakharov, Yu.B. Monakov. – Shawbury: Smithers Rapra Technology Ltd, 2013. – 334 p.
3. Sangalov, Yu.A. Polymers Derived from Isobutylene: Synthesis, Properties, Application / Yu.A. Sangalov, K.S. Minsker, G.E. Zaikov. – Utrecht: VSP, 2001. – 372 p.

4. Улитин, Н.В. Методы моделирования кинетики процессов синтеза и молекулярно-массовых характеристик полимеров: монография / Н.В. Улитин, К.А. Терещенко. – Казань: Изд-во Казан.нац. исслед. технол. ун-та, 2014. – 228 с.
5. Kennedy, J.P. Fundamental Studies on Cationic Polymerizations I. The Inversion Temperature / J.P. Kennedy, R. Thomas // Journal of Polymer Science, 1961, v. 55. pp. 311-320.
6. Kennedy, J.P. Carbocationic polymerization in the presence of sterically hindered bases. X. Summary and quantitative kinetic confirmation of the mechanism / J.P. Kennedy, T. Kelen, S.C. Guhaniyogi, R.T. Chou // Journal of Macromolecular Science, 1982, v. 18(A), № 1, pp. 129-152.
7. Kennedy, J.P. An Attempt to adapt superacid chemistry for "living" carbenium ion polymerization / J.P. Kennedy, E. Melby, J. Johnston // Journal of Macromolecular Science, 1974, V. 8(A), № 3, pp. 463-468.
8. Kennedy, J.P. Cationic polymerization of olefins: a critical inventory. / J.P. Kennedy – New York: Wiley Interscience, 1975. – 337 p.
9. Markina, E.A. Production of butyl rubber by suspension polymerisation using a modified catalytic system / E.A. Markina, S.Z. Chelnokova, O.V. Sofronova, R.A. Akhmed'yanova, A.S. Ziyatdinov, R.T. Shiyapov, A.G. Sakhabutdinov, N.R. Gil'mutdinov, K.K. Gil'manov // Journal International Polymer Science and Technology, 2010, v. 37, № 3, pp. 7-10.

© Захаров В.П., Ганиев Г.М., Круглова А.Е., Степанова В.А., Терещенко К.А., Улитин Н.В., 2016 г.

УДК 544.42 + 547.315.2

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИНЦИПОВ УПРАВЛЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНО-МАССОВЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ПОЛИБУТАДИЕНА, ПОЛУЧАЕМОГО ИОННО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИЕЙ В ПРИСУТСТВИИ МОДИФИЦИРОВАННОЙ В ТУРБУЛЕНТНЫХ ПОТОКАХ ТИТАНОВОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ**

Зиганшина А.С.<sup>1</sup>, Терещенко К.А.<sup>1</sup>, Ганиев Г.М.<sup>1</sup>,  
Захаров В.П.<sup>2</sup>, Улитин Н.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, Россия

<sup>2</sup> Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Широко применяемые в производствах полиолефинов и полидиенов каталитические системы Циглера-Натта представляют собой продукт взаимодействия соединений переходных металлов с алкилами или галогеноалкилами металлов II-III групп [1]. Полученный в результате такого взаимодействия каталитически активный осадок имеет на поверхности своих частиц активные центры, строение и тип которых определяется взаимным расположением молекул компонентов каталитической системы [2, 3]. Поскольку процессы полимеризации в присутствии каталитических систем Циглера-Натта носят гетерофазный характер, активность и полицентровость последних (количество типов активных центров) зависят от площади поверхности частиц и дисперсного состава каталитически активного осадка. Такая зависимость дает возможность воздействия на скорость полимеризации и молекулярные характеристики синтезируемых продуктов за счет физической модификации микрогетерогенных каталитических систем Циглера-Натта. Как показали в работах [4-6], модифицирующим фактором может выступать кинетическая энергия турбулентности. Для этого толуольный раствор каталитически активного осадка системы  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$  и бутадиена пропустили через трубчатый турбулентный аппарат диффузор-конфузорной конструкции, что привело к диспергированию частиц каталитически активного осадка и, как следствие, к перераспределению концентраций относящихся к различным типам активных центров, ускорению процесса полимеризации и изменению молекулярно-массовых характеристик полибутадиена [4-6]. Результаты работ [4-6] являются экспериментальным фундаментом для теоретического описания данного процесса. Оно в свою очередь позволит сформулировать принципы управления кинетикой процесса синтеза и молекулярно-массовыми характеристиками полибутадиена, получаемого на модифицированной в турбулентных потоках каталитической системе

TiCl<sub>4</sub>-Al(i-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>3</sub>. Разработка такого теоретического описания стала целью настоящего исследования.

Для достижения поставленной цели теоретически описали процессы, экспериментально исследованные в работах [4-6]:

1) пропускание толуольных растворов TiCl<sub>4</sub>-Al(i-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>3</sub> и бутадиена через шестисекционный трубчатый турбулентный аппарат диффузор-конфузорного типа в течение 2-3 с;

2) синтеза полибутадиена в лабораторном реакторе, представляющем собой круглодонную колбу, при температуре реакционной массы  $T = 298$  К на немодифицированных и модифицированных в начальный момент полимеризации частицах TiCl<sub>4</sub>-Al(i-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>3</sub> при начальных концентрациях компонентов  $[TiCl_4]_0 = 3$  и  $5$  ммоль,  $[C_4H_6]_0 = 1.5$  ммоль,  $[Al(i-C_4H_9)_3]_0/[TiCl_4]_0 = 1.4$ .

Моделирование этих процессов провели в программном пакете ANSYSFluent, построив в нем трубчатый турбулентный аппарат диффузор-конфузорного типа и круглодонную колбу в виде расчетных сеток следующих габаритов: диаметр диффузора 0.024 м, диаметр конфузора 0.015 м, длина диффузор-конфузорной секции 0.048 м, угол раскрытия диффузора 45° (турбулентный аппарат); диаметр колбы 0.047 м; тип перемешивающего устройства – двухлопастная магнитная мешалка; диаметр магнитной мешалки 0.0225 м (колба).

Моделирование в ANSYSFluent заключалось в численном решении в каждом узле сеток системы уравнений сохранения массы, импульса и энергии, уравнений  $K-\varepsilon$  модели турбулентности. Эти уравнения имеют общий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho X) + \sum \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i X) = Y \sum \frac{\partial^2 X}{\partial x_i^2} + Z,$$

где  $\rho$  – плотность реакционной массы;  $x_i$  –  $i$ -ая координата пространства;  $u_i$  –  $i$ -ая компонента вектора скорости реакционной массы;  $X$  – параметр, для которого выполняется закон сохранения;  $Y$  – переносное свойство;  $Z$  – источник член.

Расчет процесса диспергирования (изменения размеров) частиц каталитически активного осадка проводили по встроенной в ANSYSFluent модели Population Balance:

$$\frac{\partial n_V}{\partial t} + \sum \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i n_V) + \frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{\partial V}{\partial t} n_V \right) = \int_V c \cdot v_V \cdot \alpha \cdot n_V dV' - v_V n_V,$$

$$v_V = C_1 \frac{\varepsilon^{1/3}}{(1 + vol)V^{2/9}} \exp \left( - \frac{C_2 \sigma (1 + vol)^2}{\rho_l \varepsilon^{2/3} V^{5/9}} \right),$$

167

$$\alpha = 0.5 \left[ \frac{C}{V'} + \frac{1-C/2}{V'} \left\{ 24 \left( \frac{V'}{V} \right)^2 - 24 \left( \frac{V'}{V} \right) + 6 \right\} \right].$$

Здесь  $n_V$  – концентрация частиц каталитически активного осадка объемом  $V$ ;  $c$  – количество дочерних частиц, образующихся при распаде исходной частицы;  $\alpha$  – вероятность диспергирования частицы дисперсной фазы от объема  $V'$  до объема  $V$ ;  $C$ ,  $C_1$ ,  $C_2$  – параметры модели;  $\varepsilon$  – скорость затухания кинетической энергии турбулентности;  $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения;  $vol$  – объемная доля частиц каталитически активного осадка;  $\rho_l$  – плотность жидкой фазы. Параметры модели –  $C = 2.6$ ,  $C_1 = 8 \cdot 10^{-4}$  и  $C_2 = 3.5 \cdot 10^{-5}$  – подобрали из условия наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных дисперсных составов (распределений по радиусу) частиц каталитически активного осадка на выходе из трубчатого турбулентного аппарата (рис. 1).

Эти распределения были уточнены с учетом установленного в работе [6] «расклинивающего» эффекта, который заключается в разрушении частиц TiCl<sub>4</sub>-Al(i-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>3</sub> в процессе полимеризации из-за роста на них полимерных цепей. Для моделирования «расклинивающего» эффекта процесс разрушения частицы TiCl<sub>4</sub>-Al(i-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>3</sub> представили в виде ветвящегося процесса. Поколению этого ветвящегося процесса соответствует количество разрушений одной частицы, которое растет с увеличением на ней способствующих разрушению активных центров. Количество таких активных центров представили как функцию от радиуса частицы  $M_R$ . Далее записали формулу для определения доли частиц, которые прекратят разрушение в  $i$ -ом поколении, и связали  $i$  с радиусом частицы в этом поколении. После преобразований данной формулы получили выражение для расчета дискретного распределения по размерам частиц TiCl<sub>4</sub>-Al(i-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>3</sub>, образовавшихся из частицы радиусом  $R_0$  в результате действия «расклинивающего» эффекта:

$$\frac{\Delta q}{\Delta R} = \frac{3}{R \ln 2} e^{1-(R/R_0)^3 - M_R(R/R_0)^3} \left( 1 - \sum_{R=R}^{R=R_0} \frac{\Delta q}{\Delta R} \Delta R \right). \quad (1)$$

Здесь  $\Delta q$  – объемная доля частиц, прекративших разрушаться, имея радиус  $R$  (радиус исходной частицы –  $R_0$ ),  $\Delta R$  – шаг дискретного распределения по радиусам частиц.

Конечные распределения после действия «расклинивающего» эффекта  $\Delta Q$  определили как суперпозицию распределений (1), пропорциональных исходному распределению частиц по радиусам  $\Delta Q_0$ :

$$\Delta Q = \sum_{R=R}^{R=\infty} \Delta q \Delta Q_0.$$

168

Зависимость  $M_R$  от  $R$  подобрали таким образом, чтобы результаты данного расчета наиболее точно согласовались с экспериментальными распределениями частиц  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$  до и после действия «расклинивающего» эффекта из работы [6] (рис. 1).

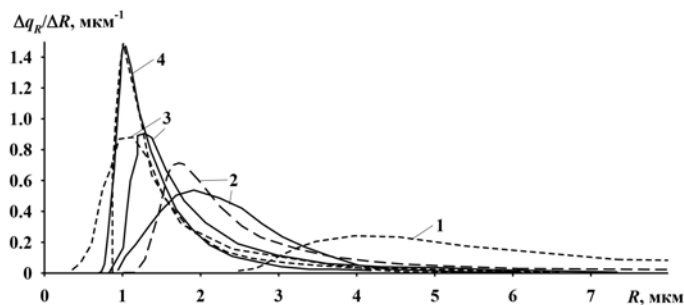
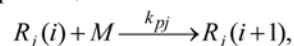
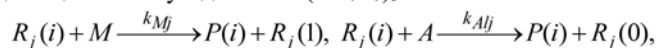


Рис. 1. Распределения частиц  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$  по радиусу: 1, 3 – до действия «расклинивающего» эффекта; 2, 4 – после действия «расклинивающего» эффекта; 1, 2 – недиспергированные частицы; 3, 4 – диспергированные частицы; сплошные линии – расчет; пунктирные линии – эксперимент [6]

При моделировании кинетики процесса синтеза полибутадиена за основу взяли кинетическую схему данного процесса из работ [4, 5], включающую реакции роста цепей

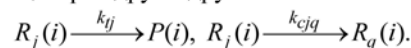


и передачи цепей на бутадиен и  $Al(i-C_4H_9)_3$



протекающие на четырех типах активных центров на недиспергированных частицах  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$ , и на трех типах активных центров на диспергированных частицах  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$  (этот факт был доказан в работах [4, 5] путем решения обратной задачи молекулярно-массового распределения). Здесь  $R_j(i)$  – активная цепь из  $i$  звеньев;  $j = 1-4$  – тип активного центра на конце растущей цепи;  $M$  – молекула бутадиена;  $A$  – молекула  $Al(i-C_4H_9)_3$ ;  $k$  – константы скоростей соответствующих реакций;  $P(i)$  – неактивная цепь из  $i$  звеньев.

Помимо этих реакций, в качестве потенциально возможных в кинетическую схему процесса включили также реакции дезактивации и перехода активных центров друг в друга



Активности активных центров рассчитывали, исходя из размеров частиц каталитически активного осадка. Ввели формулы, аппроксимирующие зависимости этих активностей от радиуса частиц каталитически активного осадка  $r$  (мкм). Минимизируя расхождение рассчитанных и экспериментальных значений активностей модифицированной в турбулентных потоках и немодифицированной системы  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$  при  $[TiCl_4]_0 = 3$  ммоль/л и  $[TiCl_4]_0 = 5$  ммоль/л, определили коэффициенты этих формул:

$$S_1(R) = \frac{S}{\frac{8210}{R^{7.44}} + \frac{1}{0.164 + 0.0581R}}, \quad S_2(R) = S(0.611R - 0.0232R^2) - S_1,$$

$$S_3(R) = S(0.337R + 0.0252R^2), \quad S_4(R) = S(0.0224R + 0.0102R^2),$$

Здесь  $S$  – величина активности, определяемая исходной концентрацией  $[TiCl_4]_0$  и модификацией каталитической системы.

Константы  $k$  определили, разработав кинетическую модель процесса и решив на ее основе обратную кинетическую задачу. Для этого, варьируя значения всех  $k$ , минимизировали расхождение между численно рассчитанными по кинетической модели временными зависимостями: 1) конверсии бутадиена; 2) активностей активных центров; 3) значениями молекулярно-массовых характеристик получаемого полибутадиена, – и аналогичными экспериментальными зависимостями из работ [4] и [5].

После того, как все кинетические параметры процессов получения полибутадиена на модифицированной в турбулентных потоках и немодифицированной каталитической системе  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$  при  $[TiCl_4]_0 = 3$  ммоль/л и при  $[TiCl_4]_0 = 5$  ммоль/л были установлены, макрокинетику процесса полимеризации бутадиена в колбе рассчитали в ANSYSFluent. Рассчитанные временные зависимости значений молекулярно-массовых характеристик получаемого полибутадиена приведены на рис. 2-3.

Таким образом, в настоящей работе представлено теоретическое описание процесса полимеризации бутадиена на немодифицированной и модифицированной в турбулентных потоках каталитической системе  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$ , которое в совокупности рассматривает:

1) процесс диспергирования частиц каталитически активного осадка системы  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$  в турбулентных потоках;

2) процесс «расклинивания» частиц каталитически активного осадка системы  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$  в начальный период полимеризации бутадиена под действием растущих цепей;

3) макрокинетику процесса полимеризации бутадиена на немодифицированной и модифицированной в турбулентных потоках каталитической системе  $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$ .

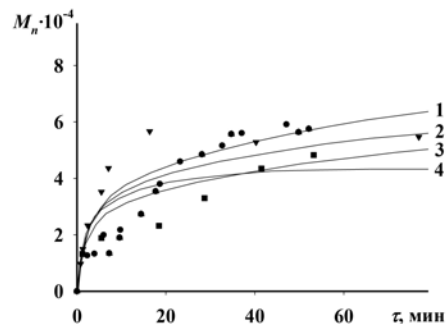


Рис. 2. Зависимость среднечисленной молекулярной массы полибутадиена  $M_n$  от времени полимеризации (точки – эксперимент [4, 5], линии – расчет);  $[TiCl_4]_0 = 3$  ммоль/л (1, 2, ■, ●),  $[TiCl_4]_0 = 5$  ммоль/л (3, 4, ▲, ▼); немодифицированная каталитическая система – (1, 3, ■, ▲), модифицированная в турбулентных потоках каталитическая система – (2, 4, ●, ▼);  $[Al(i-C_4H_9)_3]_0/[TiCl_4]_0 = 1.4$ ,  $[C_4H_6]_0 = 1.5$  моль/л; температура полимеризации – 298 К.

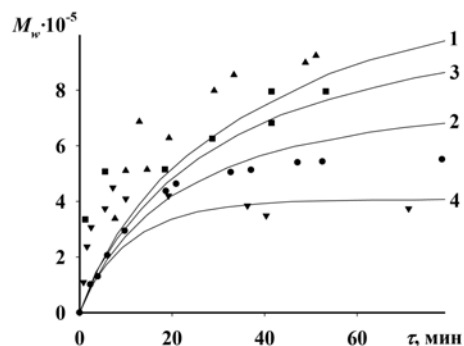


Рис. 3. Зависимость среднемассовой молекулярной массы полибутадиена  $M_w$  от времени полимеризации (точки – эксперимент [4, 5], линии – расчет);  $[TiCl_4]_0 = 3$  ммоль/л (1, 2, ■, ●),  $[TiCl_4]_0 = 5$  ммоль/л (3, 4, ▲, ▼); немодифицированная каталитическая система – (1, 3, ■, ▲), модифицированная в турбулентных потоках каталитическая система – (2, 4, ●, ▼);  $[Al(i-C_4H_9)_3]_0/[TiCl_4]_0 = 1.4$ ,  $[C_4H_6]_0 = 1.5$  моль/л; температура полимеризации – 298 К.

Это теоретическое описание позволяет подбирать физические (скорость движения реакционной массы и геометрию трубчатого турбулентного аппарата) и химические (концентрации отдельных компонентов реакционной массы) факторы с целью обеспечения требуемой скорости процесса полимеризации бутадиена и получения полибутадиена с требуемыми значениями молекулярно-массовых характеристик.

## Литература

1. Bazhenova, I.R. Influence of the structure of the organoaluminum compound on the stereoregulating heterogeneity of catalytic systems based on  $TiCl_4$  / I.R. Bazhenova, E.A. Glukhov, A.G. Mustafin, Yu.B. Monakov // Russian Journal of Applied Chemistry, 2012, v. 85, № 6. P. 974-979.
2. Mingaleev, V.Z. Relationship of the microheterogeneity of isoprene-butadiene copolymers with the kinetic heterogeneity of active sites / V.Z. Mingaleev, P.A. Taibulatov, Yu.B. Monakov, V.P. Zakharov // Doklady Chemistry, 2010, v. 435, № 1. P. 286-288.
3. Taibulatov, P.A. Kinetic inhomogeneity of copolymerization sites of butadiene and isoprene on titanium catalyst / P.A. Taibulatov, V.Z. Mingaleev, I.A. Ionova, Yu.B. Monakov, V.P. Zakharov // Polymer Science, 2010, v. 52(B), № 7-8. P. 450-458.
4. Mingaleev, V.Z. Kinetic nonuniformity of a titanium catalyst in the polymerization of butadiene: effect of intensifying stirring of the reaction mixture / V.Z. Mingaleev, I.A. Ionova, Y.B. Monakov, V.P. Zakharov, A.A. Musin, S.F. Urmancheev, A.A. Berlin // Polymer Science, 2008, V. 50(B), № 11-12. P. 351-355.
5. Mingaleev, V.Z. Polymerization of butadiene on a titanium catalyst in formation of a reaction mixture in turbulent flows / V.Z. Mingaleev, V.P. Zakharov, Yu.B. Monakov // Russian Journal of Applied Chemistry, 2007. V. 80, № 7. P. 1130-1134.
6. Мингалеев В.З., Захаров В.П., Монаков Ю.Б. Изменение размеров частиц титанового катализатора в начальный период полимеризации бутадиена // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология, 2008. Т. 51. № 9. С. 63-65.

© Зиганшина А.С., Терещенко К.А., Ганиев Г.М., Захаров В.П., Улитин Н.В., 2016 г.

## ВОСТАНОВЛЕНИЕ ИОНОВ СЕРЕБРА ЭКСТРАКТАМИ МУРРАЙИ

Кошкина О.А., Антропова И.Г.

Российский химико-технологический университет им.Д.И. Менделеева  
г. Москва

На сегодняшний день мы видим бурное развитие медицины в частности наномедицины, что делает эту работу актуальной, т.к. лекарства, сделанные на основе растений «зеленых агентов» [1], обладают огромным количеством антиоксидантов, которые имеют воздействия на опухоли, вылечивая зараженные клетки, при этом сохраняя целостность организма. Муррайя или апельсиновый жасмин растет в Мьянме [2], есть сведения об её антибактериальной активности [3]. Существует легенда, которая сообщает, что более 400 лет назад муррайю выращивали только в садах императоров, для других это каралось смертной казнью. Состав муррайи очень разнообразен: действующими веществами являются алкалоиды, флавоноиды, гликозиды, витамины, дубильные вещества, кумариновые соединения и другие, которые обладают биологической активностью по отношению к возбудителям различных заболеваний.

Задачами данного исследования являются изучение влияния ионов серебра на спектры оптического поглощения водных и водно-спиртовых экстрактов листьев муррайи в зависимости от концентрации муррайи; охарактеризовать образование частиц серебра путем измерения спектров поглощения и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) после воздействия дневного рассеянного света и фото-облучения. ПЭМ проведены в центре в Сколково. Фото-облучение произведено на лампе ОСЛ-1 №700027 фирмы «Омо», активность лампы  $3.85 \times 10^{14}$  квант/с. В работе приготовлены растворы экстракта муррайи (Murr) с разной концентрацией (навеска Murr= 0,5 грамм; 1,5 грамм; 2,5 грамм, каждая из которых были растворена в 50 мл растворителя) - это система 1. Концентрация водного раствора нитрата серебра равна 1мМ - это система 2. Исследуемый раствор приготовлен путем смешивания системы 1 (2,5 мл) и системы 2 (47,5 мл). Далее этот раствор был подвержен ультрафиолетовому облучению или действию дневного рассеянного света. На рис. 1 представлены спектры оптического поглощения для растворов, хранившихся в темноте и под действием дневного света в зависимости от концентрации Murr.

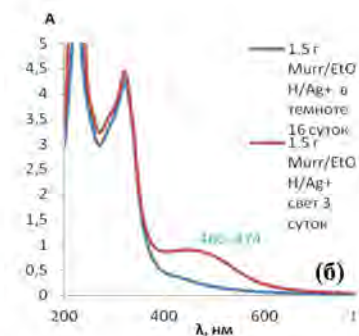
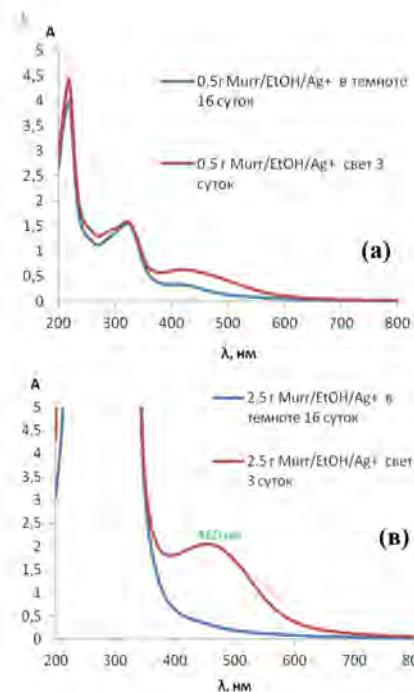


Рис. 1. Спектры оптического поглощения Murr в присутствии ионов серебра для разных концентраций Murr в растворе: (а) 0,5 г навески Murr на 50 мл растворителя, (б) 1,5 г навески на 50 мл растворителя, (в) 2,5 г навески на 50 мл растворителя в зависимости от условий воздействия: хранение в темноте (синяя линия) и под воздействием дневного рассеянного света (красная линия)

На рис. 1 показано влияние ионов серебра на спектры оптического поглощения Murr под действием света, зарегистрирована новая полоса в видимой области спектра 460-480 нм, что представлено на рис. 1(а). Установлено, что с ростом концентрации Murr интенсивность полосы 460-480 нм растёт. При хранении в темноте изменений в растворах не зарегистрировано.

При фотооблучении (рис. 2) спектрофотометрически зарегистрировано образование новой полосы при длине волны 486,7 нм [4].

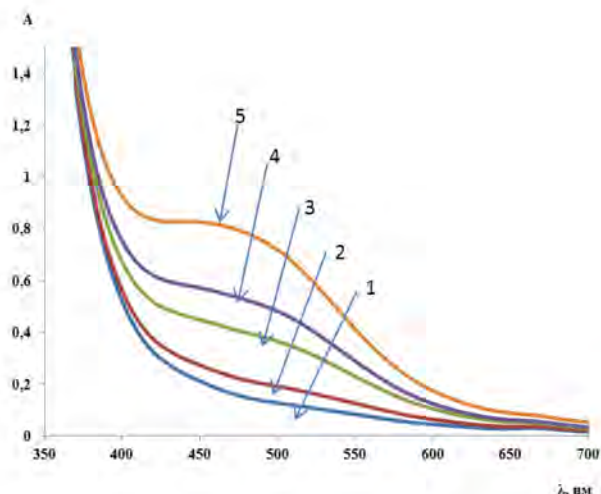


Рис. 2. Спектры оптического поглощения растворов Мурр в присутствии ионов серебра в зависимости от времени фото-облучения (мин): 1 - 15, 2 - 30, 3 - 45, 4 - 60, 5 - 90

Далее измерения были проведены в Сколково на сканирующем электронно-ионном микроскопе (рис. 3).

Методом ПЭМ анализа [5] подтвержден факт образования и структуры наночастиц серебра при использовании экстракта Мурр в водной и водно-спиртовой среде. Размер наночастиц равен порядка 50 нм. ПЭМ-анализ показал образование наночастиц сферической формы. На рис. 3(б) мы видим, что плотность наночастиц серебра высокая, размеры порядка 20 нм и выше, но меньше 60 нм.

В работе растворы Мурр с наночастицами серебра были отфильтрованы через трековые мембраны г.Дубна. Для раствора состава 2,5 г Мурр/EtOH+Ag<sup>+</sup>, которые подвергались воздействию ультрафиолета в течении 60 минут, и далее хранили свету были записаны спектры оптического поглощения до и после фильтрации через трековую мембрану, что представлено на рис. 4.

Показано (рис. 4), что после фильтрации раствора муррайи полоса примерно 460-470 нм исчезает, раствор прозрачный. Следовательно, наночастицы задержались трековыми фильтрами, что в дальнейшем, по-видимому, будет иметь практическое значение.



Рис. 3а. Изображение, полученное с помощью ПЭМ, при увеличении 97000. Система 2,5 г Мурр/EtOH+Ag<sup>+</sup>, Растворы после воздействия дневного рассеянного света

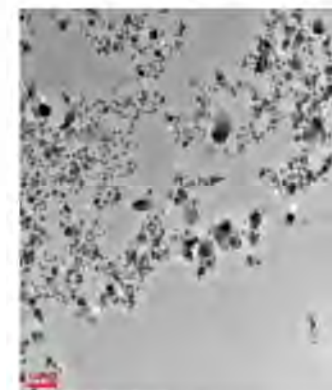


Рис. 3б. Изображение, полученное с помощью ПЭМ, при увеличении равном 19500. Система 2,5 г Мурр/EtOH+Ag<sup>+</sup> после фото-облучения 90 минут. Раствор хранили без доступа света

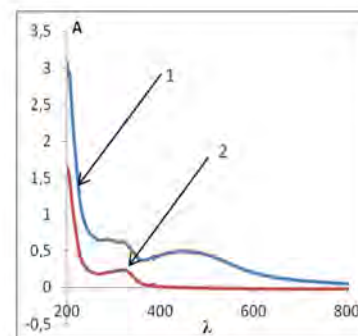


Рис. 4. Спектры оптического поглощения растворов муррайи Мурр/EtOH+Ag<sup>+</sup>, которые подвергались воздействию ультрафиолета в течении 60 минут, и далее хранили свету: 1 - до фильтрации через трековую мембрану, 2 - после фильтрации через трековую мембрану.

## Литература

1. Franco Cataldo, Ornella Ursin, Giancarlo Angelini. Synthesis of silver nanoparticles by radiolysis, photolysis and chemical Reduction of AgNO<sub>3</sub> in Hibiscus sabdariffa infusion (karkade) // J. Radiation Nucl Chem, 2016. – Vol. 307. PP. 447-455.
2. Ganesan V., Arunkumar C., Nima P, Astalakshmi A. Green synthesis of silver nanoparticles using leaves of *Murraya Paniculata* (L.) Jack //



International journal of recent scientific research, 2013. - Vol. 4. - Issue. 6. PP.1022-1026.

3. Е.А. Шкаранова, А.Р. Азнагулова, А.Ф. Кривошепов, В.В. Смагина, Г.В. Авраменко. Антибактериальные свойства гидрозолей серебра. Сборник научных трудов конф. "Современные проблемы химической технологии биологически активных веществ". – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2016. – Вып. 188. – С. 149-150.
4. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/photochem/photochem2004.pdf>
5. <http://ftfsite.ru/wp-content/files/ProsvecEM.pdf>

© Кошкина О.А., Антропова И.Г., 2016 г.

УДК: 544.431.24

### КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЯТИКРАТНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ ИЗОЦИАНПРОПИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ К ФУЛЛЕРЕНУ C<sub>60</sub>

Саньяров Д.Д.<sup>1</sup>, Диниахметова Д.Р.<sup>2</sup>, Фризен А.К.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский Институт химии Российской академии наук, Уфа, Россия

Известно, что C<sub>60</sub> ингибирует процесс радикальной полимеризации за счёт взаимодействия с иницирующими и полимерными радикалами. Из литературных данных известно, что при малых временах реакции возможно присоединение двух изоцианпропильных радикалов к фуллерену C<sub>60</sub>, но с увеличением времени полимеризации количество присоединяемых радикалов предположительно увеличивается до 6-9 на одну молекулу C<sub>60</sub> [1]. Однако экспериментально достаточно трудно оценить количество присоединяемых к C<sub>60</sub> иницирующих радикалов, поэтому в качестве первого шага исследования механизма влияния фуллерена C<sub>60</sub> на процесс радикальной полимеризации целесообразно провести квантово-химическое моделирование этого процесса. Квантово-химические расчёты в настоящей работе выполнены в программе «ПРИРОДА-09» [2]. Использован функционал плотности Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [3] и базисный набор тройного расщепления 3z. Данный метод корректно воспроизводит энергетические характеристики и геометрические параметры молекулы фуллерена C<sub>60</sub>, что было показано ранее в работе [4]. Оптимизация геометрических параметров исследуемых структур выполнялась без ограничения на симметрию. Тип стационарной точки на поверхности потенциальной энергии определяли на основании расчёта матрицы Гессе. Тепловые эффекты реакций ( $\Delta H_r^\circ$ ) рассчитывали в виде разности абсолютных стандартных энтальпий ( $H^\circ$ ) продуктов реакции и исходных частиц при температуре 298 К.

В литературе есть сведения о фуллеренильных радикалах, образованных в результате взаимодействия C<sub>60</sub> с изоцианпропильными радикалами. Так как все 60 атомов углерода в молекуле фуллерена идентичны, было рассмотрено присоединение радикала по атому 1 (нумерация согласно ИЮПАК [5]).

Нами было проведено моделирование присоединения первого изоцианпропильного радикала к фуллерену C<sub>60</sub>. В результате было найдено, что тепловой эффект реакции ( $\Delta H_r^\circ$ ) образования аддукта C<sub>60</sub>R составляет -32.2 кДж/моль, а энергетический барьер данной реакции  $H_{\text{акт}}^\circ$  равен 23.6 кДж/моль. Для оценки реакционной способности фуллеренильного радикала C<sub>60</sub>R и изоцианпропильного радикала опирались на значения их спиновой плотности. Третичный атом углерода

в  $(Me)_2C^*CN$  имеет спиновую плотность, равную 0,49 а.е. В моноаддукте  $C_{60}^*R$  имеется делокализация спиновой плотности по многим атомам. Атомы углерода моноаддукта  $C_{60}^*R$ , имеющие максимальные значения спиновой плотности, приведены на рисунке 1. Так как спиновая плотность у третичного атома углерода в  $(Me)_2C^*CN$  больше, чем у атомов углерода в фуллеренильном радикале, то, по-видимому, радикал  $(Me)_2C^*CN$  будет более активным.

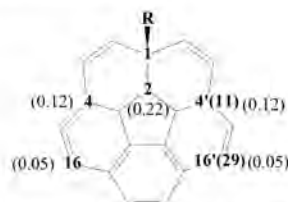


Рис. 1. Максимальные значения спиновой плотности для атомов углерода в моноаддукте  $C_{60}^*R$

Вследствие делокализации спиновой плотности по пяти атомам углерода фуллеренильной части моноаддукта и сферической формы  $C_{60}$ , а вследствие этого – доступности этих атомов с точки зрения стерических факторов, в дальнейшем возможно взаимодействие  $C_{60}^*R$  и  $(Me)_2C^*CN$  по положениям 2-, 4- и 16-. Положения 4- и 11(4')-, а также положения 16- и 29(16')- являются абсолютно симметричными, так как они равноудалены от заместителя и экранируются одинаковыми  $CH_3$ -группами.

Известно, что  $C_{60}^*R$ , несмотря на меньшую активность по сравнению с  $(Me)_2C^*CN$ , способен взаимодействовать с радикалами. Экспериментально доказано образование бисаддуктов в результате взаимодействия моноаддукта и изоцианпропильного радикала. Однако энергетические характеристики данной реакции и вероятность её протекания в реальной полимеризационной смеси невозможно оценить экспериментально. Поэтому мы провели моделирование присоединения  $R^*$  к  $C_{60}^*R$  по атомам 4, 11(4'), 16, 29(16') (так как эти атомы имеют наибольшие значения спиновой плотности), и по атомам 30, 35, 40, 60 (так как они наиболее удалены от первого заместителя и более доступны для присоединения второго радикала). Тепловые эффекты реакций образования бисаддуктов представлены в таблице 1. Интересно заметить, что реакции образования изомеров 1,60- и 1,30- характеризуются наличием энергетического барьера, хотя нет никаких стерических факторов. Такой эффект, по-видимому, обусловлен малыми значениями спиновой плотности на этих атомах.

Таблица 1. Тепловые эффекты реакции образования бисаддуктов  $C_{60}R_2$ .

	Бисаддукт							
	1,4'-	1,4-	1,16-	1,16'-	1,30-	1,35-	1,40-	1,60-
$\Delta H^\circ$ , кДж/моль	-97.3	-97.2	-88.8	-88.8	-35.8	-74.6	-29.2	5.5
$H_{act}^\circ$ , кДж/моль	0	0	0	0	26.3	0	0	52.4

По полученным данным видно, что с энергетической точки зрения наиболее выгодно образование изомеров 1,4'-, 1,4-, 1,16-, как ранее было показано в работах W.T.Ford [6]. Образование изомера 1,2- маловероятно из-за экранирования положения 2 присоединенным заместителем. В дальнейшем, для моделирования реакций образования трисаддуктов использовали изомер 1,4'-, так как реакция образования данного изомера имеет наибольший тепловой эффект и наименьший энергетический барьер, которые составляют соответственно -97.3 и 0 кДж/моль.

Далее было проведено моделирование реакции образования трисаддуктов путем присоединения  $(Me)_2C^*CN$  к 1,4'-бисаддукту  $C_{60}R_2$ . По литературным данным известно, что радикалы присоединяются по окружности радилена (часть фуллерена, состоящая из пятичленного цикла, окруженного шестичленными циклами) таким образом, что каждый последующий радикал присоединяется по положению 4 относительно ранее присоединенного радикала. Нами было проведено моделирование таких реакций. Однако ближайшие 1,4-положения относительно первого и второго присоединенных радикалов экранированы, поэтому мы предположили, что возможно взаимодействие бисаддукта с иницирующим радикалом по положениям, более удаленным от данных заместителей. Тепловые эффекты и энергии активации образования трисаддуктов приведены на схеме 1.

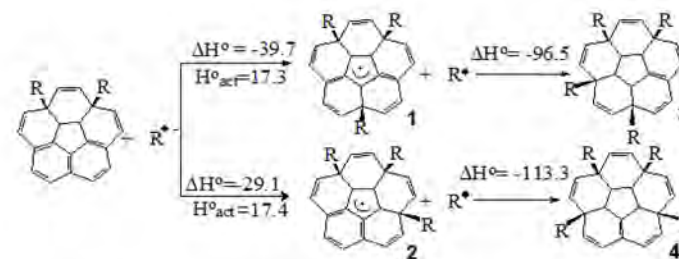


Схема 1. Тепловые эффекты и энергии активации образования трисаддуктов  $C_{60}R_3$  и тетраисаддуктов  $C_{60}R_4$

По тепловым эффектам видно, что образование продуктов **1** и **2** равновероятно. Спиновая плотность в трисаддуктах, так же, как и в других фуллеренильных радикалах, делокализована (рисунок 2).

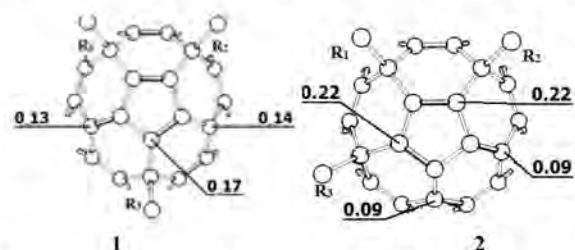


Рис. 2. Расположение атомов с максимальной спиновой плотностью (а.е.) в трисаддуктах **1** и **2**

Тетракисаддукты образуются в результате взаимодействия фуллеренильного радикала  $C_{60}R_3$  и  $(Me)_2C^{\bullet}CN$ . Образование аддукта **3** было смоделировано путем присоединения четвертого радикала к трисаддукту **1**, а образование аддукта **4** было смоделировано путем присоединения четвертого радикала к трисаддукту **2**. Для того чтобы понять, как именно проходит присоединение четвертого радикала к  $C_{60}R_3$ , приведена схема 2, из которой видно, что взаимодействие четвертого радикала с каким либо трисаддуктом имеет стерические препятствия, и в трисаддукте **1** у атомов с наибольшим значением спиновой плотности экранирование происходит сильнее, чем в других трисаддуктах.

Однако, моделирование показало, что реакции образования тетракисаддуктов идут безбарьерно и со значительными отрицательными тепловыми эффектами.

В трисаддукте **2** нет стерических препятствий, затрудняющих присоединение четвертого радикала, т.к. экранирование атома с максимальной спиновой плотностью проявляется меньше, чем в трисаддукте **1**. Наибольший тепловой эффект имеет реакция образования тетракисаддукта **4**.

Далее было проведено моделирование реакции образования пентакисаддуктов **5** и **6** путем присоединения  $(Me)_2C^{\bullet}CN$  к тетракисаддуктам **3** и **4** (схема 3). На схеме 2 приведены тепловые эффекты реакций и их энергетические барьеры.

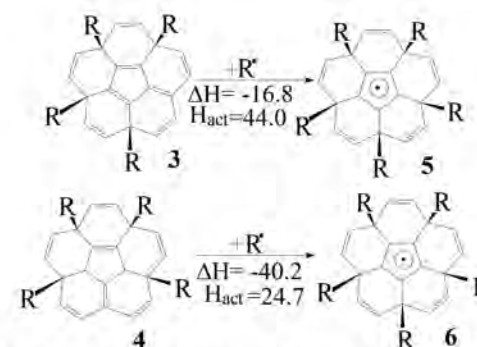


Схема 2. Реакции образования пентакисаддуктов **5** и **6**

Спиновая плотность в полученных пентакисаддуктах делокализована по четырем атомам пятичленного цикла, расположенного в центре радилена. Суммарное значение спиновой плотности на этих четырех атомах равно 0,72 а.е.

Также было проведено моделирование присоединения пятого радикала по отдаленным от уже присоединенных радикалов атомам  $C_{60}$ : по 48-му, 46-му и 40-му (таблица 2). Наиболее выгодным с энергетической точки зрения является присоединение пятого радикала по 48-му атому углерода на  $C_{60}$ .

Таблица 2. Тепловые эффекты реакции образования пентакисаддуктов  $C_{60}R_5$

	1,4',4,30,48-	1,4',4,30,46-	1,4',4,30,40-
$\Delta H^{\circ}$ , кДж/моль	-38.8	-35.8	-35.4
$H_{act}$ , кДж/моль	10.5	15.6	18.1

Спиновая плотность в пентакисаддукте 1,4',4,30,48- делокализована и имеет максимальные значения на атомах C1, C2 и C3 (рисунок 3) и составляет соответственно 0.10, 0.20 и 0.09 а.е.

Таким образом, в нашей работе смоделировано несколько реакций присоединения изоцианопропильных радикалов к фуллерену  $C_{60}$ , которые могут протекать в процессе радикальной полимеризации при иницировании процесса динитрилом азоизомасляной кислоты. По энергетическим характеристикам реакции образования пентакисаддукта можно сделать вывод, что такой аддукт вполне может формироваться в полимеризующейся системе. Полученные данные могут быть

использованы для кинетического моделирования, что позволит сделать окончательный вывод о роли фуллерена  $C_{60}$  в процессе полимеризации.

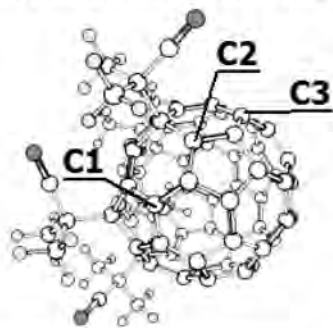


Рис. 3. Схематичное расположение атомов с максимальным значением спиновой плотности для пентакисаддукта 1,4',4,30,48

Расчеты выполнены на кластерном суперкомпьютере ГУП ИНХП РБ и в ЦКП «Химия» УфИХ РАН.

#### Литература

1. Ohno M., Shibata S., Eguchi S. Reaction of Fullerenes with Radicals Generated by Thermal Decomposition of Azo Compounds Fullerene // Science and Technology. 1995. V. 3. P. 29-35.
2. Лайков Д. Н. Развитие экономного подхода к расчету молекул методом функционала плотности и его применение к решению сложных химических задач. Дис. канд. физ.-мат. наук. – Москва, 2000. – 102 с.
3. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys.Rev. Lett. 1996. V. 77, № 18. P. 3865-3868.
4. Сабиров Д.Ш., Хурсан С.Л., Булгаков Р.Г. Взаимодействие фуллеренов с озоном: роль гауссовой кривизны углеродной поверхности // Вестник Башкирского университета. 2007. Том 12, №4. С. 19-23.
5. Taylor, R.J.  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$  and  $C_{84}$ : Numbering,  $\pi$ -Bond Order Calculations and Addition Pattern Considerations // J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2. 1993, P. 813–824.
6. Ford W. T., Nishioka T., Qiu F., D'Souza F., Choi Jp., Kutner W., Noworyta K. Structure determination and electrochemistry of products from the radical reaction of  $C_{60}$  with azo(bis(isobutyronitrile)) // The Journal of Organic Chemistry. 1999. V. 64. P. 6257–6262.

© Саньяров Д.Д., Диннахметова Д.Р., Фризен А.К., 2016 г.

УДК 541.64:541.124.2

#### УСТАНОВЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА НА ИНИЦИИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ

«ПЕРОКСИД БЕНЗОИЛА-ТИТАНОЦЕНДИХЛОРИД»

Темникова Н.Е.<sup>1</sup>, Терещенко К.А.<sup>1</sup>, Улитин Н.В.<sup>1</sup>, Шиян Д.А.<sup>1</sup>,  
Фризен А.К.<sup>2</sup>, Колесов С.В.<sup>2</sup>, Сигаева Н.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, Россия

<sup>2</sup> Уфимский Институт химии РАН, г. Уфа, Россия

Актуальной задачей химии высокомолекулярных соединений является разработка новых подходов к синтезу полимеров с требуемыми свойствами. В частности, одним из таких подходов является радикально-координационная полимеризация в присутствии металлоценов [1]. В настоящее время накоплен достаточно большой экспериментальный материал о кинетике процессов радикальной полимеризации, протекающих в присутствии металлоценов, о молекулярно-массовых характеристиках и стереорегулярности образующихся полимеров. Однако отсутствуют систематические представления о механизме радикально-координационной полимеризации, полученные на основе каких-либо теоретических подходов к исследованию механизмов химических реакций (квантово-химическое моделирование [2], теоретическое кинетическое моделирование [3], метод молекулярной динамики [4] и т.п.). Как следствие, подбор условий процессов радикально-координационной полимеризации в присутствии металлоценов для придания полимерам требуемых свойств без информации о механизмах процессов представляет собой довольно сложную задачу.

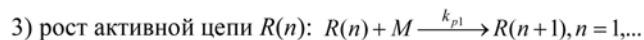
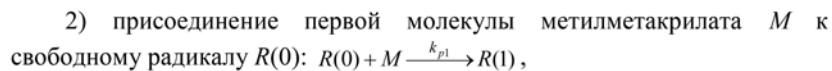
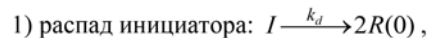
Целью данной работы является идентификация в рамках методов квантовой химии и формальной кинетики наиболее вероятной кинетической схемы процесса радикальной полимеризации, протекающей в присутствии металлоцена, а также определение ее кинетических констант на примере процесса блочной радикально-координационной полимеризации метилметакрилата, инициированного пероксидом бензоила в присутствии титаноцендихлорида.

Объектом исследования в настоящей работе выбран процесс блочной радикально-координационной полимеризации метилметакрилата на инициирующей системе «пероксид бензоила-титаноцендихлорид», а целью работы стало установление кинетической схемы этого процесса.

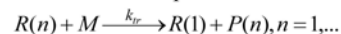
Для достижения поставленной цели сначала составили гипотетическую кинетическую схему процесса на основании квантово-химических расчетов, проведенных в программе Gaussian<sup>09</sup> Rev. C.01

(Version: EMT64T legacy/Linux, номер лицензии: FA7353864010) [5] на кластерном суперкомпьютере ЦКП «Химия» Уфимского Института химии РАН (вычислили тепловые эффекты и активационные барьеры всех возможных гипотетических реакций процесса).

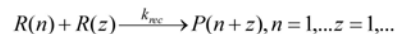
В эту схему вошли не только реакции классической радикальной полимеризации, но и реакции, характерные для «живой» радикальной полимеризации, протекающие по механизмам OMRP (Organometallic Mediated Radical Polymerization) и ATRP (AtomTransfer Radical Polymerization) (структурные формулы соединений из кинетической схемы приведены в табл. 1):



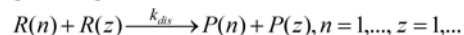
4) передача цепи на метилметакрилат:



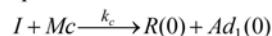
5) рекомбинация активных цепей:



6) диспропорционирование активных цепей:

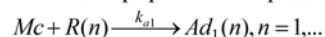


7) взаимодействие пероксида бензоила с титаноцендихлоридом:

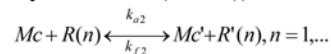


8) распад аддукта  $Ad_1(0)$ :  $Ad_1(0) \xrightarrow{k_{f1}} Mc + R(0)$ ;

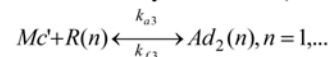
9) образование металлоцентрированного радикала:



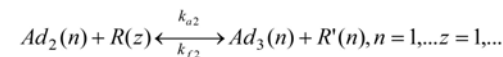
10) перенос атома хлора от металлоцена к радикалу роста (AtomTransferRadicalPolymerization (ATRP)):



11) обратимое взаимодействие радикала роста  $Mc'$  по механизму Organometallic Mediated Radical Polymerization (OMRP):



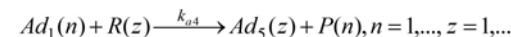
12) перенос атома хлора от металлоцена к радикалу роста, или AtomTransfer Radical Polymerization (ATRP):



13) координация мономера и рост в координационной сфере титана:



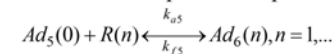
14) взаимодействие радикала роста с металлоцентрированным радикалом:



15) распад металлоцентрированного радикала в присутствии молекулы метилметакрилата:

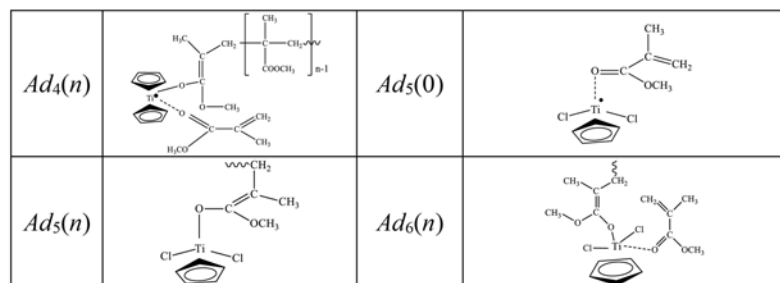


16) обратимое взаимодействие радикала роста с  $Ad_5(0)$ , или OMRP:



**Таблица 1.** Обозначения и структурные формулы соединений

Обозн.	Структурная формула	Обозн.	Структурная формула
$I$		$R(0)$	
$Mc$		$Mc'$	
$M$		$R(n)$	
$R'(n)$		$P(n)$	
$Ad_1(0)$		$Ad_1(n)$	
$Ad_2(n)$		$Ad_3(n)$	



Затем на основе этой схемы с помощью закона действующих масс с применением метода производящих функций [3] записали систему кинетических уравнений – математическую модель кинетики процесса. Далее в результате решения обратной кинетической задачи определили кинетические константы (константы скоростей) реакций рассматриваемого процесса. Решение обратной кинетической задачи представляет собой нахождение таких физически обоснованных значений кинетических констант, чтобы расхождения между рассчитанными по математической модели кинетики процесса и соответствующими экспериментальными данными были минимальны. Для решения обратной кинетической задачи использовали кинетические кривые процесса при 343 К, молекулярно-массовые характеристики (среднечисленную и среднемассовую молекулярные массы и коэффициент полидисперсности) и значения стереорегулярности получаемого полиметилметакрилата. Установили, что математическая модель кинетики процесса с найденными кинетическими константами реакций адекватно описывает экспериментальные данные, а значит, полимеризация метилметакрилата на иницирующей системе «пероксид бензоила-титаноцидихлорид» при 343 К действительно может протекать по кинетической схеме, заложенной в модель.

Таким образом, в данной работе идентифицирована кинетическая схема процесса блочной радикально-координационной полимеризации метилметакрилата, протекающего на иницирующей системе «пероксид бензоила-титаноцидихлорид», и определены кинетические константы реакций идентифицированной схемы при 353 К.

### Литература

1. Фризен, А.К., Хурсан С.Л., Монаков Ю.Б. Стереорегулирующее действие титаноцидихлорида в радикальной полимеризации

метилметакрилата / А.К. Фризен, С.Л. Хурсан, Ю.Б. Монаков // Химия и химическая технология, 2010, Т. 53, №1, сс. 70-73.

2. Хурсан, С.Л. Квантовая механика и квантовая химия / С.Л. Хурсан. – Уфа: ЧП Раянов, 2005. – 164 с.
3. Улитин, Н.В. Методы моделирования кинетики процессов синтеза и молекулярно-массовых характеристик полимеров: монография / Н.В. Улитин, К.А. Терещенко. – Казань: Изд-во Казан.нац. исслед. технол. ун-та, 2014. – 228 с.
4. Хохлов, А.Р. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров / А.Р. Хохлов, А.Л. Рабинович, В.А. Иванов. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. – 585 с.
5. Gaussian 09, Revision C, M. J. Frisch, et al. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

© Темникова Н.Е., Терещенко К.А., Улитин Н.В., Шиян Д.А., Фризен А.К.<sup>2</sup>, Колесов С.В.<sup>2</sup>, Сигаева Н.Н., 2016 г.

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО  
И КИНЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РАДИКАЛЬНО  
ИНИЦИИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ  
МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА, ПРОТЕКАЮЩЕЙ  
В ПРИСУТСТВИИ ФЕРРОЦЕНА**

Терещенко К.А.<sup>1</sup>, Фризен А.К.<sup>2</sup>, Темникова Н.Е.<sup>1</sup>, Буракова А.О.<sup>1</sup>,  
Хамитов Э.М.<sup>3</sup>, Шиян Д.А.<sup>1</sup>, Улитин Н.В.<sup>1</sup>, Колесов С.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Казанский национальный исследовательский технологический  
университет, г. Казань, Россия

<sup>2</sup> Уфимский Институт химии РАН, г. Уфа, Россия

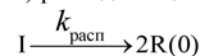
<sup>3</sup> Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

На сегодняшний день получить радикально иницируемой полимеризацией полимеры с повышенной стереорегулярностью можно лишь при добавлении в полимеризующуюся массу металлоценов [1, 2]. Особенность таких процессов сводится к влиянию металлоценов на распад инициаторов; образование полимеров с повышенной стереорегулярностью (по сравнению с полимерами, полученными классической радикальной полимеризацией); конверсионное изменение молекулярных масс полимеров; протекание постполимеризации на полимерах, полученных радикально иницируемой полимеризацией в присутствии металлоценов. Интерпретацию в рамках концепции радикально-координационной полимеризации осуществили с применением квантово-химического моделирования в программе Prioda [2]. Согласно концепции, в схеме радикальной полимеризации, протекающей в присутствии металлоценов, присутствуют реакции металлоценов с компонентами реакционной массы, приводящие к образованию спиновых ловушек для радикалов роста и координационных центров полимеризации. В свою очередь координационные центры могут способствовать росту цепи в координационной сфере металла. Однако, концепция радикально-координационной полимеризации для рассматриваемого процесса подтверждена только квантово-химическим моделированием химических реакций и никак не подтверждена с точки зрения формальной кинетики.

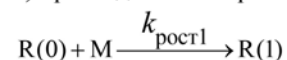
Таким образом, целью работы стало подтверждение соответствия схемы процесса радикально-координационной полимеризации и определение температурных зависимостей ее кинетических констант (констант скоростей реакций) методами квантовой и математической химии. Объектом исследования в настоящей работе выбран процесс полимеризации метилметакрилата, иницируемый пероксидом бензоила в присутствии ферроцена.

Исследование проводили в несколько этапов. На первом этапе составили гипотетическую схему, для каждой реакции которой с использованием полученных нами результатов квантово-химических расчетов в программе Gaussian'09 Rev. C.01 (Version: EMT64T legacy/Linux, номер лицензии: FA7353864010) [3] на кластерном суперкомпьютере ЦКП «Химия» Уфимского Института химии РАН вычислили тепловые эффекты и энергии активации. Расшифровка веществ приведена в таблице 1.

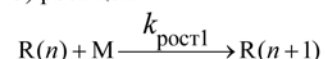
1) распад инициатора



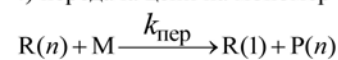
2) присоединение первой молекулы мономера к свободному радикалу



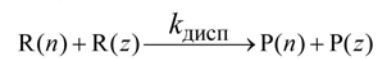
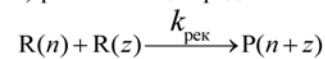
3) рост цепи



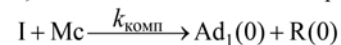
4) передача цепи на мономер



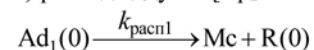
5) рекомбинация радикалов и диспропорционирование радикалов



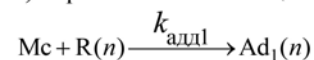
6) взаимодействие инициатора с ферроценом



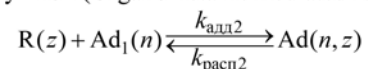
7) распад аддукта  $[Cr_2Fe \cdots PhCOO]^*$



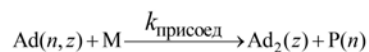
8) образование металлоцентрированного радикала  $CpFe^*(CpR)$



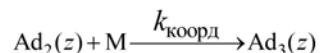
9) обратимое взаимодействие радикала роста с металлоцентрированным радикалом  $CpFe^*(CpR)$  как со спиновой ловушкой (OrganometallicMediatedRadicalPolymerization)



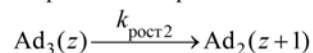
10) образование моноциклопентадиенильного аддукта  $CpFe(M)(R)$  из аддукта  $CpFe(CpR)R$



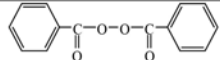
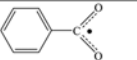
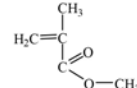
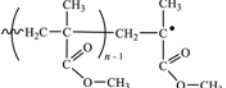
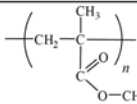

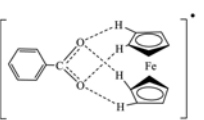
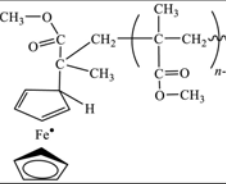
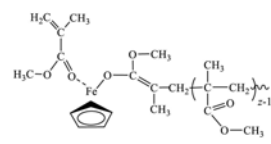
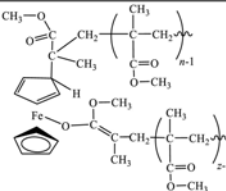
11) образование координационного активного центра  $\text{CrFe}(\text{M})_2(\text{R})$  за счет координации мономера по атому металла в моноциклопентадиенильном аддукте  $\text{CrFe}(\text{M})(\text{R})$



12) реакция координационного роста цепи на активном центре  $\text{CrFe}(\text{M})_2(\text{R})$  за счет присоединения скоординированной молекулы мономера к полимерной цепи в сфере атома металла



**Таблица 1.** Обозначения и структурные формулы соединений

Обозначение	Структурная формула	Обозначение	Структурная формула
I		R(0)	
M		R(n)	
P(n)		Mc	
Ad <sub>1</sub> (0)		Ad <sub>1</sub> (n)	
Ad <sub>2</sub> (z)		Ad(n, z)	

С помощью закона действующих масс и с применением метода производящих функций [4] составленную гипотетическую схему формализовали системой кинетических уравнений:

$$d[\text{I}] / dt = f_1([\text{I}], [\text{Mc}], [\text{M}], \dots, \mu_{qs}, \mu_{3pr}, k),$$

$$d[\text{Mc}] / dt = f_2([\text{I}], [\text{Mc}], [\text{M}], \dots, \mu_{qs}, \mu_{3pr}, k),$$

$$d[\text{M}] / dt = f_3([\text{I}], [\text{Mc}], [\text{M}], \dots, \mu_{qs}, \mu_{3pr}, k),$$

...

$$d\mu_{qs} / dt = f_i([\text{I}], [\text{Mc}], [\text{M}], \dots, \mu_{qs}, \mu_{3pr}, k),$$

где [...] – концентрация соответствующего соединения (расшифровку обозначений соединений см. в табл. 1);  $f_i$  – функции, записанные по

закону действующих масс;  $t$  – время;  $\mu_{qs} = \sum_{n=1}^{\infty} n^s [\text{X}(n)]$  –  $s$ -ый момент

молекулярно-массового распределения (где X – R, Ad<sub>1</sub>, Ad<sub>2</sub>, Ad<sub>3</sub> и P при порядковом номере момента  $q = 1, 2, 4, 5$  и 6 соответственно;

$$\mu_{3pr} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{z=1}^{\infty} n^p z^r [\text{Ad}(n, z)] \text{ при } q = 3 (p, r = 0, 1, 2).$$

На втором этапе решили обратную кинетическую задачу – минимизировав по методу Хука-Дживса расхождение между рассчитанными по математической модели кинетики процесса и соответствующими экспериментальными данными (кинетические кривые процесса при различных температурах, значения среднечисленной и среднемассовой молекулярных масс и коэффициента полидисперсности полиметилметакрилата, получаемого при различных температурах и выделяемого при различных конверсиях мономера), получили температурные зависимости кинетических констант реакции процесса (в качестве первых приближений использовали температурные зависимости кинетических констант, полученные в результате квантово-химических расчетов). По этим данным, используя уравнение Эйринга, восстановили температурные зависимости кинетических констант реакций гипотетической схемы. В результате получены следующие температурные зависимости констант:  $k_{\text{расп}} = 1.18 \times 10^{14} e^{-15097/T}$ ,  $k_{\text{рост1}} = 2.5 \times 10^6 e^{-2810/T}$ ,  $k_{\text{рост2}} = 2.5 \times 10^6 e^{-2810/T}$ ,  $k_{\text{пер}} = 2.79 \times 10^5 e^{-5450/T}$ ,

$$k_{\text{рек}} = \frac{3.877 \times 10^4 e^{1707/T}}{3.956 \times 10^{-4} e^{2060/T} + 1} e^{-2 \sum_{i=1}^3 A_i U^i}, \quad k_{\text{дисп}} = \frac{9.8 \times 10^7 e^{-353/T}}{3.956 \times 10^{-4} e^{2060/T} + 1} e^{-2 \sum_{i=1}^3 A_i U^i},$$

$$A_i = a_{i1} + a_{i2} T, \quad a_{11} = 31.5_{-0.3}^{+0.3}, \quad a_{12} = -0.074_{-0.001}^{+0.001} \text{ 1/K}, \quad a_{21} = 14.92_{-0.9}^{+0.75},$$

$$a_{22} = -0.059_{-0.002}^{+0.002} \text{ 1/K}, \quad a_{31} = -38.66_{-1.55}^{+1.55}, \quad a_{32} = 0.132_{-0.004}^{+0.005} \text{ 1/K},$$



$$k_{\text{комп}} = 1.18_{-0.45}^{+0.4} \times 10^6 e^{-\frac{32040+1090}{RT}}, \quad k_{\text{расп1}} = 4.27_{-1.02}^{+1.11} \times 10^{16} e^{-\frac{124230+750}{RT}},$$

$$k_{\text{алд1}} = 1.97_{-0.51}^{+1.02} \times 10^{10} e^{-\frac{36360+800}{RT}}, \quad k_{\text{алд2}} = 7.80_{-1.72}^{+3.43} \times 10^8 e^{-\frac{30830+740}{RT}} e^{-2 \sum_{i=1}^3 A_i U^i},$$

$$k_{\text{расп2}} = 1.01_{-0.34}^{+0.34} \times 10^{19} e^{-\frac{130160+1040}{RT}}, \quad k_{\text{присоед}} = 1.17_{-0.3}^{+0.59} \times 10^{10} e^{-\frac{84250+840}{RT}},$$

$$k_{\text{коорд}} = 6.23_{-1.25}^{+1.37} \times 10^4 e^{-\frac{34080+680}{RT}}, \quad k_{\text{рост2}} = 5.29_{-1.27}^{+1.8} \times 10^5 e^{-\frac{34080+820}{RT}}.$$

Таким образом, по результатам квантово-химического и кинетического моделирования определили, что окончательный механизм процесса состоит из следующих реакций: 1) классической радикальной полимеризации; 2) инициатора с ферроценом; 3) контролируемой радикальной полимеризации, протекающей по механизму OMRP (Organometallic Mediated Radical Polymerization); 4) образования координационных активных центров; 5) роста цепи в координационной сфере металла.

Математическая модель кинетики процесса позволила провести численные эксперименты по определению кинетических закономерностей процесса и закономерностей управления молекулярно-массовыми характеристиками полиметилметакрилата.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-50186 мол\_нр.*

### Литература

1. Puzin, Yu.I. Yumagulova R.Kh., Kraikin V.A. Radical polymerization of methyl methacrylate and styrene in the presence of ferrocene / Yu.I. Puzin, R.Kh. Yumagulova, V.A. Kraikin // European Polymer Journal, 2001, v. 37, pp. 1801-1812.
2. Monakov, Yu.B. Radical polymerization of methyl methacrylate in the presence of benzoyl peroxide, ferrocene and zirconocene dichloride / Yu.B. Monakov, R.M. Islamova, A.K. Frizen, O.I. Golovochesova, S.V. Nazarova // Mendeleev Communications, 2011, v. 21, № 4, pp. 206-208.
3. Gaussian 09, Revision C, M. J. Frisch, et. al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
4. Улитин, Н.В. Методы моделирования кинетики процессов синтеза и молекулярно-массовых характеристик полимеров: монография / Н.В.

Улитин, К.А. Терешенко. – Казань: Изд-во Казан.нац. исслед. технол. ун-та, 2014. – 228 с.

© Терешенко К.А., Фризен А.К., Темникова Н.Е., Буракова А.О., Хамитов Э.М., Шиян Д.А., Улитин Н.В., Колесов С.В., 2016 г.

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ И КИНЕТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СТИРОЛА,  
ИНИЦИИРУЕМОЙ РАДИКАЛЬНЫМ ИНИЦИАТОРОМ  
ИЛИ УФ-ОБЛУЧЕНИЕМ СОВМЕСТНО С ФЕРРОЦЕНОМ**

Улитин Н.В.<sup>1</sup>, Шиян Д.А.<sup>1</sup>, Терещенко К.А.<sup>1</sup>, Фризен А.К.<sup>2</sup>,  
Хамитов Э.М.<sup>3</sup>, Темникова Н.Е.<sup>1</sup>, Колесов С.В.<sup>2</sup>, Сигаева Н.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, Россия

<sup>2</sup> Уфимский Институт химии РАН, г. Уфа, Россия

<sup>3</sup> Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Полимеризация виниловых мономеров, инициируемая химически (радикальным инициатором) или физически (термоиницирование, УФ-облучением) совместно с металлоценами, имеет признаки псевдоживой полимеризации и позволяет получать стереорегулярные полимеры (хотя для процессов радикальной полимеризации, даже протекающих по какому-либо псевдоживому механизму, это не характерно). Несмотря на большое количество экспериментальных данных о кинетике этих процессов, о молекулярно-массовых характеристиках и стереорегулярности получаемых полимеров [1-5], на данный момент отсутствуют систематические теоретические представления о механизмах этих процессов. Эту актуальную проблему можно решить при одновременном использовании квантово-химического и кинетического моделирования. В качестве объекта исследования в настоящей работе выбрана полимеризация стирола, инициируемая пероксидом бензоила или УФ-облучением в присутствии ферроцена. Таким образом, целью работы стало исследование механизма этого процесса методами квантово-химического и кинетического моделирования.

Все квантово-химические расчеты проводили в программе Gaussian'09 Rev. C.01 (Version: EMT64T legacy/Linux, номер лицензии: FA7353864010) [6] на кластерном суперкомпьютере ЦКП «Химия» Уфимского Института химии РАН. Гипотетическую схему процесса полимеризации составили, исходя из теории радикальной полимеризации виниловых мономеров [7] и представлений о химии ферроцена [8], затем для каждой реакции с использованием результатов квантово-химического моделирования вычислили тепловые эффекты, активационные барьеры и энергии Гиббса. Далее по этим данным оценили температурные зависимости констант скоростей реакций (использовали уравнения Эйринга и Аррениуса). Найденные в результате квантово-химического моделирования температурные зависимости констант скоростей реакций использовали в качестве первичных приближений при решении обратной

кинетической задачи. Постановка обратной кинетической задачи заключалась в определении точных температурных зависимостей констант скоростей реакций, чтобы расхождение между рассчитанными по кинетической модели процесса и соответствующими экспериментальными данными (кинетические кривые процесса при различных температурах, значения среднечисленной и среднемассовой молекулярных масс и коэффициента полидисперсности полистирола, получаемого при различных температурах и выделяемого при различных конверсиях мономера) было минимально. Кинетическую модель процесса разработали на основе схемы процесса, обоснованной квантово-химическим моделированием, с использованием закона действующих масс и метода производящих функций [9].

$$d[I]/dt = f_1([I], [Mc], [M], \dots, \mu_{qs}, \mu_{3pr}, k),$$

$$d[Mc]/dt = f_2([I], [Mc], [M], \dots, \mu_{qs}, \mu_{3pr}, k),$$

$$d[M]/dt = f_3([I], [Mc], [M], \dots, \mu_{qs}, \mu_{3pr}, k),$$

$$\dots$$

$$d\mu_{qs}/dt = f_i([I], [Mc], [M], \dots, \mu_{qs}, \mu_{3pr}, k),$$

...

где [...] – концентрация соответствующего соединения (расшифровку обозначений соединений см. в табл. 1);  $f_i$  – функции, записанные по

закону действующих масс;  $t$  – время;  $\mu_{qs} = \sum_{n=1}^{\infty} n^s [X(n)]$  –  $s$ -ый момент

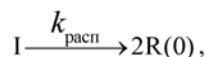
молекулярно-массового распределения (где  $X = R, Ad_1, Ad_2, Ad_3$  и  $P$  при порядковом номере момента  $q = 1, 2, 4, 5$  и  $6$  соответственно;

$\mu_{3pr} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{z=1}^{\infty} n^p z^r [Ad(n, z)]$  при  $q = 3$  ( $p, r = 0, 1, 2$ ).

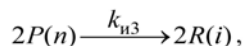
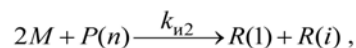
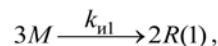
Функционал расхождения между рассчитанными по кинетической модели и экспериментальными данными минимизировали по методу Хука-Дживса.

В конечном итоге, в результате решения обратной кинетической задачи получили окончательные температурные зависимости констант скоростей реакций процесса, определили интервалы неопределенности по Канторовичу для предэкспоненциального множителя и активационного барьера, входящих в эти зависимости, и идентифицировали окончательную схему процесса (Обозначения и структурные формулы соединений представлены в таблице 1):

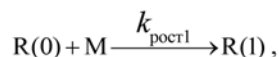
1) распад инициатора:



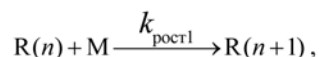
2) терминицирование:



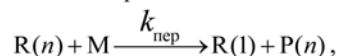
3) присоединение первой молекулы мономера к свободному радикалу:



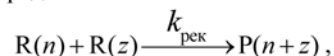
4) рост цепи:



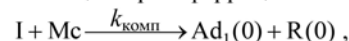
5) передача цепи на мономер:



6) рекомбинация радикалов:



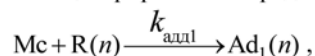
7) взаимодействие инициатора с ферроценом:



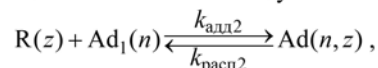
8) распад аддукта  $[\text{Cp}_2\text{Fe}\cdots\text{PhCOO}]^\cdot$ :



9) образование металлоцентрированного радикала  $\text{CpFe}^\cdot(\text{CpR})$ :



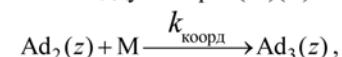
10) обратимое взаимодействие радикала роста с металлоцентрированным радикалом  $\text{CpFe}^\cdot(\text{CpR})$  как со спиновой ловушкой (Organometallic Mediated Radical Polymerization):



11) образование моноциклопентадиенильного аддукта  $\text{CpFe}(\text{M})(\text{R})$  из аддукта  $\text{CpFe}(\text{CpR})\text{R}$ :



12) образование координационного активного центра  $\text{CpFe}(\text{M})_2(\text{R})$  за счет координации мономера по атому металла в моноциклопентадиенильном аддукте  $\text{CpFe}(\text{M})(\text{R})$ :



13) реакция координационного роста цепи на активном центре  $\text{CpFe}(\text{M})_2(\text{R})$  за счет присоединения скоординированной молекулы стирола к полимерной цепи в сфере атома металла:

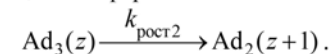
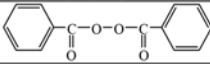
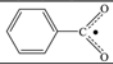

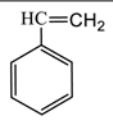
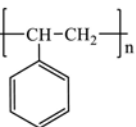
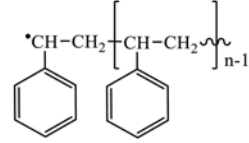
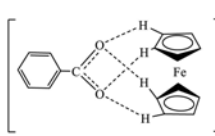
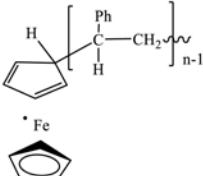
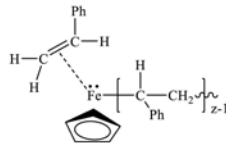
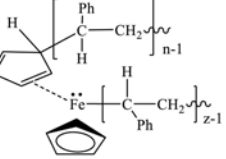
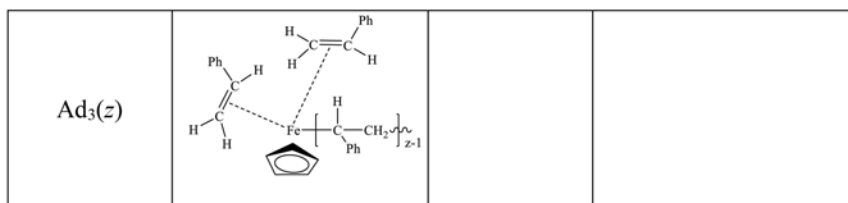


Таблица 1. Обозначения и структурные формулы соединений

Обозначение	Структурная формула	Обозначение	Структурная формула
I		R(0)	
Mc		M	
P(n)		R(n)	
Ad <sub>1</sub> (0)		Ad <sub>1</sub> (n)	
Ad <sub>2</sub> (z)		Ad(n, z)	



На математической модели кинетики процесса провели численные эксперименты, позволившие выявить кинетические закономерности процесса и закономерности управления молекулярно-массовыми характеристиками полистирола.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-50187 мол\_нр.*

### Литература

1. Puzin, Yu.I. Effect of ferrocene on the radical polymerization of methyl methacrylate / Yu.I.Puzin, P.Kh. Yumagulova, V.A. Kraikin, I.A. Ionova, Yu.A. Prochukhan // Polymer Science. Series B, 2000, v. 42, № 3-4, pp. 90-93.
2. Sigaeva, N.N. Metallocene catalysis in the complex-radical polymerization of methyl methacrylate / N.N. Sigaeva, A.K. Friesen, I.I. Nasibullin, N.L. Ermolaev, S.V. Kolesov // Kinetics and Catalysis, 2012, v. 53, № 4, pp. 470-476.
3. Sigaeva, N.N. Complex-radical polymerization of methyl methacrylate in the presence of metallocenes / N.N. Sigaeva, R.Kh. Yumagulova, A.K. Frizen, S.V. Kolesov // Polymer Science, 2009, v. 51 B, № 7-8, pp. 226-232.
4. Sigaeva N.N., Yumagulova R.Kh., Nasretdinova R.N., Frisen A.K., Kolesov S.V. Kinetics of the complex-radical polymerization of methyl methacrylate in the presence of initiating metallocene systems // Kinetics and Catalysis, 2009, v. 50, № 2. pp. 168-173.
5. Kolesov S.V., Nasibullin I.I., Frizen A.K., Sigaeva N.N., Galkin E. G. Regularities of postpolymerization in a vinyl monomer-metallocene-radical initiator system // Polymer Science, 2015, v. 57 B, № 2, pp. 71-76.
6. Gaussian 09, Revision C, M. J. Frisch, et.al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
7. Bagdasar'yan, Kh.S. Theory of free-radical polymerization. Jerusalem: Israel Program for Scientific Translations, Hartford, Conn., D. Davey, P. 1968.

8. Перевалова, Э.Г. Железоорганические соединения. Ферроцен / Э.Г. Перевалова, М.Д. Решетова, К.И. Грандберг. – М.: Наука, 1983. – 544 с.
9. Улитин, Н.В. Методы моделирования кинетики процессов синтеза и молекулярно-массовых характеристик полимеров: монография /Н.В. Улитин, К.А. Терещенко. – Казань: Изд-во Казан.нац. исслед. технол. ун-та, 2014. – 228 с.

© Улитин Н.В., Шиян Д.А., Терещенко К.А., Фризен А.К.,  
Хамитов Э.М., Темникова Н.Е., Колесов С.В., Сигаева Н.Н., 2016 г.

## СОДЕРЖАНИЕ

### МАТЕМАТИКА

<b>Арисова О.Г.</b> МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНЫХ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ	5	<b>Дикущина Е.А.</b> ДИНАМИКА СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ЭКСИТОНА В $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ С УЧЕТОМ ХУНДОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ	69
<b>Атнагулов А.И.</b> ВАЖНЕЙШИЕ СВОЙСТА РЕЗОЛВЕНТЫ ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА-БЕЛЬТРАМИ	12	<b>Егоров Е.С.</b> ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ В ПЛАСТЕ С НАРУШЕННОЙ ПРИСКВАЖИННОЙ ЗОНОЙ	76
<b>Белевцов Н.С.</b> ПОСТРОЕНИЕ ФОРМУЛЫ ПРОДОЛЖЕНИЯ ДЛЯ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ПОТЕНЦИАЛОМ РИССА	17	<b>Емельянов А.Г., Хабибуллин И.Л.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИТОКА К СКВАЖИНЕ С ГРП С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ОБЪЕМА СТВОЛА СКВАЖИНЫ	79
<b>Гайсина Г.А.</b> ФОРМУЛА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОРЯДКА СУММЫ РЯДА ДИРИХЛЕ, СХОДЯЩЕГОСЯ В ПОЛУПЛОСКОСТИ	22	<b>Идельбакова Р.В., Лопатюк А.В.</b> ПРОЕКТИРОВАНИЕ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ НА УЧАСТКЕ С. МРАКОВО-С. ПОДГОРНОЕ	86
<b>Павленко В.А.</b> МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СУШКИ ЗЕРНА	30	<b>Исакаева Ю.И., Лопатюк А.В.</b> МОДЕРНИЗАЦИЯ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕДАЧИ НА УЧАСТКЕ С. ИСЯНГУЛОВО-С. ИДЕЛЬБАКОВО	91
<b>Сираева Д.Т.</b> РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЗМУЩЕНИЙ ЗВУКОВОЙ ВОЛНЫ НА ИНВАРИАНТНОМ РЕШЕНИИ МОДЕЛИ РАНГА 2 ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТИПА	35	<b>Кабанова П.К., Аксаков А.В.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСКРЫТИЯ ТРЕЩИНЫ В СЛОИСТО-НЕОДНОРОДНОМ ПЛАСТЕ	95
<b><u>ФИЗИКА</u></b>		<b>Копылов Д., Соколовский В., Загребин М., Бучельников В.</b> ИССЛЕДОВАНИЯ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ В СОЕДИНЕНИЯХ $\text{Mn}_3\text{-X-C}$ ( $X = \text{Ga, Ge, Sn, In}$ ) ПЕРВОПРИНЦИПНЫМИ МЕТОДАМИ	101
<b>Сабитов Р.М.</b> 95 ЛЕТ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ М.М. ФАРЗТДИНОВА – ОСНОВАТЕЛЯ ШКОЛЫ ФИЗИКОВ - ТЕОРЕТИКОВ В БАШГУ (1921-1991)	43	<b>Лопатюк А.В., Маркушева А.М.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ СОЛИТОННОЙ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ	106
<b>Абдрахманов Н.И.</b> ВЛИЯНИЕ МИНЕРАЛЬНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ НА ТЕРМОСТОЙКОСТЬ ПОЛИСУЛЬФОНА	51	<b>Магзумьянова Л.Ф., Лопатюк А.В.</b> ПРОЕКТИРОВАНИЕ 4 ГИГАБИТНОЙ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕДАЧИ НА УЧАСТКЕ УФА - НЕФТЕКАМСК	111
<b>Абдрахманов Н.И., Тавлыкаев Р.Ф., Салихов Р.Б.</b> МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИСУЛЬФОНА	53	<b>Марьин Д.Ф., Иващенко Д.С., Сахибгареев Э.Э.</b> АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ АНАЛИЗ ВЗАИМОВЛИЯНИЯ СКВАЖИН КАК ИНСТРУМЕНТ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ИСТОЧНИКОВ ОБВОДНЕНИЯ	118
<b>Абдуллин А.У., Акманова Г.Р.</b> МОДУЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОБУЧЕНИЯ И ОЦЕНКИ УСПЕВАЕМОСТИ СТУДЕНТОВ. ЧТО ВЕСОМЕЕ: ТЕКУЩИЙ ИЛИ РУБЕЖНЫЙ КОНТРОЛЬ?	56	<b>Мухаметдинова О.Э., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.</b> ВЛИЯНИЕ ГОМОГЕНИЗАЦИИ НА ИЗМЕЛЬЧЕНИЕ ЗЕРЕН АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ВСЕСТОРОННЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КОВКЕ	126
<b>Габдрахманова Л.А., Альмухаметов Р.Ф.</b> РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КОБАЛЬТЕ	60	<b>Салимгареев Р.Р., Лопатюк А.В.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ DWDM	132

<b>Тулеганова Г.Ю., Лукманов А.Р.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ КРИВЫХ ВРАЩЕНИЯ ГАЛАКТИК В ПРОСТРАНСТВЕ-ВРЕМЕНИ КРОТОВЫХ НОР	139
<b>Хайрзаманова Э.Э., Шиндров А.А., Саунина С.И., Третьяченко Е.В., Гороховский А.В., Фазлитдинова А.Г., Сафошкин Д.З.</b> ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПРОДУКТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИТИТАНАТА КАЛИЯ С РАСТВОРАМИ СОЛЕЙ ХРОМА	146
<b><u>ХИМИЯ</u></b>	
<b>Залимова М.М., Залимов Т.Р.</b> ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ДИМЕТИЛДИАЛЛИЛАММОНИЙ ХЛОРИДА	153
<b>Залимова М.М., Залимов Т.Р.</b> ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ТРЕТ-БУТИЛХЛОРИДА	158
<b>Захаров В.П., Ганиев Г.М., Круглова А.Е., Степанова В.А., Терещенко К.А., Улитин Н.В.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКРОКИНЕТИКИ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА БУТИЛКАУЧУКА В ТРУБЧАТОМ ТУРБУЛЕНТНОМ РЕАКТОРЕ ДИФУЗОР-КОНФУЗОРНОЙ КОНСТРУКЦИИ	161
<b>Зиганшина А.С., Терещенко К.А., Ганиев Г.М., Захаров В.П., Улитин Н.В.</b> ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИНЦИПОВ УПРАВЛЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНО-МАССОВЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ПОЛИБУТАДИЕНА, ПОЛУЧАЕМОГО ИОННО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИЕЙ В ПРИСУТСТВИИ МОДИФИЦИРОВАННОЙ В ТУРБУЛЕНТНЫХ ПОТОКАХ ТИТАНОВОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ	166
<b>Кошкина О.А., Антропова И.Г.</b> ВОСТАНОВЛЕНИЕ ИОНОВ СЕРЕБРА ЭКСТРАКТАМИ МУРРАЙИ	173
<b>Саньяров Д.Д., Диннахметова Д.Р., Фризен А.К.</b> КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЯТИКРАТНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ ИЗОЦИАНПРОПИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ К ФУЛЛЕРЕНУ C <sub>60</sub>	178
<b>Темникова Н.Е., Терещенко К.А., Улитин Н.В., Шиян Д.А., Фризен А.К., Колесов С.В., Сигаева Н.Н.</b> УСТАНОВЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА НА ИНИЦИИРУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ «ПЕРОКСИД БЕНЗОИЛА-ТИТАНОЦЕНДИХЛОРИД»	184
<b>Терещенко К.А., Фризен А.К., Темникова Н.Е., Буракова А.О.,</b>	189

<b>Хамитов Э.М., Шиян Д.А., Улитин Н.В., Колесов С.В.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО И КИНЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РАДИКАЛЬНО ИНИЦИИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА, ПРОТЕКАЮЩЕЙ В ПРИСУТСТВИИ ФЕРРОЦЕНА	195
<b>Улитин Н.В., Шиян Д.А., Терещенко К.А., Фризен А.К., Хамитов Э.М., Темникова Н.Е., Колесов С.В., Сигаева Н.Н.</b> КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ И КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СТИРОЛА, ИНИЦИИРУЕМОЙ РАДИКАЛЬНЫМ ИНИЦИАТОРОМ ИЛИ УФ-ОБЛУЧЕНИЕМ СОВМЕСТНО С ФЕРРОЦЕНОМ	

*Научное издание*

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА  
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ**

*IX Международная школа-конференция  
для студентов, аспирантов и молодых ученых  
(Уфа, 3- 7 октября 2016 г.)*

**СБОРНИК ТРУДОВ**

**МАТЕМАТИКА. ФИЗИКА. ХИМИЯ**

**Научные статьи**

*Лицензия на издательскую деятельность  
ЛР № 021319 от 05.01.99 г.*

Подписано в печать 26.12.2016 г. Формат 60x84/16.

Усл. печ. л. 11,7. Уч.-изд. л. 20,2.

Тираж 300. Изд. № 245. Заказ 589.

*Редакционно-издательский центр  
Башкирского государственного университета  
450076, РБ, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.*

*Отпечатано на множительном участке  
Башкирского государственного университета  
450076, РБ, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.*