



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

3(248) 2016

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН – председатель;
Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Сулис Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;
Каприлова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр
Техасского университета, Даллас, США;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;
Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Привалов В.Е., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр
мезобионаносистем (MBN), Франкфурт-на-Майне, Германия;
Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий,
Лозанна, Швейцария;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.
Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет,
Канберра, Австралия.

Журнал с 1995 года издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» ISSN 1994-2354.

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс **71823**.

Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibrary.ru>

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства: Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.
Тел. редакции (812) 294-22-85.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2016

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics
and Mathematics

3(248) 2016

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2016

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

Zh.I. Alferov – full member of RAS, head of the editorial council;
A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
D.A. Varshalovich – full member of RAS; *V.A. Glukhikh* – full member of RAS;
A.Ye. Zhukov – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
V.K. Ivanov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS;
A.I. Rudskoy – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
R.A. Suris – full member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
I.B. Bezprozvanny – Dr. Sc. (Biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;
A.V. Blinov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.V. Donetski – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;
D.A. Firsov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.S. Kheifets – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia.
J.B. Malherbe – Dr. Sc. (Physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;
V.M. Ostryakov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.E. Privalov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Solov'yov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;
A.K. Tagantsev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
I.N. Toptygin – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
E.A. Tropp – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.

The journal is included in the List of leading peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU' (ISSN 1994-2354).

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

The journal is distributed through the CIS countries catalogue, the «Press of Russia» joint catalogue and the «Press by subscription» Internet catalogue. The subscription index is **71823**.

The journal is in the Russian Science Citation Index (RSCI) database.

© Scientific Electronic Library (<http://www.elibrary.ru>).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address: 195251 Politeknicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2016

Содержание

Физика конденсированного состояния

Бурковский Р.Г., Андроникова Д.А., Бронвальд Ю.А., Филимонов А.В., Вахрушев С.Б. Анализ фононных дисперсионных кривых галенита свинца в кубической фазе на основе моделей динамики решетки (статья на английском языке)	9
Ванина П.Ю., Набережнов А.А., Нижанковский В.И., Мамин Р.Ф. Температурная эволюция магнитных свойств лантан-стронциевых манганитов	15
Набережнов А.А., Долгаков И.А., Товар М., Алексеева О.А., Вахрушев С.Б. Анализ структуры высокотемпературной фазы мультиферроидных твердых растворов PFW-PT	23
Камалов А.М., Борисова М.Э. Влияние влаги на релаксацию электрического заряда в модифицированных пленках на основе полиимида	33

Математическое моделирование физических процессов

Мусаева Д.А., Ильин В.К., Гежа В., Бааке Э. Экспериментальное исследование влияния низкочастотной импульсной силы Лоренца на движение расплава галинстана	39
--	----

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Мелькер А.И., Крупина М.А. Геометрическое моделирование роста мидифуллеренов от C_{24} до C_{48} (статья на английском языке)	52
Мелькер А.И., Воробьева Т.В. Реакции синтеза куполообразных полуфуллеренов (статья на английском языке)	59

Приборы и техника физического эксперимента

Крымская К.И., Андреева Н.В., Филимонов А.В. Методика определения модуля Юнга биообъектов с помощью атомно-силовой микроскопии в широком диапазоне температур ниже комнатной	68
---	----

Физическая электроника

Савин В.Н., Мольков С.И. Учет влияния эмиссионных процессов на заряд микро- и наночастиц в пылевой плазме для технологических приложений	78
---	----

Биофизика и медицинская физика

Рябов В.А. Изучение акустических сигналов и предполагаемого разговорного языка дельфинов	88
Рябов В.А. Влияние акустического экранирования области подбородочных каналов дельфина на чувствительность его слуха	102

Механика

Сухотерин М.В., Барышников С.О., Ломтева К.О. <i>Об однородных решениях задачи изгиба прямоугольной консольной пластины</i>	111
--	-----

Хроника

Вейс А.Н., Ящуржинская О.А. <i>Профессор Михаил Михайлович Бредов (к столетию со дня рождения)</i>	123
<i>Авторский указатель</i>	129

Contents

Condensed matter physics

Burkovsky R.G., Andronikova D.A., Bronwald Yu.A., Filimonov A.V., Vakhrushev S.B. <i>An analysis of the phonon dispersion curves of lead hafnate in the cubic phase using lattice-dynamical models</i>	9
Vanina P.Yu., Naberezhnov A.A., Nizhankovskii V.I., Mamin R.F. <i>Temperature evolution of lanthanum-strontium manganites magnetic properties</i>	15
Naberezhnov A.A., Dolgakov I.A., Tovar M., Alekseeva O.A., Vakhrushev S.B. <i>An analysis of the high-temperature phase structure of multiferroic solid solutions of the PFW-PT</i>	23
Kamalov A.M., Borisova M.E. <i>The influence of moisture on charge relaxation in modified polyimide films</i>	33

Simulation of physical processes

Musaeva D.A., Ilyin V.K., Geža V., Baake E. <i>Experimental investigation of low-frequency pulsed Lorentz force influence on the motion of Galinstan melt</i>	39
--	----

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Melker A.I., Krupina M.A. <i>Geometric modeling of midi-fullerenes growth from C_{24} to C_{48}</i>	52
Melker A. I., Vorobyeva T.V. <i>Fusion reactions of cupola half fullerenes</i>	59

Experimental technique and devices

Krymskaya K.I., Andreeva N.V., Filimonov A.V. <i>A technique for determining the Young's modulus of biological objects using atomic-force microscopy in the wide temperature range below RT</i>	68
--	----

Physical electronics

Savin V.N., Mol'kov S.I. <i>The effect of electron emission processes on micro- and nanoparticle charges in the dusty plasma: the accounting for engineering</i>	78
---	----

Biophysics and medical physics

Ryabov V.A. <i>The study of acoustic signals and the supposed dolphins' spoken language</i>	88
Ryabov V.A. <i>The effect of acoustic shielding the region of a dolphin's mental foramen on its hearing sensitivity</i>	102

Mechanics

Sukhoterlin M.V., Baryshnikov S.O., Lomteva K.O. <i>On homogeneous solutions of the problem of a rectangular cantilever plate bending</i>	111
--	-----

Chronicle

Veis A.N., Yashchurzhinskaya O.A. <i>Professor Mikhail Mikhailovich Bredov (dedicated to the 100th anniversary since his birth)</i>	123
<i>Author index</i>	129

DOI: 10.5862/JPM.248.1

UDC 538.975: 620.22 – 022.53

*R.G. Burkovsky¹, D.A. Andronikova¹,
Yu. A. Bronwald¹, A.V. Filimonov¹, S.B. Vakhrushev^{2,3}*

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

² Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russian Federation

³ St. Petersburg State University

AN ANALYSIS OF THE PHONON DISPERSION CURVES OF LEAD HAFNATE IN THE CUBIC PHASE USING LATTICE-DYNAMICAL MODELS

We have analyzed the phonon dispersion curves in the paraelectric phase of a lead hafnate crystal (PbHfO_3) by means of two different lattice-dynamical models. Both the rigid-ion model and the shell one provided an acceptable description of the available experimental data. The atomic displacement patterns were qualitatively different for the two models. In the rigid-ion model the motion in the characteristic low-energy flattened transverse acoustic branch contained both lead and hafnium displacements, while for the shell model it corresponded mainly to lead displacements with the small contribution of oxygen displacements. The shell model allows simultaneous description of the phonon dispersion curves and the correct value of the dielectric constant.

ANTIFERROELECTRIC, LEAD HAFNATE, LATTICE DYNAMICS, SHELL MODEL.

1. Introduction

Lead-based perovskites find numerous applications in technology. They are used in high-performance piezoelectric ceramics [1], electrooptical materials [2] and non-volatile random access memory [3]. Antiferroelectric materials attract particular interest because their lattice dynamics has not been completely understood up to the present. The classical antiferroelectrics PbZrO_3 and PbHfO_3 exhibit a critical increase in the dielectric permittivity upon approaching the phase transition [4]. This indicates the presence of a soft ferroelectric phonon mode. On the other hand, the phase transition leads to the formation of the antiferroelectric phase [5] instead of the ferroelectric one. The physical reason for the formation of the antipolar order in these materials is currently not completely clear. Under small doping by ferroelectric additions,

classical antiferroelectric PbZrO_3 undergoes phase transitions to incommensurate phases [6], which have an even more complex form of structural modulation than antiferroelectricity. Until recently, there was no information on the phonon dispersion of lead-based antiferroelectrics. It has been shown that PbZrO_3 single crystals have transverse acoustic (TA) phonon branch, which is highly flattened at finite wavevectors in the $[1\ 1\ 0]$ pseudocubic direction [7]. In the following study on PbHfO_3 we have shown an anti-crossing between the transverse acoustic and low energy optic branches [8]. In that paper we used the simplest rigid-ion model for describing the dispersion curves.

Here we consider a more elaborate and commonly used shell model [9] which accounts for the electronic polarizability of ions. The results of the description within these two models are compared to each other in terms

of the predicted phonon energies and the polarization eigenvectors.

2. Analysis method

The rigid-ion model was initially introduced by Kellermann for describing the dispersion curves in sodium chloride [10]. Later on it was adapted by Cowley for modeling the lattice dynamics in perovskites [9]. This model is the simplest one to account for the effects of electric fields created when charged ions are displaced from their equilibrium positions. In the case of perovskite structure the rigid-ion model has eight independent parameters: six constants describing the central short-range forces between the nearest neighbor ions and two constants defining the charges of the ions. The charge of the third ion is determined by the condition of electroneutrality of the unit cell. To fit the model we took the experimental data (wavevectors, energies and energy determination uncertainties), corresponding to

$T = 773$ K from Ref. [8]. We used all the available experimental points for transverse and longitudinal phonons in $[1\ 0\ 0]$ and $[1\ 1\ 0]$ directions simultaneously. The lattice constant was taken as $a = 4.15$ Å. The least-squares fits were accomplished using Matlab software.

The shell model (SM) was first introduced by Woods, Cochran and Brockhouse [11] for describing phonons in alkali halides and adapted for use with perovskite structure by Cowley [9]. In the present work, we used the SM slightly modified to account for anisotropy of oxygen polarizability, as it was done by Fontana et al. [12] for KNbO_3 . In addition to the experimental data determined by inelastic X-ray scattering, we used with the SM an additional experimental point, which is the value of the dielectric constant of the material (we took ϵ as about 575 ± 50 [4]). The model dielectric constant was calculated by the method discussed by Cowley [9]. In order to improve the conditionality of the fitting problem we have fixed the

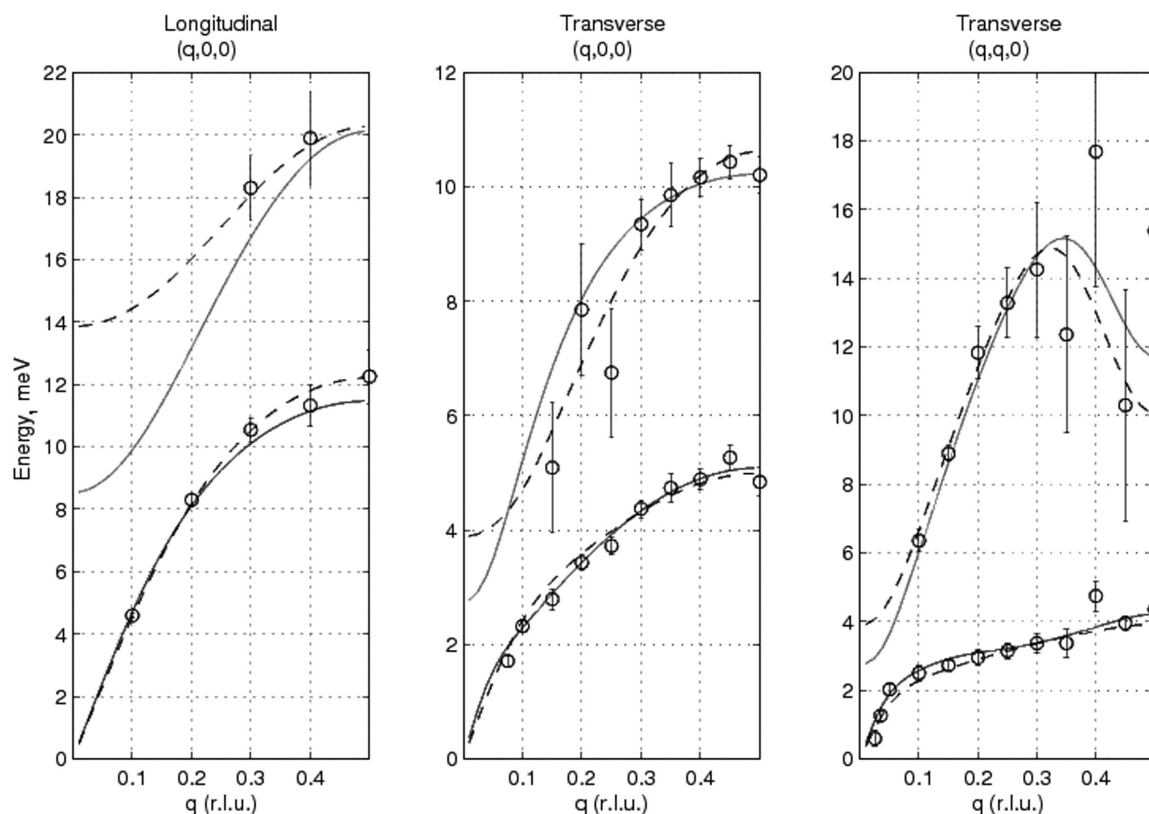


Fig. 1. Experimentally determined dispersion curves (symbols), the rigid-ion model fit (dashed lines) and the SM fit (solid lines). Each panel shows one acoustic (lower energy) and one optical (higher energy) phonon branch



electronic polarizabilities of Pb and Hf to their expected values. For Pb we used $\alpha = 4.9 \text{ \AA}^3$ [13] and for Hf we used the value known for the chemically similar Zr ($\alpha = 0.47 \text{ \AA}^3$ [13]).

3. Results and discussion

Fig. 1 shows the experimentally determined phonon energies together with the results of the fits by the two models. The result of the fit by the rigid-ion model is shown by dashed lines, while the SM fit is shown by solid lines. Both models provide an adequate description of the characteristic flattened transverse acoustic branch in the $(q, q, 0)$ direction and the avoided crossing between the acoustic and optic branches. Both models reproduce the change in the group velocity for the optic branch in $(q, q, 0)$ direction at $q = 0.35$. The models give notably different frequencies for the small-wavevector optical branches, where there were no experimental data to directly fit to.

The largest difference is observed for the longitudinal optical branch. The zone-center frequency of the transverse optical (ferroelectric) mode is notably lower for the SM.

The two models give different patterns of the ionic displacements in the phonon branches. In the case of the rigid-ion model the fit indicates that the TA branch in the $(q, q, 0)$ direction, for $q > 0.1$, corresponds mainly to the motion of lead and hafnium with the lead displacements about 2 times larger than the hafnium ones. In the case of the shell model the displacements in this branch are mostly due to Pb with a small addition of the oxygen displacement (about 15 percent of that of Pb). The result of the shell model appears to be more logical. The hafnium ion has a large ionic radius and, thus, is not expected to participate intensively in the phonon modes with small energy. On the other hand, the lead

Table 1

The comparison between the parameters of the two lattice-dynamical models describing the phonon dispersion curves

Description	Parameter	Value	
		RIM	SM
Short-range force constant, $e^2/2v_a$	A_1	20.15	19.25
	B_1	-3.944	0.164
	A_2	289.1	208.1
	B_2	-63.09	-24.07
	A_3	-11.220	5.237
	B_3	3.595	0.860
Ion charge, E	Z_1	1.700	2.275
	Z_2	4.070	3.000

Abbreviations: RIM and SM are the rigid-ion and the shell model, respectively

Table 2

The remaining parameters of the shell model describing the phonon dispersion curves

Electronic polarizability		Short-range polarizability		Core-shell force constants	
v_a		e		e^2/v_a	
α_1	α_2	d_1	d_2	k_{31}	k_{32}
0.06856	0.006576	-0.741	-0.250	117	70

ion is expected to move intensively in the low-energy modes because of its small ionic radius as compared to the available space in the large unit cell of PbHfO_3 .

The parameters of the fits using the rigid-ion model and the shell model are listed in Tables 1 and 2. Similar to the data on SrTiO_3 , the short-range force constants are generally larger in magnitude for the shell model. In the case of the shell model the dielectric constant corresponding to the fit is 527, which is reasonably close to the experimental value of about 575 at high temperatures. Like other perovskites, the SM fit for PbHfO_3 gives a strongly negative oxygen shell charge: about -2.7 electrons. By analogy with the analysis performed by Cowley for SrTiO_3 [9], we have analyzed the anisotropy of the oxygen polarizability. In the directions parallel to the corresponding Pb-O planes the polarizability is $4.4 \text{ \AA}^3$, while in the direction towards hafnium it is only $1.8 \text{ \AA}^3$. This anisotropy of oxygen polarizability may be important for further understanding of the microscopic reason for the flattened TA branch.

4. Conclusion

We have performed the analysis of the phonon dispersion curves of PbHfO_3 crystals in the paraelectric phase using two lattice-dynamical models. Both models provide an adequate description of the available data. The shell model, in addition to the actual dispersion curves, provides a reasonable value for the dielectric constant confirming the reliability of the ionic displacement patterns provided by this model.

Acknowledgements

R. Burkovsky acknowledges the support by Grant of the President of the Russian Federation for state support of Russian young scientists MK-5685.2016.2.

D. Andronikova and Yu. Bronwald acknowledge the support of RFBR (grant 16-02-01162). The work of Yu. Bronwald and A. Filimonov was performed under the government order of the Ministry of Education and Science of RF.

Грант президента Российской Федерации MK-5685.2016.2

REFERENCES

- [1] J.F. Scott, Applications of modern ferroelectrics, *Science* 315 (5814) (2007) 954–959.
- [2] G.H. Haertling, Ferroelectric ceramics: history and technology, *J. Am. Ceram. Soc.* 82 (4) (1999) 797–818.
- [3] X. Wei, A. Tagantsev, A. Kvasov, et al., Ferroelectric translational antiphase boundaries in nonpolar materials, *Nature communications* 5 (2014) Article number 3031.
- [4] G. Samara, Pressure and temperature dependence of the dielectric properties and phase transitions of the antiferroelectric perovskites: PbZrO_3 and PbHfO_3 , *Phys. Rev., B.* 1(9) (1970) 3777–3785.
- [5] D. Corker, A. Glazer, W. Kaminsky, et al., Investigation into the crystal structure of the perovskite lead hafnate, PbHfO_3 , *Acta Crystallographica, Section B: Structural Science.* B54 (Part 1) (1998) 18–28.
- [6] I. MacLaren, R. Villaurrutia, B. Schaffer, et al., Atomic-scale imaging and quantification of electrical polarisation in incommensurate antiferroelectric lanthanum-doped lead zirconate titanate, *Advanced Functional Materials.* 22(2) (2012) 261–266.
- [7] A.K. Tagantsev, K. Vaideeswaran K., S.B. Vakhrushev, et al., The origin of antiferroelectricity in PbZrO_3 , *Nature Communications*, 4, art. No. 3229 (2013).
- [8] R. Burkovsky, D. Andronikova, Yu. Bronwald, et al., Lattice dynamics in the paraelectric phase of PbHfO_3 studied by inelastic X-ray scattering, *Journal of Physics Condensed Matter*, 27 (33) (2015) 335901–336000.
- [9] R.A. Cowley, Lattice dynamics and phase transitions of strontium titanate, *Phys. Rev.* 134 (4A) (1964) A981–A997.
- [10] E.W. Kellermann, Theory of the vibrations of the sodium chloride lattice, *Phil. Trans. R. Soc. Lond., A.* 238 (1940) 513–548.
- [11] A.D.B. Woods, W. Cochran, B.N. Brockhouse, Lattice dynamics of alkali halide crystals, *Phys. Rev.* 119 (3) (1960) 980–999.
- [12] M. Fontana, Lattice dynamics of the cubic-tetragonal phase transition in KNbO_3 , *Journal de Physique.* 42 (C6) (1981) 749–751.
- [13] J.R. Tessman, A. Kahn, W. Shockley, Electronic polarizabilities of ions in crystals, *Phys. Rev.* 92 (4) (1953) 890–895.



THE AUTHORS

BURKOVSKY Roman G.*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

roman.burkovsky@gmail.com

ANDRONIKOVA Dariya A.*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

andronikova.daria@gmail.com

BRONWALD Yuriy A.*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

yuramel@gmail.com

FILIMONOV Aleksey V.*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

filimonov@rphf.spbstu.ru

VAKHRUSHEV Sergey B.*Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg State University*

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation

s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

Бурковский Р.Г., Андроникова Д.А., Бронвальд Ю.А., Филимонов А.В., Вахрушев С.Б. АНАЛИЗ ФОНОННЫХ ДИСПЕРСИОННЫХ КРИВЫХ ГАФНАТА СВИНЦА В КУБИЧЕСКОЙ ФАЗЕ НА ОСНОВЕ МОДЕЛЕЙ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ.

Приведен анализ фоновых дисперсионных кривых в параэлектрической фазе кристаллов гафната свинца (PbHfO_3) с использованием двух различных моделей динамики решетки. Модель жестких ионов и оболочечная модель обеспечивают удовлетворительное описание доступных экспериментальных данных. Паттерны атомных смещений являются качественно различными для двух моделей. В случае модели жестких ионов движение, соответствующее характерной низкоэнергетической плоской поперечной акустической ветви, содержит смещения свинца и гафния. В то же время, для оболочечной модели такое движение соответствует в основном динамическим смещениям свинца с малым вкладом смещений кислорода.

АНТИСЕГНЕТОЭЛЕКТРИК, ГАФНАТ СВИНЦА, ДИНАМИКА РЕШЕТКИ, ОБОЛОЧЕЧНАЯ МОДЕЛЬ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Scott J.F., Applications of modern ferroelectrics // Science. 2007. Vol. 315. Iss. 5814. Pp. 954–959.
- [2] Haertling G.H. Ferroelectric ceramics: history and technology // J. Am. Ceram. Soc. 1999. Vol. 82. No. 4. Pp. 797–818.
- [3] Wei X., Tagantsev A., Kvasov A., et al. Ferroelectric translational antiphase boundaries in nonpolar materials // Nature communications. 2014. Vol. 5. Art. No. 3031.
- [4] G. Samara, Pressure and temperature dependence of the dielectric properties and phase transitions of the antiferroelectric perovskites: PbZrO_3 and PbHfO_3 // Phys. Rev. B1. 1970. Vol. 1. No. 9. 3777–3785.
- [5] Corker D., Glazer A., Kaminsky W., et al. Investigation into the crystal structure of the perovskite lead hafnate, PbHfO_3 // Acta Crystallographica. Sec. B: Structural Science. 1998. Vol. B54. Part 1. Pp. 18–28.
- [6] MacLaren I., Villaurretia R., Schaffer B., et al. Atomic-scale imaging and quantification

of electrical polarisation in incommensurate antiferroelectric lanthanum-doped lead zirconate titanate // *Advanced Functional Materials*. 2012. Vol. 22. No. 2. Pp. 261–266.

[7] **Tagantsev A.K., Vaideeswaran K., Vakhrushev S.B., et al.**, The origin of antiferroelectricity in PbZrO_3 // *Nature Communications*. 2013. Vol. 4. Art. No. 3229.

[8] **Burkovsky R., Andronikova D., Bronwald Yu., et al.** Lattice dynamics in the paraelectric phase of PbHfO_3 studied by inelastic X-ray scattering // *J. Phys. Cond. Matt.* 2015. Vol. 27. No. 33. Pp. 335901–336000.

[9] **Cowley R.A.** Lattice dynamics and phase

transitions of strontium titanate // *Phys. Rev. A*. 1964. Vol. 134. No. 4A. Pp. A981–A997.

[10] **Kellermann E.W.** Theory of the vibrations of the sodium chloride lattice // *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*. 1940. Vol. 238. Pp. 513–548.

[11] **Woods A.D.B., Cochran W., Brockhouse B.N.** Lattice dynamics of alkali halide crystals // *Phys. Rev.* 1960. Vol. 119. No. 3. Pp. 980–999.

[12] **Fontana M.** Lattice dynamics of the cubic-tetragonal phase transition in KNbO_3 // *Journal de Physique*. 1981. Vol. 42. No. C6. Pp. 749–751.

[13] **Tessman J.R., Kahn A., Shockley W.** Electronic polarizabilities of ions in crystals // *Phys. Rev.* 1953. Vol. 92. No. 4. Pp. 890–895.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БУРКОВСКИЙ Роман Георгиевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
roman.burkovsky@gmail.com

АНДРОНИКОВА Дарья Александровна — инженер кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
andronikova.daria@gmail.com

БРОНВАЛЬД Юрий Алексеевич — аспирант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
yuramel@gmail.com

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
filimonov@rphf.spbstu.ru

ВАХРУШЕВ Сергей Борисович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры нейтронной и синхротронной физики Санкт-Петербургского государственного университета, заведующий лабораторией Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru



*П.Ю. Ванина¹, А.А. Набережнов^{1,2},
В.И. Нижанковский³, Р.Ф. Мамин⁴*

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет
Петра Великого, Российская Федерация;

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Российская Федерация;

³ Международная лаборатория сильных магнитных полей
и низких температур, г. Вроцлав, Польша;

⁴ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского
Казанского научного центра РАН, Российская Федерация

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ЛАНТАН-СТРОНЦИЕВЫХ МАНГАНИТОВ

Получены температурные зависимости намагниченности $M(T)$ для мультиферроиков – монокристаллов лантан-стронциевых манганитов $\text{La}_{0,875}\text{Sr}_{0,125}\text{MnO}_3$ (LSMO-0,125) и $\text{La}_{0,93}\text{Sr}_{0,07}\text{MnO}_3$ (LSMO-0,07). Определена температура фазового перехода для LSMO-0,07 ($T_C = 125,8$ (1,5) К), а также температуры двух фазовых переходов ($T_{C1} = 181,2$ (1,5) К и $T_{C2} = 157,6$ (1,5) К) для LSMO-0,125. Показано, что фазовые переходы (ФП) при T_C и T_{C1} являются ФП второго рода, а ФП при T_{C2} – первого рода. Из зависимостей $M(T)$ определены значения магнитных моментов: $\mu_1 = 2,47(1)$ μ_B/Mn и $\mu_2 = 2,82(1)$ μ_B/Mn для LSMO-0,125 и LSMO-0,07 соответственно.

ЛАНТАН-СТРОНЦИЕВЫЙ МАНГАНИТ, МУЛЬТИФЕРРОИК, ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД, МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ, НАМАГНИЧЕННОСТЬ.

Введение

В конце XX века была обнаружена очень интересная корреляция между индуцированной легированием электропроводностью и ферромагнетизмом для первоначально диэлектрических марганецсодержащих перовскитов LaMnO_3 , так называемых манганитов, в которых редкоземельный металл замещался щелочноземельным. Исходные трехкомпонентные композиты LaMnO_3 и AMnO_3 , где $A = \text{Ca}, \text{Sr}$ или Ba , представляют собой антиферромагнетики, у которых магнитные моменты локализованы на узлах, занимаемых ионами марганца. В случае же четырехкомпонентной стехиометрии вида $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ с промежуточными составами (с различными значениями x) композит становится не только сильным ферромагнетиком, но и проявляет проводимость металлического типа, наблюдаемую ниже

температуры Кюри [1]. Кроме того, данное соединение является материалом с чрезвычайно высокими значениями диэлектрической проницаемости (до 10^7) и магнетостатического эффекта (до 10^5 %), причем уже при комнатной температуре [2].

Структура кубического перовскита LaMnO_3 представляет собой трехмерный каркас, состоящий из правильных октаэдров MnO_6 , объединенных кислородными вершинами [3, 4]. В данной структуре La^{3+} , больший по размеру катион, расположен в центре куба, образованного кислородными октаэдрами, а меньший по размеру Mn^{3+} находится в центре октаэдра. С другой стороны, структура $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ с ростом содержания катиона стронция изменяется от орторомбической до ромбоэдрической [5], а в промежуточной области концентраций (при $x = 0,10 - 0,15$) наблюдается необыч-

ное поляронно-упорядоченное состояние. Данное состояние, согласно нейтронографическим данным [6], связано с упорядоченным расположением разновалентных ионов Mn^{3+}/Mn^{4+} в чередующихся плоскостях (001) и возникновением соответствующей сверхструктуры.

Структура $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ (LSMO- x) далека от кубического перовскита. Согласно работе [7], данная структура имеет два типа искажений, которые обусловлены

несоответствием размеров катионов размерам соответствующего свободного пространства (первый тип);

эффектом Яна-Теллера (ЯТ) (второй тип) [4, 8].

Эффект ЯТ заключается в уменьшении энергии подобной вырожденной системы ввиду понижения симметрии, снимающей вырождение с электронных уровней.

В соответствии с предположением автора работы [7], второй тип искажений вызван тем, что ион Mn^{3+} в кубическом кристаллическом поле вырожден по d -орбиталям, т. е. такое поле расщепляет атомный d -уровень на двух- и трехкратно вырожденные уровни e_g и t_{2g} . Поскольку первый уровень лежит выше второго, уровень t_{2g} занимается полностью четырьмя электронами d -уровня Mn^{3+} , а уровень e_g оказывается заполненным лишь частично.

Лантан-стронциевый манганит претерпевает два структурных перехода, однако данные о них сильно различаются. Согласно результатам, полученным авторами работ [5, 9, 10], в LSMO-0,125 высокотемпературный структурный переход происходит при $T = 270$ К из одной орторомбической структуры в другую с появлением кооперативных искажений второго типа. При дальнейшем понижении температуры при $T = 150$ К происходит обратный переход к первоначальной структуре с подавлением данных искажений. В то же время из результатов работ [6, 11, 12] следует, что первый переход происходит из орторомбической фазы ($Pbnm$) в моноклинную ($P2_1/c$); а второй — из моноклинной в триклинную ($P1$) [13]. Так например, в высокотемпературной парамагнитной фазе, согласно данным работы [14], LSMO-0,125 принадлежит

орторомбической пространственной группе $Pnma$ и имеет параметры $a = 5,5624(6)$ Å, $b = 7,7360(6)$ Å, $c = 5,5478(6)$ Å, а по результатам работы [15] данная фаза в LSMO-0,2 принадлежит к ромбоэдрической пространственной группе $R\bar{3}c$ и имеет следующие параметры ячейки: $a \approx 5,5$ Å, $c \approx 1,34$ Å, $\gamma = 120^\circ$.

Кристаллы $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ стали модельным объектом для исследований колоссального магнитосопротивления [16], которое часто связывают с зарядовым и фазовым разделением и перколяцией нанообластей, имеющих металлический тип проводимости [17]. Было предсказано, что эти неоднородные состояния могут появляться даже выше температуры Кюри [17].

Наличие необычных магнетоемкостных свойств открывает возможности практического использования манганитов такого типа. Например, в работе [2] авторы предложили для достижения высоких значений диэлектрической проницаемости и магнетоемкостного эффекта воздействовать на свойства зарядовых неоднородностей в допированных манганитах LSMO- x . Были обнаружены чрезвычайно высокие значения диэлектрической проницаемости (до 10^7 в частотном интервале 0,1 – 1 кГц) и магнетоемкостного эффекта (до 10^5 %), причем уже при комнатной температуре. Авторы [2] предполагают, что это может быть следствием сильного взаимодействия между зарядовыми, спиновыми и решеточными степенями свободы, приводящего к зарядовому и фазовому разделению в режиме перед порогом перколяции [17].

Несмотря на обширные исследования в данной области, микроскопическое происхождение подобного поведения до сих пор не найдено. Одной из наиболее успешных попыток можно считать исследование, выполненное авторами [5], в котором была построена полная фазовая диаграмма $T - x$ для LSMO- x с концентрацией x от 0 до 0,45 и в широком диапазоне температур (4,2 – 1050 К), а также проведены детальные исследования электрических и магнитных свойств монокристаллов LSMO- x в указанном диапазоне концентраций. Температурные исследования свойств LSMO-0,07



и LSMO-0,125 [5] показали, что данные соединения претерпевают разнообразные магнитные и структурные превращения, в число которых входят появление антиферромагнитного и ферромагнитного упорядочения, структурные переходы между сильно- и слабо-искаженной орторомбическими фазами, переход в ромбоэдрическую фазу, а также переход в состояние поляронного упорядочения. Согласно [6], поляронная фаза представляет собой такое упорядоченное расположение ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} , при котором один из двух чередующихся атомных слоев плоскости (001) содержит только ионы Mn^{3+} , как в чистом LMO, а другой — оба типа ионов, т. е. дырки [5].

Тем не менее остаются неясными температуры данных переходов, магнитные моменты материалов, род фазовых переходов (ФП), а также практический эффект приложения сильного магнитного поля.

Целью данной работы было получение информации о температурной эволюции магнитных свойств составов LSMO-0,07 и LSMO-0,125 в области температур 4 – 240 К, т. е. именно там, где и наблюдаются необычные макроскопические свойства этих материалов.

Экспериментальная часть

Исследования проводились на вибрационном магнетометре в Международной лаборатории сильных магнитных полей и низких температур (International Laboratory of High Magnetic Fields and Low Temperatures), г. Вроцлав, Польша. Вес монокристаллических образцов составил 121,95 мг для LSMO-0,125 и 152,8 мг для LSMO-0,07 соответственно. Магнитное поле прикладывалось вдоль оси c ; измерительное поле составляло 0,2 Тл. Температурные зависимости намагниченности образцов были получены в температурном интервале 4 – 240 К.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1, *a* представлена температурная зависимость намагниченности для образца LSMO-0,07 при охлаждении. Нетрудно заметить, что кривая изменяет свой характер в районе температуры 130 К, что, согласно фазовой диаграмме, полученной в работе

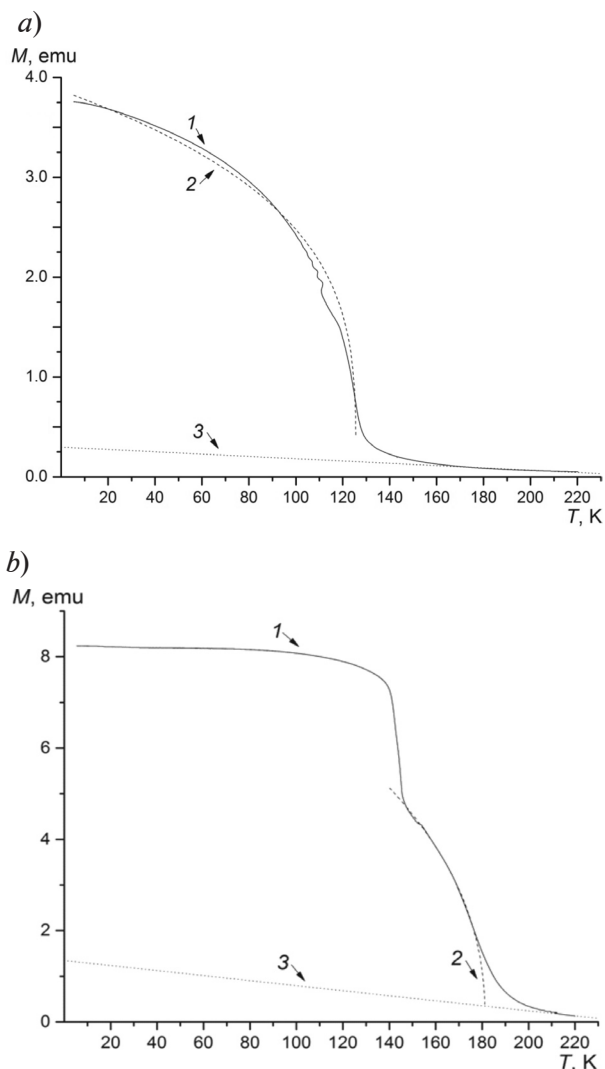


Рис. 1. Экспериментальные температурные зависимости намагниченности для образцов составов LSMO-0,07 (*a*) и LSMO-0,125 (*b*) при охлаждении (1) и их аппроксимации в высокотемпературной (2) и низкотемпературной (3) областях

[5], соответствует точке магнитного ФП из высокотемпературной парамагнитной фазы в низкотемпературную неколлинеарную, с появлением спонтанной и остаточной намагниченности. Это свидетельствует о том, что магнитная структура является не чисто антиферромагнитной, а слабоферромагнитной [5].

В таком случае представим температурную зависимость намагниченности $M(T)$ в виде следующей степенной функции:

$$(T_C - T)^\beta, \quad (1)$$

где T_C – температура фазового перехода, β – критический индекс.

Из анализа данных на рис. 1, *a* следует, что такое описание (кривая 2) достаточно хорошо совпадает с экспериментальной кривой. Для параметров функции (1) были получены следующие значения: $T_C = 125,8(1,5)$ К, $\beta = 0,280(8)$. Температуру ФП мы также определяли, используя следующую процедуру: зависимость $M(T)$ в парамагнитной фазе аппроксимировали прямой в область низких температур (прямая 3 на рис. 1, *a*) и находили точку пересечения с аппроксимирующей кривой (см. формулу (1)). Полученное значение температуры в пределах $\pm 0,5$ К совпало со значением T_C , приведенным выше.

На рис. 1, *b* представлена температурная зависимость намагниченности $M(T)$ для образца LSMO-0,125 при охлаждении. Хорошо видно, что на кривой наблюдаются две аномалии: первая – около 180 К, вторая – вблизи 157 К, причем ниже этой температуры функция $M(T)$ резко возрастает, а затем в области ниже 100 К практически не изменяется. Таким образом, можно заключить, что в образце LSMO-0,125 наблюдаются два магнитных фазовых перехода. В области температур 150 – 190 К зависимость $M(T)$ была также аппроксимирована функцией (1) и получены следующие параметры: $T_{C1} = 181,2(1,5)$ К и $\beta_1 = 0,440(13)$, что достаточно близко к значению критического индекса 0,5 для теории среднего поля. Величина T_{C1} , полученная из точки пересечения прямой 3 (линейная аппроксимация $M(T)$ парамагнитной фазы в область низких температур) и кривой 2 (степенная зависимость намагниченности с параметрами T_{C1} и β_1), аналогично случаю с образцом LSMO-0,07, оказалась близка (с большей точностью, чем 0,5 К) к величине $T_{C1} = 181,2$ К, определенной из формулы (1). Это значение температуры хорошо согласуется с результатом, полученным в работе [5].

Второй ФП мы аппроксимировали ступенчатой функцией с $T_{C2} = 157,6$ (1,5) К. По-видимому, этот переход соответствует переходу в поляронную фазу или фазу по-

ляронного упорядочения [5, 6].

Таким образом, исходя из характера температурных зависимостей $M(T)$ и значений критических индексов, полученных для образцов LSMO-0,07 и LSMO-0,125, можно предположить, что в первом образце ФП при 125,8 К и во втором при 181,2 К являются фазовыми переходами второго рода, а ФП во втором образце (LSMO-0,125) при 157,6 К – фазовым переходом первого рода.

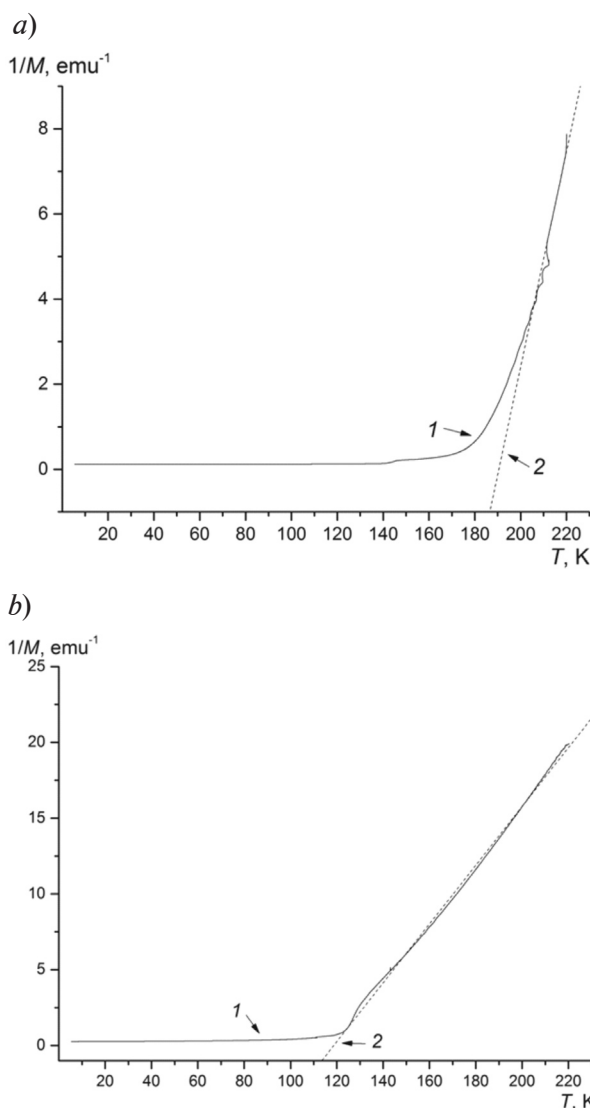


Рис. 2. Экспериментальные температурные зависимости обратной намагниченности ($1/M$) для образцов LSMO-0,0125 (*a*) и LSMO-0,07 (*b*) и их аппроксимации в высокотемпературной области (2)



На заключительном этапе работы нами были построены температурные зависимости обратной намагниченности $1/M$ для обоих образцов (рис. 2), из наклона которых в парамагнитной фазе (высокотемпературные области) мы оценивали величины магнитных моментов ионов марганца в обоих образцах.

Для оценки величин магнитных моментов в обоих составах была использована следующая формула:

$$\frac{1}{M} = \frac{k_B T}{N \mu^2 B}, \quad (2)$$

где μ (в магнетонах Бора μ_B) — магнитный момент; M — намагниченность; B , Э — приложенное измерительное магнитное поле; k_B — постоянная Больцмана, N — количество магнитных атомов в единице объема.

На экспериментальных кривых 1 в области высоких температур были определены наклоны зависимостей $M^{-1}(T)$ (прямые 2 на рис. 2), и после подстановки в формулу (2) были вычислены значения магнитных моментов для обоих соединений. Они оказались следующими: $\mu_1 = 2,47(1) \mu_B/\text{Mn}$ и $\mu_2 = 2,82(1) \mu_B/\text{Mn}$ для LSMO-0,125 и LSMO-0,07 соответственно.

Заключение

Исследована температурная эволюция намагниченности в монокристаллах составов $\text{La}_{0,875}\text{Sr}_{0,125}\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{0,93}\text{Sr}_{0,07}\text{MnO}_3$ и показано, что в LSMO-0,07 наблюдается один магнитный ФП при $T_C = 125,8(1,5) \text{ K}$, а в LSMO-0,125 — два магнитных ФП при $T_{C1} = 181,2(1,5) \text{ K}$ и $T_{C2} = 157,6(1,5) \text{ K}$.

Найдены значения критических индексов $\beta = 0,280(8)$ для $\text{La}_{0,93}\text{Sr}_{0,07}\text{MnO}_3$ и $\beta_1 = 0,440(13)$ для $\text{La}_{0,875}\text{Sr}_{0,125}\text{MnO}_3$.

На основе полученных экспериментальных данных и значений критических индексов сделано заключение, что ФП при температурах T_C и T_{C1} относятся к фазовым переходам второго рода, а ФП в LSMO-0,125 при T_{C2} является фазовым переходом первого рода.

Получены оценки магнитных моментов, которые имеют следующие значения: $\mu_1 = 2,47(1) \mu_B/\text{Mn}$ и $\mu_2 = 2,82(1) \mu_B/\text{Mn}$ для LSMO-0,125 и LSMO-0,07 соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-22-00136 «Структура и свойства самоорганизованных и композитных мезоструктурированных сегнето- и пьезоэлектриков и мультифункциональных материалов»).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Локтев В.М., Погорелов Ю.М. Особенности физических свойств и колоссальное магнитосопротивление манганитов // Физика низких температур. 2000. Т. 26. Вып. 3. С. 231–261.
- [2] Мамин Р.Ф., Игами Т., Мартон Ж. и др. Гигантская диэлектрическая восприимчивость и магнитоемкостный эффект в манганитах при комнатной температуре // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 86. Вып. 10. С. 731–735.
- [3] Wollan E.O., Koehler W.C. Neutron diffraction study of the magnetic properties of the series of perovskite-type compounds $[(1-x)\text{La}, x\text{Ca}]\text{MnO}_3$ // Phys. Rev. 1955. Vol. 100. No. 2. Pp. 545–563.
- [4] Фесенко Е.Г. Семейство перовскита и сегнетоэлектричество. М.: Атомиздат, 1972. 248 с.
- [5] Мухин А.А., Иванов В.Ю., Травкин В.Д. и др. Магнитные и структурные переходы в $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$: фазовая $T-x$ диаграмма // Письма в ЖЭТФ. 1998. Т. 68. Вып. 4. С. 331–336.
- [6] Yamada Y., Himo O., Nohdo S., et al. Polaron ordering in low-doping $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 77. No. 5. Pp. 904–907.
- [7] Нагаев Э.Л. Манганиты лантана и другие магнитные проводники с гигантским магнитным сопротивлением // Успехи физических наук. 1996. Т. 166. № 8. С. 833–858.
- [8] Кугель К.И., Хомский Д.И. Эффект Яна – Теллера и магнетизм: соединения переходных металлов // Успехи физических наук. 1982. Т. 136. № 4. С. 621–664.
- [9] Kawano H., Kajimoto R., Kubota M., et al. Ferromagnetism-induced reentrant structural transition and phase diagram of the lightly doped insulator $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.17$) // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. No. 22. Pp. R14709–R14713.
- [10] Nojiri H., Keneko K., Motokawa M., et al. Two ferromagnetic phases in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x \sim 1/8$) // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. No. 6. Pp. R4142–R4148.
- [11] Geck J., Wochner P., Bruns D., et al. Rearrangement of the orbital-ordered state at the metal insulator transition $\text{La}_{7/8}\text{Sr}_{1/8}\text{MnO}_3$ // Phys.

Rev. B. 2004. Vol. 69. No. 10. P. 104413.

[12] Cox D.E., Iglesias T., Moshopoulou E. Vertical boundary at $x \approx 0.11$ in the structural phase diagram of the $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ system ($0.08 \leq x \leq 0.125$) // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 64. No. 2. P. 024431.

[13] Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А. и др. Высокочастотные ультразвуковые исследования структурного фазового перехода в монокристалле $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$ // Физика твердого тела. 2007. Т. 49. Вып.3. С. 496–498.

[14] Li H.-F., Su Y., Xiao Y.G., et al. Crystal and magnetic structure of single crystal $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$

($x \approx 1/8$) // Europ. Phys. J. B. 2009. Vol. 67. No. 2. Pp. 149–157.

[15] Monot-Lafez I., Dominiczak M., Giovannelli F., et al. Correlation between structural defects and properties in large La-Sr-Mn-O single crystals // J. Appl. Phys. 2007. Vol. 101. No. 5. P. 053502.

[16] Ivanov V.Yu., Travkin V.D., Mukhin A.A., et al. Magnetic, dielectric, and transport properties of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ at submillimeter wavelengths // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 83. No. 11. Pp. 7180–7182.

[17] Dagotto E., Hotta T., Moreo A. Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation // Phys. Rep. 2001. Vol. 344. No. 1–3. Pp. 1–153.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВАНИНА Полина Юрьевна — инженер кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
p.yu.vanina@gmail.com

НАБЕРЕЖНОВ Александр Алексеевич — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории нейтронных исследований Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН и старший научный сотрудник кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Российская Федерация. 194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
alex.naberezhnov@mail.ioffe.ru

НИЖАНКОВСКИЙ Виктор Игнатьевич — научный сотрудник Международной лаборатории сильных магнитных полей и высоких температур, г. Вроцлав, Польша. 53-421, Poland, Wroclaw, Gajowicka, 95
nizhan@ml.pan.wroc.pl

МАМИН Ринат Файзрахманович — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физики перспективных материалов Казанского физико-технического института им. Е.К. Завойского Казанского научного центра РАН, г. Казань, Российская Федерация. 420029, Российская Федерация, г. Казань, Сибирский тракт ул., 10/7
mamin@kfti.knc.ru

Vanina P.Yu., Naberezhnov A.A., Nizhankovskii V.I., Mamin R.F. TEMPERATURE EVOLUTION OF LANTHANUM-STRONTIUM MANGANITES MAGNETIC PROPERTIES.

The temperature dependences of the magnetization $M(T)$ for multiferroic single crystal lanthanum-strontium manganites $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$ (LSMO-0.125) and $\text{La}_{0.93}\text{Sr}_{0.07}\text{MnO}_3$ (LSMO-0.07) have been obtained. It was shown that the phase transitions (PT) in LSMO-0.07 at $T_c = 125.8(1.5)$ K and in LSMO-0.125 at $T_{c1} = 181.2(1.5)$ belonged to the second order type. The phase transition in LSMO-0.125 at $T_{c2} = 157.6(1.5)$ K is the first order PT. From the $M^{-1}(T)$ curves the values of the magnetic moments were determined. They were equal to $\mu_1 = 2.47(1) \mu_B/\text{Mn}$ and $\mu_2 = 2.82(1) \mu_B/\text{Mn}$ for LSMO-0.125 and LSMO-0.07 respectively.

LANTHANUM-STRONTIUM MANGANITE, MULTIFERROIC, PHASE TRANSITION, MAGNETIC MOMENT, MAGNETIZATION.



REFERENCES

- [1] V.M. Loktev, Yu.G. Pogorelov, Peculiar physical properties and the colossal magnetoresistance of manganites (Review), *Low Temperature Physics*. 26 (3) (2000) 171–193.
- [2] R.F. Mamin, T. Igami, G. Marton, et. al., Giant dielectric susceptibility and magnetocapacitance effect in manganites at room temperature, *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. 2007. 86 (10) (2008) 643–646.
- [3] E.O. Wollan, W.C. Koehler, Neutron diffraction study of the magnetic properties of the series of perovskite-type compounds $[(1-x)\text{La}(x)\text{Ca}]\text{MnO}_3$, *Phys. Rev.* 100 (2) (1955) Pp. 545–563.
- [4] E.G. Fesenko, [The family of perovskite and ferroelectricity], Moscow, Atomizdat, 1972.
- [5] A.A. Mukhin, V.Yu. Ivanov, V.D. Travkin, et. al., Magnetic and structural transitions in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$: Phase $T - x$ diagram, *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. 68(4) (1998) 356–362.
- [6] Y. Yamada, O. Himo, S. Nohdo, et al., Polaron ordering in low-doping $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$, *Phys. Rev. Lett.* 77 (5) (1996) 904–907.
- [7] E.L. Nagaev, Lanthanum manganite and other magnetic conductors with a giant magnetic resistance, *UFN*. 166 (8) (1996) 833–858.
- [8] K.I. Kugel', D.I. Homskii, The Jahn-Teller effect and magnetism: transition metal compounds, *Physics-Uspokhi*. 25 (1982) 231–256.
- [9] H. Kawano, R. Kajimoto, M. Kubota, et al., Ferromagnetism-induced reentrant structural transition and phase diagram of the lightly doped insulator $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.17$), *Phys. Rev. B*. 53(22) (1996) R14709–R14713.
- [10] H. Nojiri, K. Keneko, M. Motokawa, et al., Two ferromagnetic phases in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x \sim 1/8$), *Phys. Rev. B*. 60 (6) (1999) Pp. 4142–4148.
- [11] J. Geck, P. Wochner, D. Bruns, et al., Rearrangement of the orbital-ordered state at the metal insulator transition $\text{La}_{7/8}\text{Sr}_{1/8}\text{MnO}_3$, *Phys. Rev. B*. 69 (10) (2004) 104413.
- [12] D.E. Cox, T. Iglesias, E. Moshopoulou, Vertical boundary at $x \approx 0.11$ in the structural phase diagram of the $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ system ($0.08 \leq x \leq 0.125$), *Phys. Rev. B*. 64 (2) (2001) 024431.
- [13] Kh.G. Bogdanova, A.R. Bulatov, V.A. Golenischev-Kutuzov, et. al., High-frequency ultrasound structural phase transition in a single crystal $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$, *Physics of the Solid State*. 49 (3) (2007) 519–522.
- [14] H.-F. Li, Y. Su, Y.G. Xiao, et al., Crystal and magnetic structure of single crystal $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x \approx 1/8$), *The European Physical Journal B*. 2009. 67(2) (2009) 149–157.
- [15] I. Monot-Lafez, M. Dominiczak, F. Giovannelli, et al., Correlation between structural defects and properties in large La-Sr-Mn-O single crystals, *Journal of Applied Physics*. 101 (5) (2007) 053502.
- [16] V.Yu. Ivanov, V.D. Travkin, A.A. Mukhin, et al., Magnetic, dielectric, and transport properties of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ at submillimeter wavelengths, *Journal of Applied Physics*. 83 (11) (1998) 7180–7182.
- [17] E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo, Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation, *Phys. Rep.* 344 (1–3) (2001) 1–153.

THE AUTHORS

VANINA Polina Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

p.yu.vanina@gmail.com

NABEREZHNOV Aleksandr A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences

26, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

NIZHANKOVSKII Viktor I.

International Laboratory of High Magnetic Fields and Low Temperatures

95, Gajowicka, Wroclaw, 53-421, Poland

nizhan@ml.pan.wroc.pl

MAMIN Rinat F.

Kazan E.K. Zavoisky Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences

10/7, Sibirsky tract, Kazan, 420029, Russian Federation

mamin@kfti.knc.ru



DOI: 10.5862/JPM.248.3

УДК: 538.911

*А.А. Набережнов^{1,2}, И.А. Долгаков²,
М. Товар³, О.А. Алексеева², С.Б. Вахрушев^{1,4}*

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
г. Санкт-Петербург, Российская Федерация;

²Санкт-Петербургский политехнический университет
Петра Великого, Российская Федерация;

³Берлинский центр материалов и энергии
им. Гельмгольца, Германия

⁴Санкт-Петербургский государственный университет,
Российская Федерация

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ФАЗЫ МУЛЬТИФЕРРОИДНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ PFW-PT

Методом дифракции нейтронов исследована температурная эволюция кристаллической структуры твердых растворов системы PFW-PT, а именно — $(1-x)\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3)-(x)\text{PbTiO}_3$, где $x = 0; 0,2$ и $0,3$. Такая система обладает мультиферроидными свойствами. Установлено, что образцы составов, у которых $x = 0,2$ и $0,3$, при температурах ниже 259 и 285 К соответственно, находятся в двухфазном состоянии (тетрагональная + кубическая фазы). Найдена температурная зависимость параметра решетки и оценены величины статических смещений ионов свинца из основной позиции (000). Получены данные, что увеличение концентрации PbTiO_3 (PT) приводит к снижению величин этих смещений.

МУЛЬТИФЕРРОИК, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА, ДИФРАКЦИЯ НЕЙТРОНОВ, МОРФОТРОПНАЯ ФАЗОВАЯ ГРАНИЦА, СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК-РЕЛАКСОР.

Введение

Материалы, обладающие сегнетоэлектрическим и магнитным порядками одновременно, особенно при комнатной температуре, вызывают в последние годы несомненный интерес исследователей. Дело в том, что связь между электрической и магнитной подсистемами в этих материалах проявляется в виде магнитоэлектрических эффектов. Это дает возможность с помощью электрического поля управлять магнитными свойствами и, наоборот, осуществлять модуляцию электрических свойств магнитным полем. Сосуществование сегнетоэлектрических и магнитных свойств в однофазных материалах и возможная связь двух параметров порядка приводят к появлению дополнительной степени свободы при создании различных устройств. Приме-

рами могут служить приборы для модуляции амплитуд, поляризации и фаз оптических волн, оптические диоды, генераторы спиновых волн, приборы для преобразования частот. Кроме того, оказывается возможным использование магнитоэлектрического взаимодействия для переключения (модуляции) электрической поляризации магнитным полем.

Твердый раствор вида $\text{PbFe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3$ (сокращенно PFW) является сегнетоэлектриком-релаксором со структурой перовскита $\text{Pb}(\text{B}'_{1-x}\text{B}''_x)\text{O}_3$ с неизо валентным замещением ионов в позиции В. Впервые синтез PFW и его рентгеноструктурный анализ были проведены в работе [1]. Там же для этого соединения была определена температура Кюри (183 К), а также высказано предположение о наличии антифер-

ромагнитных свойств (наряду с сегнетоэлектрическими), связанных с присутствием ионов Fe^{3+} . Позднее в работах [2, 3] было установлено, что в PFW при температурах ниже 363 К (точка Нееля) возникает дальний антиферромагнитный порядок.

Существование релаксорных свойств у PFW, т. е. зависимость температуры максимума диэлектрической проницаемости ε от частоты и наличие частотной дисперсии $\varepsilon(\omega, T)$ ниже температуры максимума ε , было доказано в работе [4]. В работе [5] было показано, что при добавлении к PFW сегнетоэлектрика PbTiO_3 (PT) можно получить непрерывный ряд твердых растворов $(1-x)\text{PFW}-(x)\text{PT}$. На основе проведенных исследований была построена фазовая диаграмма, из которой следовало, что с увеличением концентрации PT температура Нееля снижается, а температура Кюри растет. На этой диаграмме также присутствовала область, где PFW-PT находился в сегнетоэлектрическом и антиферромагнитном состояниях одновременно.

Рентгеноструктурный анализ рассматриваемых твердых растворов впервые был проведен в работе [4] при комнатной температуре для значений $x = 0; 0,10; 0,20; 0,25; 0,30; 0,325; 0,35; 0,40; 0,60$ и $0,80$. Анализ дифрактограмм показал, что при $0 < x < 0,25$ образец находится в кубической фазе. Результаты диэлектрической спектроскопии, полученные в работе [4], показывают, что в координатах (x, T) в окрестности точек $(0; 190)$ и $(0,1; 220)$, где происходит переход из кубической фазы в псевдокубическую (рис. 1), наблюдаются типичные для релаксора свойства, такие как частотная дисперсия пика диэлектрической проницаемости и невыполнение закона Кюри – Вейсса. При увеличении x вдоль линии границы раздела фаз (кубической и любой другой), частотная зависимость максимума пика диэлектрической проницаемости существенно ослабевает, однако со стороны высоких температур наблюдаются заметные отклонения от закона Кюри – Вейсса. В окрестности точки $(0,6; 500)$ и выше раствор ведет себя как нормальный сегнетоэлектрик. Более детальные (в отношении концентрации титаната свинца) исследования при комнат-

ной температуре были проведены в работе [6] для твердых растворов $(1-x)\text{PFW}-(x)\text{PT}$ при $x = 0,0; 0,10; 0,15; 0,20; 0,25; 0,27; 0,30; 0,31; 0,32; 0,35; 0,37; 0,40; 0,50$ и $1,0$. При этом было показано, что в области $0,20 < x < 0,37$ наблюдается сосуществование кубической и тетрагональной фаз. Также была получена зависимость процентного содержания этих фаз от x . В работе [4] на основании данных, полученных методами дифференциальной калориметрии, и измерения диэлектрической проницаемости была построена фазовая диаграмма $(1-x)\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3)-(x)\text{PbTiO}_3$ (см. рис. 1). Хорошо видно, что с увеличением x температура перехода из кубической фазы (пространственная группа (SG) $Pm\bar{3}m$) в псевдокубическую с симметрией $R\bar{3}m$ или тетрагональную (SG $P4mm$) возрастает линейно. Псевдокубическая фаза является кубической с ромбоэдрическими искажениями менее $0,01^\circ$ [6]; именно в этой фазе проявляются релаксорные свойства данного соединения. Тетрагональная фаза является нормальной сегнетоэлектрической. Область концентраций PT $0,25 < x < 0,35$, где наблюдается сосуществование различных фаз, называется

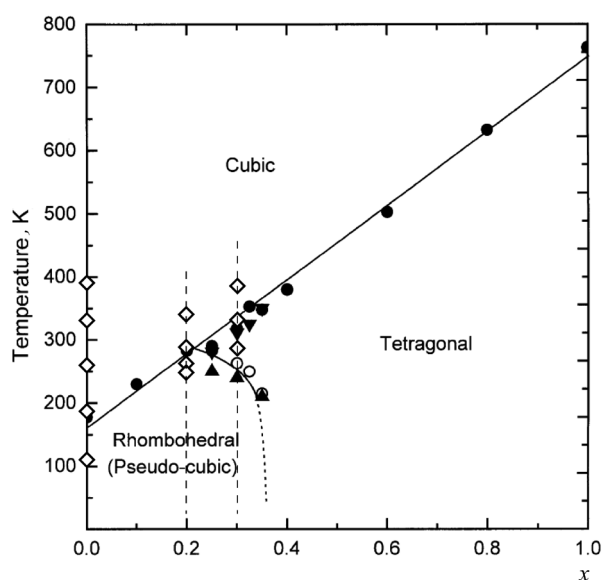


Рис. 1. Фазовая диаграмма твердых растворов $(1-x)\text{PFW}-(x)\text{PT}$ из работы [4]. Ромбами отмечены точки, в которых проводились измерения в настоящем эксперименте



ся морфотропной фазовой границей, или MPB (Morphotropic Phase Boundary). Как известно, именно в области MPB подобные соединения демонстрируют наиболее интересные макроскопические свойства, такие как большие значения диэлектрической проницаемости, пьезоотклика, электро-стрикции и т. п.

Следует отметить, что структурные исследования ранее проводились, в основном, при одной температуре для разных составов и, следовательно, зависимость процентного соотношения фаз от температуры в области MPB, а также особенности температурной эволюции структуры в этой области оставались неисследованными.

Цель данной работы — заполнить существующий пробел в структурных исследованиях. На первом этапе мы уделили особое внимание изучению особенностей температурной эволюции структуры высокотемпературной фазы твердых растворов $(1-x)\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3)-(x)\text{PbTiO}_3$ в области MPB. При этом, в отличие от предыдущих работ, сканирование фазовой диаграммы состав — температура проводилось вдоль оси температур (вертикальные пунктирные линии на рис. 1).

Образцы и методика измерений

Образцы PFW и PFW-PT были изготовлены Е.А. Дядькиной (Скрипченко) в Воронежском государственном техническом университете по стандартной керамической технологии с использованием двукратного обжига [7]. Порошки $\text{PbFe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3$ и PbTiO_3 были предварительно синтезированы при температурах 1050 и 920 К соответственно, в воздушной атмосфере в течение трех часов. Далее синтезированный материал тщательно перемалывали всухую и смешивали в нужных пропорциях. Полученная смесь порошков гранулировалась. Заключительная стадия спекания была проведена при температурах 1170 и 1200 К для $x = 0,2$ и $0,3$, соответственно, также в воздушной атмосфере в течение трех часов. Далее полученные керамические образцы перетирались в мелкодисперсные (~ 1 мкм) порошки, которые засыпались в ванадиевые цилиндрические контейнеры. Измерения

дифракционных спектров проводились на нейтронном дифрактометре высокого разрешения E9 и светосильном дифрактометре E2 (Helmholtz Zentrum Berlin (HZB), реактор BER II). Длина волны падающих нейтронов в первом случае составляла $1,79 \text{ \AA}$, а во втором — $1,21 \text{ \AA}$. Образцы в ванадиевых контейнерах размещались в криопечке, которая позволяла проводить измерения в диапазоне температур от 90 до 500 К; при этом стабильность поддержания температуры была не хуже $\pm 2 \text{ К}$. Полученные дифрактограммы обрабатывались по стандартной программе полного профильного анализа FULLPROF [8].

Результаты и их обсуждение

На первом этапе было необходимо проверить, действительно ли полученные образцы являются твердыми растворами PFW-PT, а не их механической смесью. Поскольку известно, что в высокотемпературном диапазоне (300 — 500 К) соединение $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3)$ находится в кубической фазе ($Pm\bar{3}m$), а PbTiO_3 — в тетрагональной ($P4mm$), описание дифракционных профилей в рамках модели механической смеси проводилось в двухфазном приближении. Обработка данных показала, что полученные дифрактограммы не описываются адекватно в рамках гипотезы о механической смеси исходных компонентов, в частности $R_{fr} = 76 \%$, $R_{fc} = 16 \%$, где R_{fr} и R_{fc} — R-факторы для тетрагональной и кубической фаз соответственно. В то же время использование модели твердого раствора стехиометрического состава, находящегося в кубической фазе с пространственной группой $Pm\bar{3}m$, приводило к значительному улучшению R-фактора ($R_{fc} = 3,8 \%$).

На рис. 2 представлена типичная дифрактограмма для состава (0,8)PFW-(0,2)PT, полученная при температуре 345 К. Точки отражают экспериментальные результаты, линия — аппроксимацию экспериментальных данных в рамках модели твердого раствора стехиометрического состава. Линия внизу рисунка — невязка между аппроксимацией и экспериментальными данными.

При первичном анализе температурной эволюции дифракционных картин можно

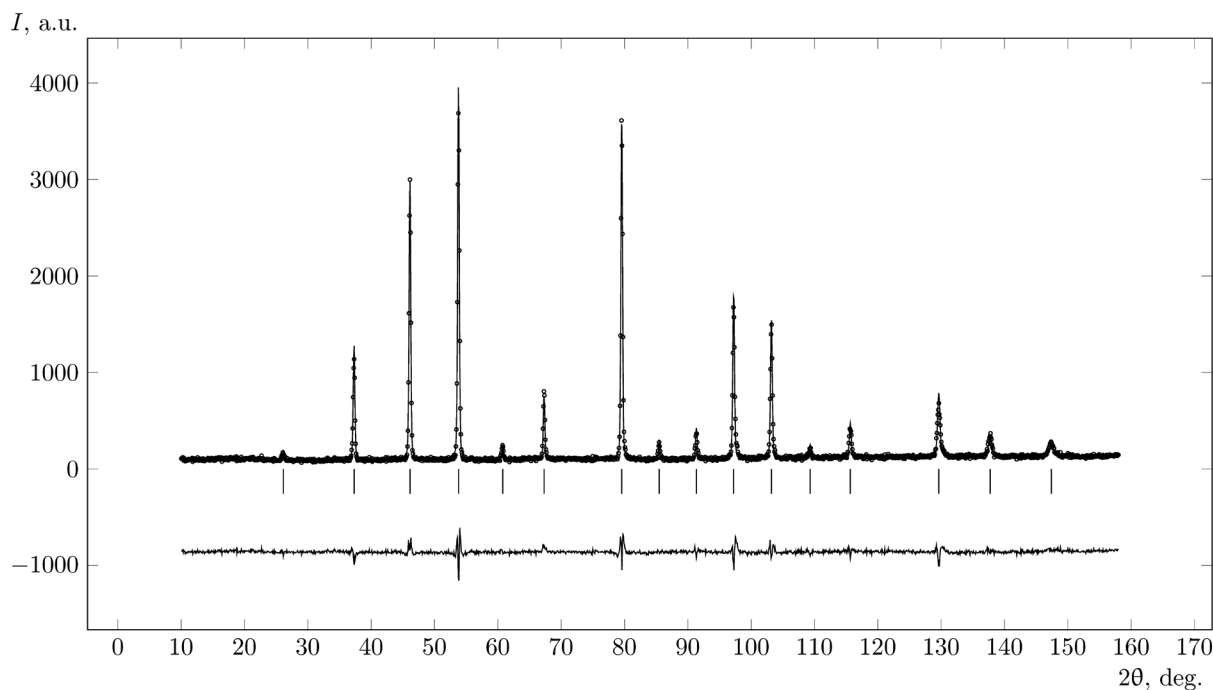


Рис. 2. Экспериментальный при $T = 345$ К (точки) и рассчитанный (линия) дифракционные спектры для (0,8)PFW-(0,2)PT.

Вертикальными штрихами отмечены позиции брэгговских рефлексов рассчитанного спектра; внизу — график невязки между аппроксимацией и экспериментальными данными

выделить две группы пиков (hkl), для которых хотя бы два индекса различны, и (hhh) с принципиально различным температурным поведением: при понижении температуры у пиков типа (hkl) наблюдается появление плеч и последующее расщепление, в то время как ширина и форма линии пиков семейства (hhh) остаются неизменными.

На рис. 3 в качестве примера приведена температурная эволюция рефлексов (310) и (222) твердого раствора состава $(1-x)$ PFW- x PT при $x = 0,2$. На этом же рисунке для сравнения приведены инструментальные профили интенсивности пиков, рассчитанные в рамках пространственной группы $Pm\bar{3}m$ без учета размерных эффектов и упругих напряжений. Пик (310) был выбран в качестве представителя группы (hkl), так как он расположен при больших значениях 2θ , и поэтому небольшие изменения структурного фактора приводят к значительным искажениям этого рефлекса. Пик (222) был выбран для сравнения как пик типа (hhh), так как он ближе всех расположен к (310). Для возможности

анализировать формы пиков, все их интенсивности были нормированы на единицу.

Анализ данных на рис. 3, *b* показывает, что форма рефлекса (222) практически не меняется и соответствует инструментальному разрешению при всех температурах. У пика (310) в правом крыле даже при высоких температурах наблюдаются небольшие отличия от инструментального разрешения, которые могут быть связаны с присутствием зародышей другой фазы. При $T = 259$ К (кривая 3 на рис. 3, *b*) появляются существенные отличия от инструментального разрешения вблизи значений 2θ , соответствующих угловым положениям рефлексов тетрагональной фазы (разложение на рефлексы от тетрагональной и кубической фаз представлено на рис. 4, *a*).

Важно отметить, что наблюдаемые эффекты искажения формы линии не могут быть связаны с напряжениями, вызванными дефектами, возникшими в процессе изготовления образца, поскольку, во-первых, исследуемые образцы отжигались, во-вторых, такие напряжения проявляли

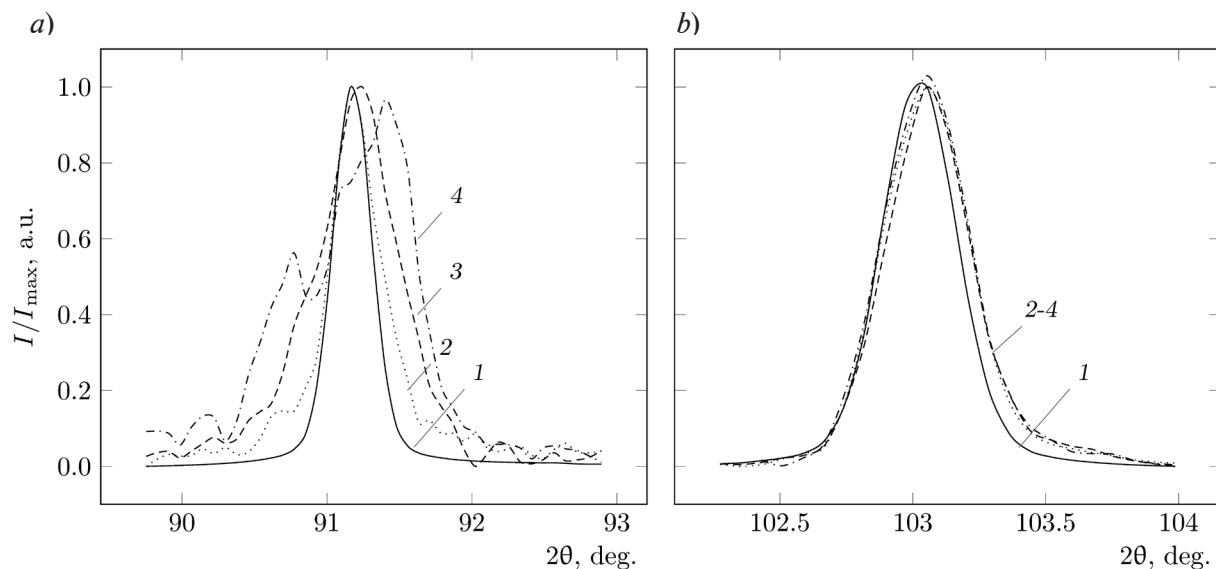


Рис. 3. Температурная эволюция пиков (310) (a) и (222) (b) дифракционного спектра твердого раствора (0,8)PFW-(0,2)PT: рассчитанные инструментальные профили (не зависят от температуры) (кривые 1); экспериментальные спектры при $T = 287$ К (2), 259 К (3), 243 К (4)

бы себя и при высоких температурах. Поэтому наиболее вероятная причина обнаруженных эффектов — именно появление тетрагональной фазы. Это объясняет и неизменность формы линии пиков (hhh) с понижением температуры, поскольку, как

известно, при переходе из кубической фазы в тетрагональную, эти пики не расщепляются.

В результате уточнения структуры, при котором учитывалось наличие двух фаз, удалось добиться уменьшения R-факторов

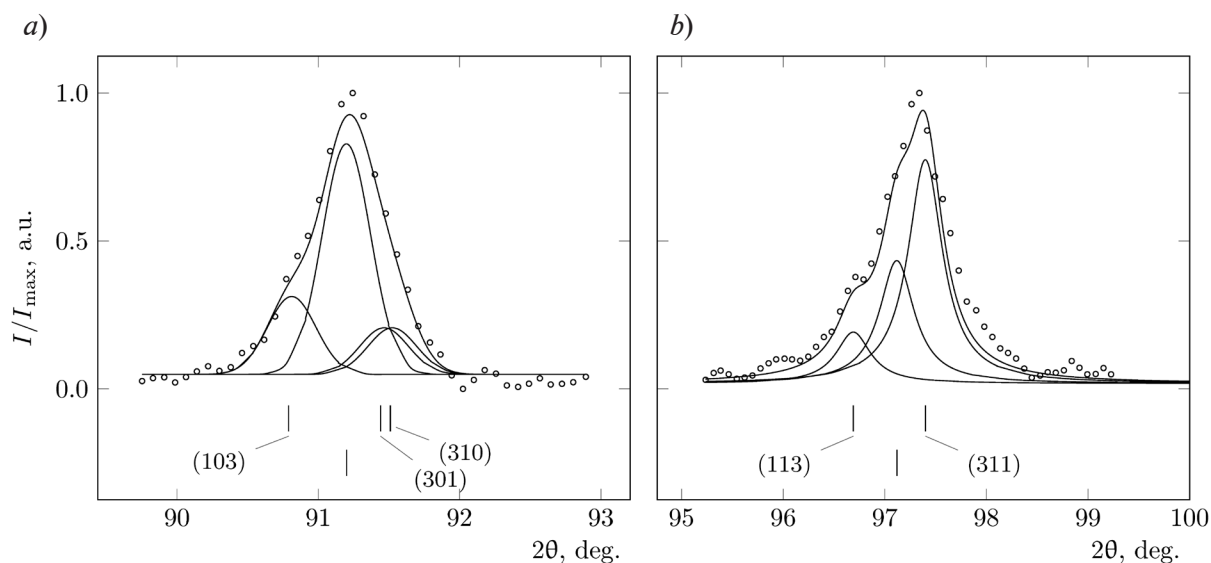


Рис. 4. Разложение пиков экспериментальных дифракционных спектров (точки) твердых растворов на вклады от кубической и тетрагональной фаз: a — пик (310) для состава (0,8)PFW-(0,2)PT; b — пик (311) для состава (0,7)PFW-(0,3)PT.

Верхними штрихами обозначены положения рефлексов тетрагональной фазы, нижними — кубической.
 $T = 259$ К (a) и 285 К (b)

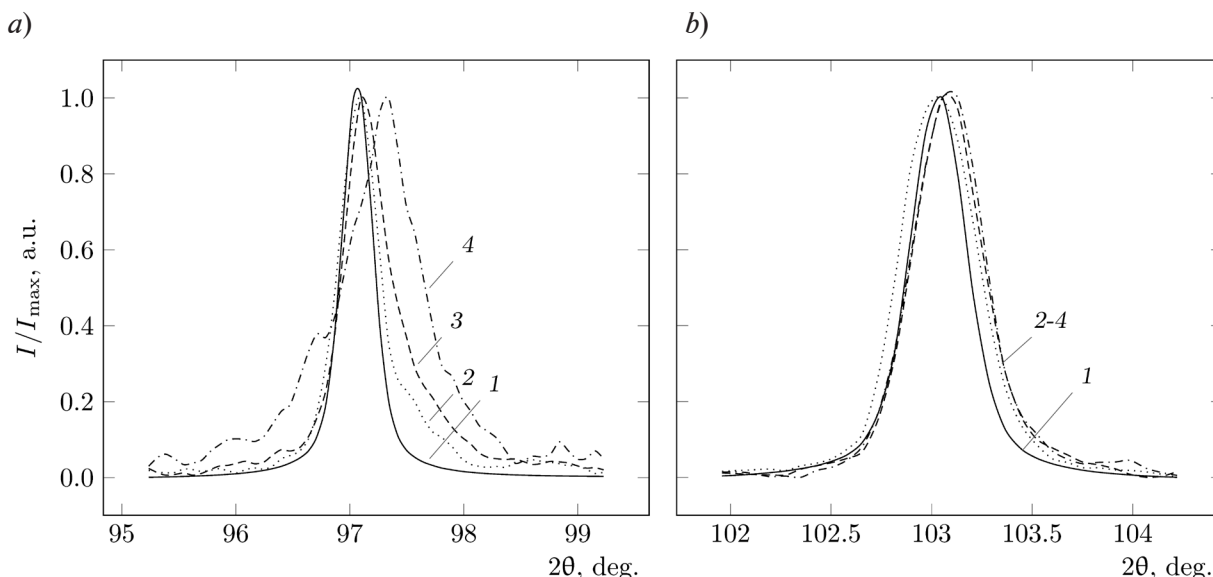


Рис. 5. Температурная эволюция пиков (311) (a) и (222) (b) дифракционного спектра твердого раствора (0,7)PFW-(0,3)PT: рассчитанный инструментальный профиль (не зависит от температуры) (кривая 1); экспериментальные спектры при $T = 395$ К (2), 335 К (3), 285 К (4)

(по сравнению с описанием в рамках кубической фазы), а также адекватно описать профиль экспериментальной дифрактограммы при $T = 259$ К. При появлении вклада от тетрагональной фазы вклад от кубической не пропадает, что говорит о сосуществовании двух фаз.

Принимая во внимание все вышеизложенное, мы можем заключить, что при $T = 259$ К образец состава при $x = 0,2$ находится в двухфазном состоянии (тетрагональная + кубическая), а начало фазового перехода находится в температурном интервале $T = 259-287$ К.

На рис. 5 приведена температурная эволюция пиков (311) и (222) для образца состава $x = 0,30$, но при более высоких температурах. Как и в случае $x = 0,2$, рефлекс (222) не меняет своей формы и практически совпадает с инструментальным разрешением (см. рис. 5, b). Пик (311) имеет отклонение от функции разрешения в форме протяженных крыльев со стороны больших углов. Эти отклонения существуют даже при высоких температурах и нарастают при охлаждении. Возможная причина таких отклонений аналогична той, что была описана для состава $x = 0,2$.

При $T = 285$ К наблюдается явное расщепление пика (311) (см. рис. 4, b), однако небольшой вклад от кубической фазы остается, что свидетельствует о переходе образца в двухфазное состояние. Дальнейший полнопрофильный анализ показал, что при этой температуре в тетрагональной фазе находится примерно 95 % общего объема образца.

На основании вышеизложенного можно заключить, что температура начала фазового перехода в твердом растворе $(1-x)$ PFW- (x) PT при $x = 0,3$ лежит в интервале $285 - 335$ К.

При температурах, соответствующих высокотемпературной кубической фазе образцов, был проведен полнопрофильный анализ дифрактограмм, в ходе которого уточнялись параметры элементарной ячейки, а также координаты атомов и тепловые факторы. Параметр кубической решетки образцов составов $x = 0,2$ и $0,3$ возрастает линейно при повышении температуры выше комнатной (рис. 6). Точка на рис. 6, a — значение параметра ячейки $a = 3,9734$ Å при комнатной температуре, взятое из работы [4].

В ходе анализа было обнаружено, что модель на основе структуры перовскита

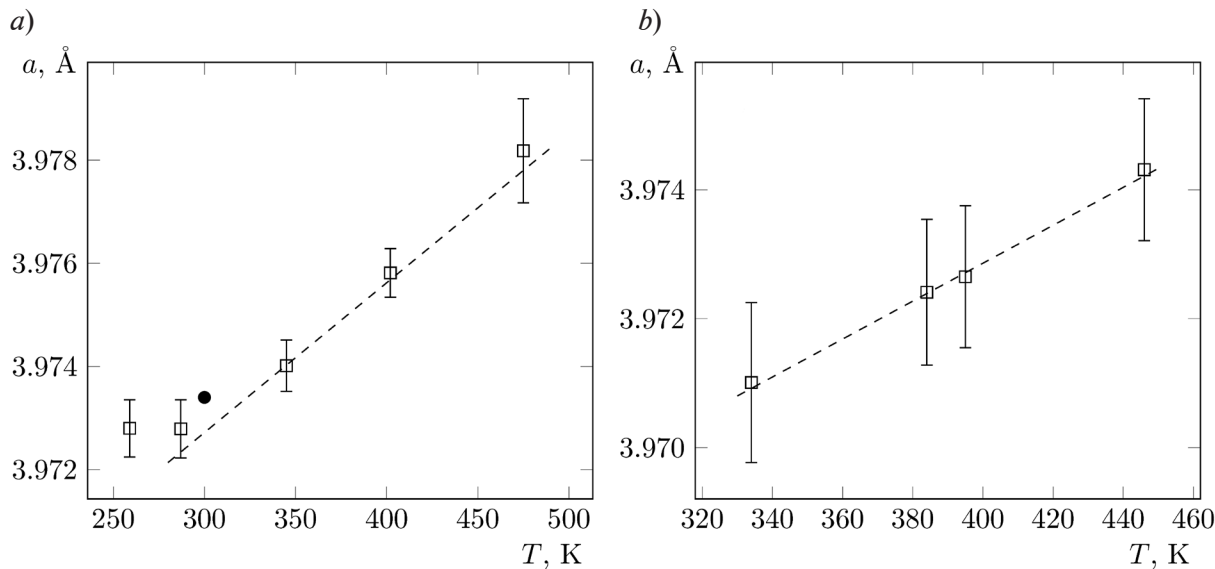


Рис. 6. Температурные зависимости параметров решеток a для твердых растворов $(1-x)\text{PFW}-(x)\text{PT}$ при $x = 0,2$ (a) и $0,3$ (b).

Точкой указано значение параметра a при комнатной температуре из работы [4]

дает аномально большие значения фактора Дебая – Валлера для свинца. Известно, что в свинецсодержащих релаксорах [9], в частности в PFW [10], ион свинца не находится в своей основной кристаллографической позиции (000). Поэтому, по аналогии с работой [10], была использована модель многоямного потенциала, согласно кото-

рой свинец равновероятно смещен из позиции (000) на фиксированное расстояние в одном из 12 эквивалентных направлений [110]. На рис. 7 и в таблице представлены величины этих статических смещений в образцах составов $x = 0,20$ и $0,30$. Видно, что смещения уменьшаются с увеличением концентрации PbTiO_3 , что соответствует переходу PFW-PT из релаксорного состояния в сегнетоэлектрическое и согласуется с данными диэлектрической спектроскопии, представленными в работе [4].

Отметим, что полученные нами значения статических смещений ионов свинца для чистого PFW хорошо согласуются с опубликованными в работе [10].

Таблица

Температурная зависимость статических смещений атомов свинца из позиции (000) в твердых растворах $(1-x)\text{PFW}-x\text{PT}$

x	$T, \text{ K}$	$\delta_{\text{Pb}}, \text{ Å}$
0,2	345	$0,105 \pm 0,002$
	287	$0,113 \pm 0,002$
	259	$0,111 \pm 0,002$
0,3	395	$0,076 \pm 0,003$
	335	$0,082 \pm 0,005$

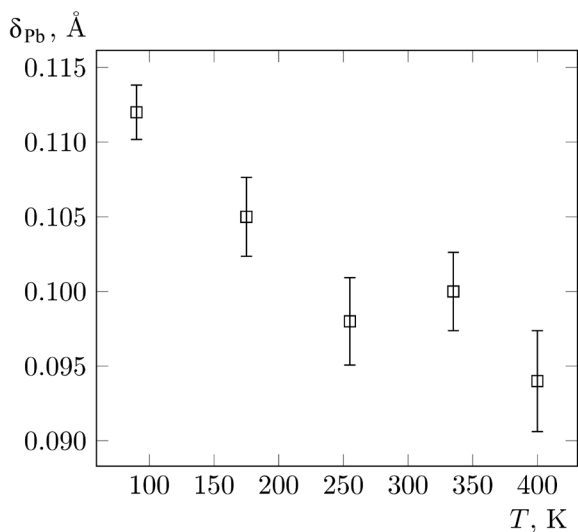


Рис. 7. Температурная зависимость статических смещений атомов свинца из позиции (000) в PFW в твердых растворах $(1-x)\text{PFW}-(x)\text{PT}$ (см. таблицу)

Заключение

В результате проведенных структурных исследований показано, что даже при высоких температурах для составов $(1-x)$ PFW- (x) PT, где $x = 0,2$ и $0,3$, наблюдаются искажения формы линии упругих отражений с индексами Миллера, отличными от (hhh) . Эти искажения, по-видимому, связаны с появлением тетрагональных искажений в высокотемпературной кубической фазе. Установлено, что при $T = 259$ и 285 К твердые растворы составов $x = 0,2$ и $0,3$ соответственно находятся в двухфазном состоянии (тетрагональная + кубическая), в котором тетрагональная фаза является доминирующей.

Получена температурная зависимость параметра решетки твердых растворов для значений $x = 0; 0,2$ и $0,3$, а также показано,

что модель многоямного потенциала для ионов свинца позволяет адекватно описать экспериментальные данные не только для чистого PFW, но и для твердых растворов $(1-x)$ PFW- x PT составов $x = 0,2$ и $0,3$, а полученные в результате использования этой модели значения смещений свинца δ_{Pb} составили примерно $0,1$ Å.

Обнаружено, что при увеличении концентрации титаната свинца, величина статических смещений уменьшается.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-22-00136 «Структура и свойства самоорганизованных и композитных мезоструктурированных сегнето- и пьезоэлектриков и мультифункциональных материалов»). Авторы также благодарят HZB за предоставление времени на нейтронном дифрактометре E9.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Смоленский Г.А., Аграновская А.И., Исупов В.И. Новые сегнетоэлектрики сложного состава. III. Pb_2MgWO_6 , $Pb_3Fe_2WO_9$ и Pb_2FeTaO_6 // ФТТ. 1959. Т. 1. № 1, С. 990–992.
- [2] Боков В.А., Мыльникова И.Е., Смоленский Г.А. Сегнетоэлектрики-антиферромагнетики // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. № 2. С. 643–646.
- [3] Плахтий В.П., Мальцев Е.И., Каминкер Д.М. Нейтронографическое исследование некоторых соединений со структурой перовскита // Известия АН СССР. 1964. Т. 28. № 2. С. 436–439.
- [4] Feng L., Ye Z.G. Phase diagram and phase transitions in the relaxor ferroelectric $Pb(Fe_{2/3}W_{1/3})O_3$ - $PbTiO_3$ system // Journal of Solid State Chemistry. 2002. Vol. 163. No. 2. Pp. 484–490.
- [5] Левина С.С., Парашуков Н.П. Исследование сегнетомагнитных твердых растворов системы $Pb(Fe_{2/3}W_{1/3})O_3$ - $PbTiO_3$ // Известия вузов. Физика. 1972. № 8. С. 131–133.
- [6] Mitoseriu L., Vilarinho P.M., Baptista J.L. Phase coexistence in $Pb(Fe_{2/3}W_{1/3})O_3$ - $PbTiO_3$ solid solutions // Applied Physics Letters. 2002. Vol. 80. No.23. Pp. 4422–4424.
- [7] Окадзаки К. Технология керамических диэлектриков. Пер. с япон. М.: Энергия, 1976. 336 с.
- [8] J. Rodriguez-Carvajal, Program FULLPROF, интернет pecypc <https://www.ill.eu/sites/fullprof/>
- [9] Vakhrushev S., Zhukov S., Fetisov G., Chernyshov V. The high-temperature structure of lead magnoniobate // J. Phys. Condens. Matter. 1994. Vol. 6. No. 22. Pp. 4021–4027.
- [10] Ivanov S.A., Eriksson S.G., Tellgren R., Rundlöf H. Neutron powder diffraction study of the magnetoelectric relaxor $Pb(Fe_{2/3}W_{1/3})O_3$ // Materials Research Bulletin. 2004. Vol. 39. No.14-15. Pp. 2317–2328.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НАБЕРЕЖНОВ Александр Алексеевич — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории нейтронных исследований Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН и старший научный сотрудник кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

ДОЛГАКОВ Иван Александрович — студент ИФНиТ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Dolgakovv@gmail.com



ТОВАР Михаэль — доктор физико-математических наук, исследователь Берлинского центра материалов и энергии им. Гельмгольца, Германия.

Glienicker St., 14109 Berlin, Germany
tovar@helmholtz-berlin.de

АЛЕКСЕЕВА Ольга Александровна — аспирантка кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
blackhole2010@yandex.ru

ВАХРУШЕВ Сергей Борисович — доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН; профессор кафедры нейтронной и синхротронной физики Санкт-Петербургского государственного университета.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26;
198504, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Петродворец, Ульяновская ул., 1.
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

Naberezhnov A.A., Dolgakov I.A., Tovar M., Alekseeva O.A., Vakhrushev S.B. AN ANALYSIS OF THE HIGH-TEMPERATURE PHASE STRUCTURE OF MULTIFERROIC SOLID SOLUTIONS OF THE PFW-PT.

The temperature evolution of multiferroic solid solutions of PFW-PT system, namely $(1-x)\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3)-(x)\text{PbTiO}_3$ crystal structure where $x = 0, 0.2, 0.3$, has been studied by neutron powder diffraction in the region of the morphotropic phase boundary. The coexistence of cubic and tetragonal phases in the solutions with $x = 0.2, 0.3$ was found below $T = 259$ and 285 K, respectively. As a result of the data treatment the atom coordinates, the occupation factors and the temperature dependences of cell parameters were determined in the cubic perovskite phase. The refinement of the crystal structure in terms of ideal perovskite exhibited the anomaly large Debye-Waller factors for the lead cations, indicating the appearance of random static displacements of these cations from the ideal perovskite (000) position. Using the split-ion model we estimated the value of Pb static shifts (~ 0.1 Å) from their high-symmetry positions along the [110] direction. It was shown that these shifts decrease with increasing the PbTiO_3 concentration.

MULTIFERROICS, CRYSTALLINE STRUCTURE, NEUTRON DIFFRACTION, MORPHOTROPIC PHASE BOUNDARY, FERROELECTRIC-RELAXOR.

REFERENCES

- [1] G.A. Smolenskii, A.I. Agranovskaya, V.I. Isupov, New ferroelectrics of the complicated formula. III. Pb_2MgWO_6 , $\text{Pb}_3\text{Fe}_2\text{WO}_9$ and $\text{Pb}_2\text{FeTaO}_6$, Solid State Physics. 1(1) (1959) 990–992.
- [2] V.A. Bokov, I.E. Mylnikova, G.A. Smolenskii, Ferroelectric antiferromagnetics, JETP. 15(2) (1962) 643–646.
- [3] V.P. Plakhtii, E.I. Maltsev, D.M. Kaminker, Neytronograficheskoye issledovaniye nekotorykh soyedineniy so strukturoy perovskita [Neutronographic investigation of some perovskite-structured compounds], Izv. AN SSSR. 28(2) (1964) 436–439.
- [4] L. Feng, Z.G. Ye., Phase diagram and phase transitions in the relaxor ferroelectric $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$ - PbTiO_3 system, Journal of Solid State Chemistry. 163(2) (2002) 484–490.
- [5] S.S. Levina, N.P. Parashchukov, Issledovaniye segnetomagnitnykh tverdykh rastvorov sistemy $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$ - PbTiO_3 [Study of magnetoelectric solid solutions $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$ - PbTiO_3], Izv. vuzov. Fizika. No. 8 (1972) 131–133.
- [6] L. Mitoseriu, P.M. Vilarinho, J.L. Baptista, Phase coexistence in $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$ - PbTiO_3 solid solutions, Applied Physics Letters. 80 (23) (2002) 4422–4424.
- [7] K. Okadzaki, Tekhnologiya keramicheskikh dielektrikov [Ceramic dielectrics technology], Per. s yapon., Moscow, Energiya, 1976.
- [8] J. Rodriguez-Carvajal, Program FULLPROF <https://www.ill.eu/sites/fullprof/>
- [9] S. Vakhrushev, S. Zhukov, G. Fetisov, V. Chernyshov, The high-temperature structure of lead magnoniobate, J. Phys., Condens. Matter. 6(22) (1994) 4021–4027.
- [10] S.A. Ivanov, S.G. Eriksson, R. Tellgren, H. Rundlöf, Neutron powder diffraction study of the magnetoelectric relaxor $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$, Materials Research Bulletin. 39 (14–15) (2004) 2317–2328.

THE AUTHORS

NABEREZHNOV Aleksandr A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation;
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

DOLGAKOV Ivan A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Dolgakovv@gmail.com

TOVAR Mikhael

Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH
Glienicke St., 14109 Berlin, Germany
tovar@helmholtz-berlin.de

ALEKSEEVA Olga A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
blackhole2010@yandex.ru

VAKHRUSHEV Sergey B.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation;
St. Petersburg University
1 Ul'yanovskaya St., Petrodvorech, St. Petersburg, 195504, Russian Federation
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

*А.М. Камалов, М.Э. Борисова*

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ВЛИЯНИЕ ВЛАГИ НА РЕЛАКСАЦИЮ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЗАРЯДА В МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПЛЕНКАХ НА ОСНОВЕ ПОЛИИМИДА

Изучены процессы релаксации заряда пленок на основе полиимида и политетрафторэтилена (второе соединение служит в качестве покрытия). Выявлено влияние покрытия на процессы релаксации заряда в пленках в условиях повышенной влажности. Полученные экспериментальные данные проанализированы с позиций современных представлений о механизме релаксации заряда. Методом компьютерного моделирования сложные спектры токов термостимулированной деполяризации (ТСД) разложены на отдельные элементарные пики, которые описываются уравнениями кинетики первого порядка. Определены энергии активации токов ТСД.

ПОЛИИМИД, МОДИФИКАЦИЯ, ТОК ТСД, ЛОВУШКА, МОДЕЛИРОВАНИЕ, КОРОНО-ЭЛЕКТРЕТ.

В последние годы не ослабевает интерес исследователей к процессам накопления и релаксации заряда в диэлектриках. Объясняется это, в первую очередь, тем, что с данными процессами тесно связаны такие электрофизические явления, как приэлектродная и миграционная поляризации, абсорбция, старение, пробой, а также электретный эффект.

В связи с постоянным расширением сфер применения полимерных электретов во многих областях науки и техники, понятен интерес исследователей, пытающихся замедлить процессы релаксации заряда в электретах, в основном, введением дисперсных наполнителей или модифицированием поверхности полимера, и тем самым увеличить стабильность электретного состояния.

Использование полиимидных пленок в электретных устройствах ограничено их высокой чувствительностью к влажности окружающей среды [1, 2]. Для расширения области их применения необходима модификация диэлектрика, приводящая к повышению влагостойкости.

Цель настоящего исследования — установить влияние влаги на процессы релаксации заряда в модифицированных пленках полиимида с односторонним и двухсторон-

ним тефлоновыми покрытиями.

Объектами исследования служили промышленные пленки ПМ (полиимидные), ПМФ-1 и ПМФ-2 (полиимидные с одно- и двух- сторонними фторопластовыми покрытиями соответственно), которые применяются для пазовой и обмоточной изоляции низковольтных электрических машин.

Ввиду указанного промышленного применения было целесообразно изучить влияние политетрафторэтиленового покрытия в материалах ПМФ-1 и ПМФ-2 на стабильность электретного состояния в условиях повышенной влажности окружающей среды.

Авторами работы [1] было установлено, что максимальная степень увлажнения полиимида при выдержке в среде с влажностью 98 % составила 2,3 %. Этот результат хорошо согласовывался с нашими данными, полученными ранее, и учитывался при выборе экспериментальных условий.

Первую серию пленок ПМ, ПМФ-1 и ПМФ-2 прогревали при температуре 140° С в течение одного часа для удаления влаги и остаточного заряда. Вторую серию таких же пленок выдерживали в течение 24 ч при влажности 98 %. Затем производилась зарядка всех пленок в коронном разряде при отрицательной полярности корони-

рующего электрода в нормальных условиях окружающей среды.

Известно (см., например, работу [3]), что при такой зарядке между ионами, пришедшими из газового разряда, и поверхностью полимерной пленки происходит обмен зарядами по механизму Оже-нейтрализации и образуется электрет с гомозарядом. Локализация носителей заряда происходит на ловушках в тонком приповерхностном слое диэлектрика.

Релаксацию электрического заряда в прогретых и увлажненных пленках изучали методом термостимулированной деполяризации (ТСД) при нагреве образцов с постоянной скоростью $\beta = dT/dt = 2\text{ К / мин.}$ Токи ТСД измеряли при блокирующем контакте; при этом прокладку из пленки политетрафторэтилена (40 мкм) помещали на заряженную поверхность пленки. При неплотном контакте направление тока соответствовало движению носителей через объем электрета.

Сравнение спектров ТСД (рис. 1) прогретой и увлажненной полиимидных пленок

позволило установить, что увлажнение приводит к смещению температурной точки максимума тока на 55 К в сторону более низких температур. Это объясняется, вероятнее всего, тем, что молекулы воды в объеме полиимида взаимодействуют с бензольными кольцами и примесными группами COOH , в результате чего образуются отрицательно заряженные водородные вакансии (в кольцах и группах COO^-) и положительно заряженные группы NH^+ , которые играют роль свободных носителей заряда, обеспечивающих повышенную проводимость [4]. Присутствие молекул воды создает и новые уровни захвата носителей заряда. Абсорбция воды происходит как на поверхности полиимида, так и в объеме этого полимера [6].

Спектры токов ТСД проанализированы нами на основе представлений о суперпозиции дискретных максимумов $\sum_{i=1,2,3}^n J_n$, описываемых уравнениями кинетики первого порядка [5]. В этом случае для каждого максимума величина плотности тока ТСД

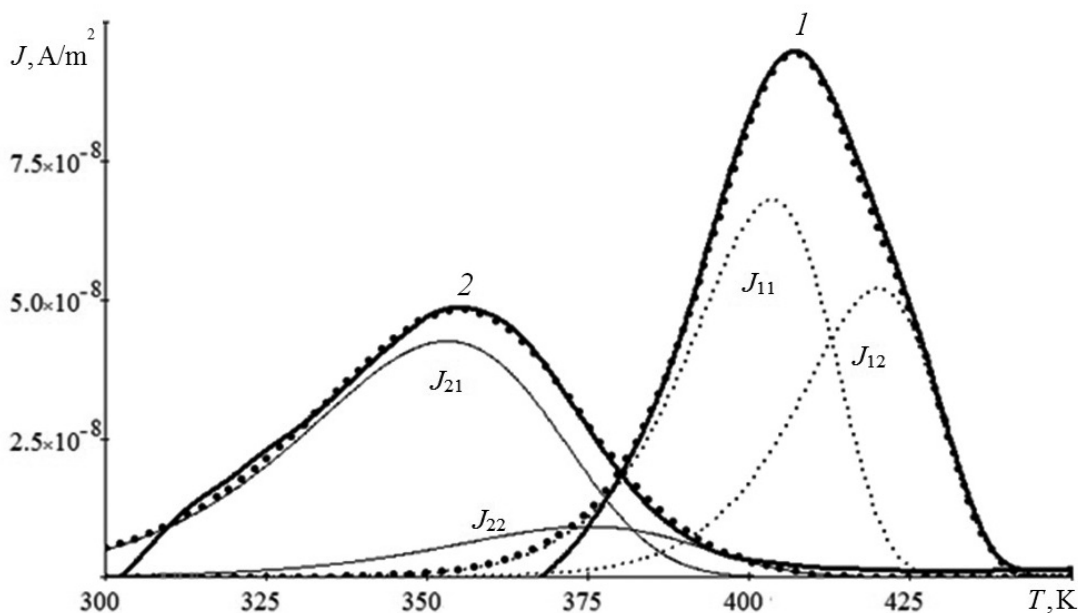


Рис. 1. Экспериментальные (линии) и моделируемые (точки) спектры токов ТСД для прогретой (1) и увлажненной (2) пленок ПМ; приведены составляющие полученного разложения этих спектров для прогретой (J_{11} , J_{12}) и увлажненной (J_{21} , J_{22}) пленок



J_{TSD} может быть представлена выражением

$$J_{\text{TSD}} = J_m \exp \left[\frac{W}{k} \left(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T} \right) \right] \exp \left\langle -\frac{W}{kT_m^2} \times \int_{T_m}^T \exp \left[\frac{W}{k} \left(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T'} \right) \right] dT' \right\rangle.$$

Здесь плотность тока в максимуме J_m выражается как

$$J_m = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{lay}} U_{e0}}{(\varepsilon h_{\text{lay}} + \varepsilon_{\text{lay}} h) \tau_m} \exp \left\{ -\frac{W}{kT_m^2} \times \int_{T_0}^{T_m} \exp \left[\frac{W}{k} \left(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T'} \right) \right] dT' \right\}.$$

где $\varepsilon_{\text{lay}} h_{\text{lay}}$ — диэлектрическая проницаемость и толщина прокладки; k — постоянная Больцмана; T_0 , T' — начальная и конечная температуры соответственно; T_m — температура в максимуме плотности тока J_m ; ε, h — диэлектрическая проницаемость и толщина испытуемой пленки; U_{e0} — начальное значение электретной разности потенциалов; τ_m — время релаксации при температуре максимума, ε_0 — диэлектрическая постоянная.

Время релаксации описывается выражением

$$\tau = \tau_m \exp \left(\frac{W}{kT} - \frac{W}{kT_m} \right).$$

В основе расчета лежат характерные значения плотности тока в максимуме J_m и температуры максимума T_m , которые определяют по экспериментальным данным токов ТСД; при этом значение энергии активации W варьируется.

Экспериментально измеренные спектры увлажненной и прогретой полиимидных пленок имеют сложный характер, хотя визуально они представляют собой кривую с одним максимумом. Результаты расчетов по описанной выше методике моделирования представлены в таблице.

Представленные нами результаты показывают, что спектр плотности тока ТСД увлажненной пленки ПМ содержит не один (полученный экспериментально), а два максимума (J_{21}, J_{22}). Можно видеть, что значение энергии активации основного максимума разложения спектра ТСД уменьшилось после увлажнения образцов пленки с $W_{11} = 1,25$ эВ до $W_{21} = 0,52$ эВ.

Таблица

Основные параметры разложения спектров токов ТСД на элементарные пики в полиимидных пленках, подвергнутых разным воздействиям

Расчетные максимумы (пики)	$J_m \cdot 10^{-8}$, А/м ²	T_m , К	W , эВ
<i>Прогретая пленка ПМ</i>			
J_{11}	6,80	404	1,25
J_{12}	5,20	420	1,40
<i>Увлажненная пленка ПМ</i>			
J_{21}	4,25	353	0,52
J_{22}	0,91	375	0,60
<i>Увлажненная пленка ПМФ-2</i>			
J_{31}	0,63	318,0	0,54
J_{32}	0,20	364,0	0,55
J_{33}	2,75	436,3	1,45
J_{34}	1,00	451,5	1,70

Обозначения: J_m — максимальная плотность тока ТСД, T_m — температура при J_m , W — энергия активации тока ТСД.

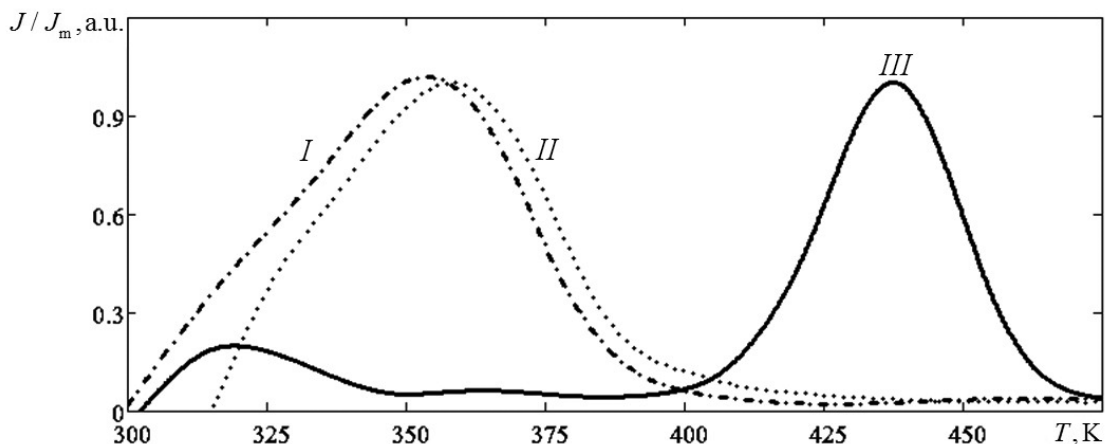


Рис. 2. Экспериментальные спектры токов ТСД увлажненных пленок ПМ (I), ПМФ-1 (II) и ПМФ-2 (III)

Для интерпретации полученных результатов следует принять за основу результаты работы [7], где методом диэлектрической спектроскопии было показано, что при увлажнении пленки полиимида на зависимости $\varepsilon''(T)$ появляется низкотемпературный пик, который обусловлен сорбцией воды. Авторы выделили два различных участка молекулы полиимида. По их мнению, молекулы воды могут присоединяться как к атомам кислорода эфирной связи, так и к карбонильной группе молекул полиимида. Возникновение таких связей обеспе-

чивает дополнительные ловушки для носителей заряда в полиимиде [8].

Таким образом, влага, взаимодействующая с молекулами исследованного нами полимера, создает дополнительные ловушки для зарядов; эти ловушки опустошаются по мере ухода воды из пленки при нагреве. Этот эффект обуславливает полученное нами изменение значения энергии активации токов ТСД.

На рис. 2 сопоставлены экспериментальные спектры исследованных материалов после увлажнения. Видно, что спектр поли-

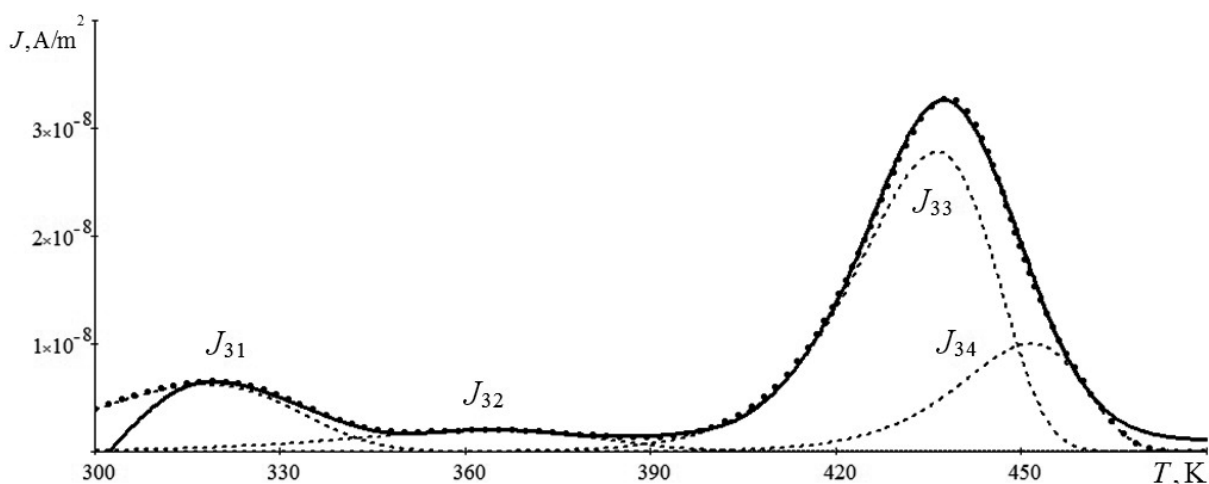


Рис. 3. Экспериментальный (сплошная линия) и модельные (точечные линии) спектры токов ТСД в увлажненной пленке ПМФ-2; представлены составляющие ($J_{31} - J_{34}$) проведенного разложения этого спектра



имидной пленки с двухсторонним покрытием (ПМФ-2) имеет три максимума. Основная область релаксации заряда в этой пленке находится при более высоких температурах, чем в пленках ПМ и ПМФ-1. Это свидетельствует о более высокой термостабильности электретного состояния пленки ПМФ-2. Следовательно, двухстороннее тефлоновое покрытие, нанесенное на полиимидную пленку, защищает ее от проникновения влаги. При относительно низких температурах появляются два незначительных максимума при 318 и 365 К, что свидетельствует о более сложном механизме накопления и релаксации заряда, по-видимому, связанным с появлением дополнительных уровней захвата заряда при увлажнении.

Основные параметры элементарных пиков, полученных при разложении экспериментального спектра токов ТСД в увлажненной пленке ПМФ-2, представлены в таблице (соответствующий спектр приведен на рис. 3).

Сравнение значений энергии активации, полученных из спектров токов ТСД в увлажненных ПМ и ПМФ-2 (см. таблицу) позволяет заключить, что низкотемпературные максимумы J_{21} и J_{31} , J_{22} и J_{32} имеют сходные между собой значения W_i . Этот

результат можно связать с одинаковыми процессами абсорбции воды в полиимидном слое. Значения энергии активации, относящиеся к максимумам J_{33} и J_{34} , очевидно, обусловлены наличием уровней захвата в тефлоновом покрытии.

Выводы

Проведенное исследование позволяет заключить, что наличие покрытия из политетрафторэтилена усиливает электретный эффект в пленках ПМФ-2 в условиях повышенной влажности. Это связано с тем, что фторсодержащее покрытие защищает полиимид от проникновения влаги. Следовательно, пленки полиимида с двухсторонним покрытием из тефлона (ПМФ-2) могут использоваться в электретных устройствах не только при повышенных температурах, но и при повышенной влажности окружающей среды.

В результате анализа спектров токов ТСД установлено, что в пленках ПМФ-2 заряд накапливается на мелких ловушках, соответствующих энергии активации 0,54 – 0,55 эВ, и на глубоких ловушках с энергией активации 1,45 – 1,70 эВ. Глубокие ловушки обеспечивают высокую термостабильность электретного состояния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Gorur G. Raju dielectrics in electric fields. New York: CRC Press, 2003. 568 p.
- [2] Галичин Н.А., Борисова М.Э. Влияние повышенной влажности на стабильность электретного состояния в полиимидных пленках // Электротехника. 2007. № 3. С. 24–28.
- [3] Vance D.W. Surface charging of insulators by ion irradiation // J. Appl. Phys. 1971. Vol. 42. No. 13. Pp. 42–48.
- [4] Галичин Н.А., Борисова М.Э. Влияние частичных разрядов на спектры токов термостимулированной деполяризации // Известия РГПИ им. А.И. Герцена. 2009. № 79. С. 120–127.
- [5] Борисова М.Э., Осина Ю.К. Анализ релаксационных процессов методом математического моделирования // Письма в ЖТФ. 2015. Т. 41. Вып. 15. С. 2–7.
- [6] Gu Xu, Gryte C.C., Nowick A.S., et al. Dielectric relaxation and deuteron NMR of water in polyimide films // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 66. No. 11. Pp. 5290–5297.
- [7] Melcher J., Daben Y., Arlt G. Dielectric effects of moisture in polyimide // IEEE Transactions on Electrical Insulation. 1989. Vol. 24. No. 1. Pp. 31–37.
- [8] Kaneko K., Ozaki T., Nakane E., Mizutani T. Space charge phenomena in polyimide films and effects of absorbed water // International Symposium on Electrical Insulating. 2005. Kitakyushu, Japan. Pp. 150–155.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КАМАЛОВ Алмаз Маратович – аспирант кафедры техники высоких напряжений, электроизоляционной и кабельной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
l.almaz.kamalov@gmail.com

БОРИСОВА Маргарита Эдуардовна — доктор технических наук, профессор кафедры техники высоких напряжений, электроизоляционной и кабельной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vladimirl.borisov@gmail.com

Kamalov A.M., Borisova M.E. THE INFLUENCE OF MOISTURE ON CHARGE RELAXATION IN MODIFIED POLYIMIDE FILMS.

The charge relaxation processes in the films based on polyimide and polytetrafluoroethylene (the latter serves as a coating) have been studied. The coating effect on the charge relaxation processes in the films under high humidity conditions was revealed. The obtained experimental data was analyzed in the context of the present-day knowledge of the charge relaxation mechanism. The complex spectra of the thermally stimulated depolarization currents (TSDC) were resolved into individual components described by the first-order kinetics equations using computer simulation. The TSDC activation energies were calculated and interpreted in terms of the mechanism of release of charge carriers. It was shown that the polytetrafluoroethylene coats on film surfaces lead to an essential increase in the electret state stability at elevated temperature and high humidity.

POLYIMIDE, MODIFICATION, TSDC, TRAP, SIMULATION, CORONOELECTRET.

REFERENCES

- [1] **G. Gorur**, Raju dielectrics in electric fields, CRC Press, New York, 2003.
- [2] **N.A. Galichin, M.E. Borisova**, Vliyaniye povyshennoy vlazhnosti na stabilnost elektretного sostoyaniya v polimidnykh plenkakh [An effect of elevated humidity on the electretic state stability in polyimide films], Elektrotehnika. No. 3 (2007) 24–28.
- [3] **D.W. Vance**, Surface charging of insulators by ion irradiation, J. Appl. Phys. 42 (13) (1971) 42–48.
- [4] **N.A. Galichin, M.E. Borisova**, Vliyaniye chastichnykh razryadov na spektry tokov termostimulirovannoy depolyarizatsii [An effect of partial discharges on TSD currents spectra], Izvestiya of Gertsen RSPU. No. 79 (2009) 120–127.
- [5] **M.E. Borisova, Yu.K. Osina**, Analiz relaksatsionnykh protsessov metodom matematicheskogo modelirovaniya [An analysis of relax processes by simulation], PZhTF. 41 (15) (2015) P. 2–7.
- [6] **Gu Xu, C.C. Gryte, A.S. Nowick, et al.**, Dielectric relaxation and deuteron NMR of water in polyimide films, J. Appl. Phys. 66(11) (1989) 5290–5297.
- [7] **J. Melcher, Yang Daben, G. Arlt.**, Dielectric effects of moisture in polyimide // IEEE Transactions on Electrical Insulation. 24 (1) (1989) 31–37.
- [8] **K. Kaneko, T. Ozaki, E. Nakane, T. Mizutani**, Space charge phenomena in polyimide films and effects of absorbed water, International Symposium on Electrical Insulating, 2005, Kitakyushu, Japan, 150–155.

THE AUTHORS

KAMALOV Almaz M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
l.almaz.kamalov@gmail.com

BORISOVA Margarita E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vladimirl.borisov@gmail.com



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

DOI: 10.5862/JPM.248.5

УДК: 531.51:001.891

Д.А. Мусаева¹, В.К. Ильин¹, В. Гежа², Э. Бааке³

¹Казанский государственный энергетический университет,
Российская Федерация;

²Латвийский университет, г. Рига, Латвия;

³Ганноверский университет им. Лейбница, Германия

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НИЗКОЧАСТОТНОЙ ИМПУЛЬСНОЙ СИЛЫ ЛОРЕНЦА НА ДВИЖЕНИЕ РАСПЛАВА ГАЛИНСТАНА

В статье приводятся результаты численного и физического экспериментов по оценке влияния импульсной силы электромагнитного поля на осевую скорость и структуру потока расплава галинстана (GaInSn). В физическом эксперименте применялся доплеровский измеритель скорости при двух режимах внешнего воздействия на поток: импульсного и стационарного. Математическое моделирование движения жидкости проводилось в двухмерной осесимметричной постановке с использованием k - ϵ модели турбулентности для определения скоростей, развиваемых в условиях постоянного действия силы. Представлены результаты верификации модели для стационарного случая. Для импульсной силы Лоренца в диапазоне частот от 0,05 до 1 Гц экспериментально установлено повышение интенсивности пульсаций осевой скорости, при этом наиболее значимые изменения в потоке наблюдались при импульсах с частотой 0,10 Гц. Обнаружено, что действие импульсов с большей частотой сравнимо с влиянием стационарной силы Лоренца.

ПУЛЬСАЦИЯ, МОДУЛЯЦИЯ СИЛЫ ЛОРЕНЦА, ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПЕРЕМЕШИВАНИЕ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ГАЛИНСТАН.

Введение

Движение жидкости в нестационарных условиях и влияние условий такого рода на протекание тепломассопереноса в потоке остается на сегодняшний день актуальной темой исследования, поскольку в определенных случаях нестационарные воздействия приводят к интенсификации теплообмена, и в данном контексте поведение потока в изменяющихся условиях представляет практический интерес.

Довольно широко распространенным методом интенсификации теплообмена в жидкости путем ее активного перемешивания является наложение на поток низкоча-

стотных импульсов, реализуемых механическим, пневматическим, ультразвуковым и другими способами [1, 2]. Диапазон частот накладываемых пульсаций обуславливается физическими параметрами жидкости, возможностями реализации воздействия, целями приложения и другими факторами.

В таком энергоемком процессе как выплавка металла в индукционной печи, получившей широкое распространение в металлургии, эффективное перемешивание расплава является ключевой составляющей и оказывает влияние как на качество производимого материала, так и на его себестоимость.

В наиболее частом исполнении индукционные печи оснащены цилиндрическим тиглем, который окружен охлаждаемым индуктором. В общем случае индуктор равномерно распределен по высоте тигля. В таком оборудовании воздействие на расплав осуществляется при помощи электромагнитной (ЭМ) индукции — управление потоком реализуется без непосредственного взаимодействия с жидкостью, что является значительным преимуществом (с учетом агрессивности жидких металлов). Протекание переменного тока в индукторе обеспечивает генерирование переменного магнитного поля, которое, взаимодействуя с проводящим материалом, приводит к выделению Джоулева тепла в объеме металла и возникновению сил Лоренца, приводящих расплав в движение.

Структура потока и тепломассоперенос в таком цилиндрическом объеме хорошо изучены численно и экспериментально, в том числе соавторами статьи, в масштабированных и полноразмерных моделях печи [3 – 6]. Поток представляет собой интенсивное турбулентное движение, формирующее два тороидальных вихря, расположенных один над другим, с противоположными направлениями вращения. При этом значительный перенос тепла и массы наблюдался исследователями в области, разделяющей вихри. Интенсивность потока непосредственно зависит от значений силы тока в индукторе и частоты переменного ЭМ поля, являющихся регулируемыми параметрами.

Ввиду широкого применения электромагнитного перемешивания расплавов в промышленности, с момента внедрения этого метода в производство вопросу эффективного управления потоком жидкого металла в тигле индукционной печи и интенсификации тепломассообмена в жидкости при перемешивании, посвящен ряд исследований [7, 8]. Большую распространенность, благодаря своей действенности, получил метод интенсификации перемешивания при помощи дискретного подвода энергии, а именно — приложения импульсов электромагнитного поля [6, 9 – 11]. Подбор параметров генерируемого поля,

основанный на знании структуры потока жидкости, позволяет повысить количество движения расплава без увеличения средней скорости потока. Так, можно реализовать более интенсивное перемешивание без увеличения подводимой энергии, по сравнению с потоком, который формируется под действием непрерывно приложенного переменного магнитного поля.

Импульсное воздействие ЭМ поля на расплав можно реализовать прерыванием магнитных полей различного вида: бегущего, вращающегося, постоянного.

В настоящей работе рассматривается воздействие силы ЭМ поля на движение расплава в масштабированной модели тигля индукционной печи при периодическом включении и выключении генератора переменного тока с определенной импульсной частотой $f_p = 0,05 - 10$ Гц. Интенсивность перемешивания расплава сравнивается с движением жидкого металла под действием постоянно приложенной силы ЭМ поля ($f_p = 0, stf$).

Экспериментальная установка

Целью работы являлось экспериментальное исследование влияния низкочастотной импульсной силы ЭМ поля (силы Лоренца) на движение эвтектического сплава, называемого галинстаном и состоящего из галлия (68 %), индия (20 %) и олова (12 %). Температура плавления галинстана позволяет проводить измерение параметров потока при комнатной температуре. Материалы, используемые в эксперименте, и их физические параметры представлены в табл. 1.

Цилиндрический контейнер, в котором помещался расплав, был выполнен из плексигласа. Контейнер был окружен индуктором, равномерно распределенным по высоте расплава (рис. 1).

Экспериментальная установка была спроектирована таким образом, чтобы получение информации о параметрах потока в нестационарных условиях могло быть реализовано при помощи ультразвукового доплеровского измерителя скорости.

На рис. 1 схематично обозначено характерное распределение силы Лоренца (5),

Таблица 1

Значения основных параметров объектов исследования

Номер	Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение
Сплав $Ga_{0,68}In_{0,20}Sn_{0,12}$				
1	Плотность	ρ	кг/м ³	6440
2	Динамическая вязкость	μ	Па·с	0,0024
3	Теплопроводность	λ	Вт/(м·К)	16,5
4	Температура плавления	T	К	~ 275
5	Скорость звука в среде	V_c	м/с	2730
6	Акустическое сопротивление среды	Z	кг/(м ² ·с)	18,9
7	Удельная электрическая проводимость	σ	См/м	3,46·10 ⁶
8	Радиус цилиндрического объема расплава	R	мм	31
9	Высота расплава	H		70
Медный индуктор				
10	Удельная электрическая проводимость	σ_{Cu}	См/м	1,74·10 ⁸
11	Количество витков	N	—	6
12	Диаметр одного витка	d	мм	8
13	Расстояние между витками	n		4
14	Радиус индуктора	R_{ind}		61

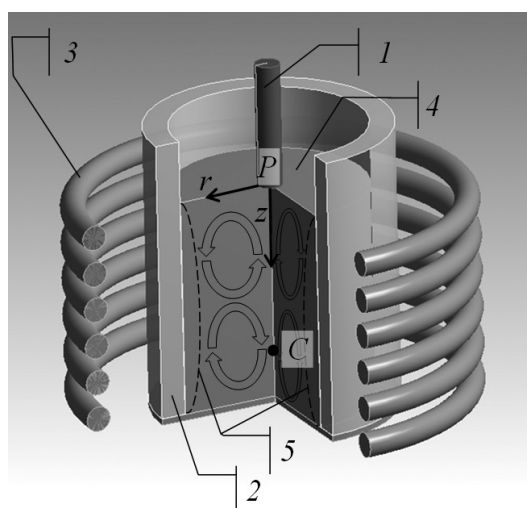


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:
 1 – сенсор, 2 – контейнер, 3 – индуктор,
 4 – расплав, 5 – распределение силы Лоренца;
 показаны линии тока в расплаве; P – точка закрепления сенсора, C – точка максимума на профиле измеренной осевой скорости для нижнего вихря (см. рис. 2 и описание в тексте)

наводимой в расплаве в переменном магнитном поле, и линии тока, указывающие основные направления движения жидкости под действием силы ЭМ поля. Как упоминалось ранее, структура потока расплава в цилиндрическом объеме при указанном распределении плотности силы Лоренца представляет собой движение двух торoidalных вихрей. Плотность силы, наводящейся в расплаве, осциллирует с частотой, которая вдвое превышает частоту ЭМ поля. При этом изменением плотности силы Лоренца во времени можно пренебречь, так как жидкие металлы не успевают реагировать (ввиду их инертности) на воздействия с частотой выше 4 Гц [10]. Варьирование частоты ЭМ поля приводит к изменению глубины проникновения поля в проводящую жидкость (скин-слоя) и области его активного воздействия. Значение плотности силы ЭМ поля экспоненциально убывает в пределах скин-слоя, при этом его

толщина также зависит от характеристик среды, на которую оказывается воздействие. Толщину скин-слоя можно определить соотношением

$$\delta = (\pi f_{ac} \mu_m \sigma)^{-1/2},$$

где f_{ac} — частота изменения направления ЭМ поля, $\mu_m = 1,256 \cdot 10^{-6}$ Н/А² — магнитная постоянная, σ — электрическая проводимость среды.

Для галинстана значение δ составило 22 мм, что при внутреннем диаметре контейнера D , равном 62 мм, представляет значительную часть объема расплава, на которую поле оказывает действие, приводя жидкость в движение.

Параметры потока определялись экспериментально при помощи доплеровского измерителя скорости. Его принцип работы, как ясно из названия, основан на эффекте Доплера, т. е. на изменении частоты ультразвуковой волны, испускаемой и принимаемой сенсором, при ее отражении микрочастицами, распределенными в жидкости. При этом скорость сноса частицы в пределах ультразвукового пучка определяется по разности частот испускаемой и отраженной волн. Данный метод широко используется для нахождения параметров потока в легкоплавких жидких металлах и модельных жидкостях [5, 12, 13].

В описанном эксперименте применялся ультразвуковой доплеровский измеритель скорости DOP3010 Velocimeter (Signal Processing SA, Швейцария). При проведении измерений сенсор диаметром 8 мм помещался непосредственно в жидкость через свободную поверхность на глубину 1 – 2 мм и фиксировался в таком положении на протяжении всего опыта. Частота сигнала, отправляемого сенсором, составляла 1428 Гц при скорости звука в расплаве, равной 2730 м/с (см. табл. 1). Сенсор закреплялся на оси цилиндрического объема (точка P ($r = 0$ мм) на рис. 1) с целью измерения осевой компоненты скорости. Данная компонента скорости преобладает в изучаемой структуре потока. При этом величина скорости имела отрицательное значение, если поток, параллельный пучку, был направлен к сенсору, и, положительное, если частицы

в жидкости двигались по направлению от сенсора.

В эксперименте использовались два режима наложения на поток силы ЭМ поля. В первом случае измерялись скорости потока расплава при непрерывном протекании тока в индукторе для значений f_{ac} от 50 до 250 Гц. С учетом того, что $f_{ac} \gg 4$ Гц, воздействие на расплав считалось стационарным (параметры ЭМ поля далее обозначены индексом st).

Во втором случае рассматривалось движение жидкости под действием импульсной силы Лоренца (параметры с индексом p). При модуляции силы ток в индукторе прерывался для создания импульсов с частотой f_p . Если обозначить промежуток времени, в течение которого сила ЭМ поля оказывает воздействие на расплав, как T_{act} , а длительность паузы, во время которой сила Лоренца отсутствует и жидкость движется под действием инерции, как T_0 , то выражения для определения частоты и периода импульсов можно представить следующим образом:

$$f_p = \frac{1}{T_p}, \quad T_p = T_{act} + T_0, \quad \psi = \frac{T_0}{T_{act}},$$

где ψ — скважность импульсов силы ЭМ поля.

Согласно закону электромагнитной индукции, сила Лоренца, возникающая в расплаве при наложении переменного магнитного поля, выражается как

$$\mathbf{F}_{EM} = \mathbf{j} \times \mathbf{B}. \quad (1)$$

Обозначим величину результирующей плотности силы ЭМ поля для стационарного воздействия как F_{EM}^{st} . Тогда F_{EM}^p — плотность силы, которая оказывает влияние на поток в период времени T_{act} . Величина F_{EM}^p задавалась таким образом, чтобы с учетом полупериода T_0 , в течение которого воздействие ЭМ поля на расплав отсутствует, сохранялось интегральное равенство между стационарным и импульсным режимами:

$$\frac{1}{T_p} \int_0^{T_p} F_{EM}^p dT = F_{EM}^{st}.$$

Экспериментально исследовано влияние нестационарного воздействия для сле-



дующих значений частоты модулированных импульсов: $f_p = 0,05; 0,10; 0,20; 0,50; 0,80; 1; 2; 5; 8; 10$ Гц. Скважность импульсов составляла $\psi = 1$ ($T_{act} = T_0$). Также было рассмотрено воздействие на поток стационарной силы Лоренца. Для каждого режима записывались 2000 мгновенных профилей осевой скорости в течение 200 с, при разрешении в 80 точек; профили затем усреднялись по всему времени измерения. Результатом измерения являлось распределение осевой скорости по оси цилиндра. Фиксировались также пульсации скорости путем измерения величины стандартного отклонения скорости от ее среднего значения.

Математическая модель движения расплава под действием постоянной силы Лоренца

Для выбора оптимальных параметров ЭМ поля, а также для предварительной оценки интенсивности потока, была разработана и экспериментально верифицирована двухмерная осесимметричная математическая модель движения расплава при стационарном воздействии. Моделирование движения расплава в магнитном поле, будучи сопряженной задачей, было реализовано в два этапа:

I. Гармонический электромагнитный анализ (в приложении Mechanical APDL программного пакета Ansys);

II. Моделирование движения жидкости с применением стандартной k - ε модели турбулентности (в приложении Fluent).

В результате первого этапа моделирования было получено распределение плотности силы Лоренца при заданных параметрах переменного тока в индукторе. Эта сила симметрична относительно оси цилиндрического объема; как отмечалось выше, в расчете учитывалась только радиальная составляющая, так как ее величина значительно превышает значения осевой и угловой компонент.

Электромагнитные процессы описываются уравнениями Максвелла, которые в дифференциальной форме в квазистационарной постановке можно записать в следующем виде:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0,$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \times \mathbf{B} = -\mu_m \mathbf{j},$$

где $\mathbf{E}$ — электрический вектор поля, $\mathbf{B}$ — плотность магнитного потока, $\mathbf{j}$ — плотность тока, t — время, μ_m — магнитная проницаемость среды.

В общем случае следующая система уравнений решается с целью описания магнитогидродинамических процессов:

$$\mathbf{j} = \sigma[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}], \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] + \frac{1}{\mu_m \sigma} \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (3)$$

$$\nabla \mathbf{j} = 0. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{v}$ — локальная скорость проводящей среды.

В данной системе уравнение (3) описывает диффузию магнитного поля в несжимаемую проводящую жидкость. Если учитывать, что движение проводящей жидкости не влияет на магнитное поле, и если принять электрическую проводимость среды за постоянную величину, так как магнитное число Рейнольдса

$$\text{Re}_m = LV\mu_m\sigma \ll 1,$$

(L , V — характеристические длина и скорость), то данное выражение также можно представить в качестве уравнения диффузии

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \lambda_{mag} \nabla^2 \mathbf{B},$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0,$$

где $\lambda_{mag} = (\mu_m \sigma)^{-1}$ — коэффициент диффузии.

Проводящий объект, находясь в ЭМ поле, испытывает на себе действие силы, зависящей от величины индукции магнитного поля. Объемная плотность силы ЭМ поля выражается формулой (1). Используя связь тока с ротором индукции магнитного поля и формулу для ротора векторного поля, выражение приводим к виду

$$\mathbf{F}_{EM} = \frac{1}{\mu_m} (\mathbf{B} \nabla) \mathbf{B} - \nabla \left(\frac{\mathbf{B}^2}{2\mu_m} \right).$$

В этом выражении второе слагаемое представляет собой градиент от скалярной величины и означает потенциальную силу, не оказывающую влияния на движение жидкости. Первое слагаемое описывает объемную силу, приводящую жидкость в движение.

На этапе моделирования гидродинамического процесса распределение плотности силы ЭМ поля в качестве граничного условия интегрировалось в сетку, созданную для симуляции движения жидкости с применением стандартной k - ϵ модели турбулентности в приложении Fluent, предназначенном для расчета гидродинамических процессов. Вычислительная сетка состояла из 10 тыс. элементов; она была сгущена у цилиндрической поверхности и в придонной области, так чтобы нормализованная координата y^+ ближайшей к стенке расчетной точки лежала в интервале $30 \leq y^+ \leq 60$, соответствующем применяемой модели турбулентности [14]. С тем чтобы учесть влияние наличия твердой стенки на течение, при проведении расчетов выбиралась опция Enhanced Wall Treatment. Связь между давлением потока расплава и

его скоростью рассчитывалась при помощи алгоритма SIMPLE. Интенсивная завихренность потока принималась во внимание путем интерполяции давления при расчете по схеме PRESTO! Однако используемая модель не учитывала изменение формы свободной поверхности под действием магнитного поля и течений в объеме расплава. В связи с этим на верхнюю границу налагалось условие скольжения и непротекания. На рис. 2 модель представлена с накладываемыми граничными условиями на обоих этапах сопряженного моделирования.

Таким образом, для несжимаемой проводящей жидкости рассчитываемые уравнения Навье – Стокса, в которые в качестве движущей силы включена плотность силы ЭМ поля, в дифференциальной форме можно выразить следующим образом:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0,$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \operatorname{div} (2\mu_{ef} S) + \mathbf{F}_{EM}.$$

Здесь μ_{ef} – эффективная вязкость, определяемая как сумма ламинарной и турбулентной вязкостей, т. е. $\mu_{ef} = \mu + \mu_t$; S – тензор скоростей деформаций.

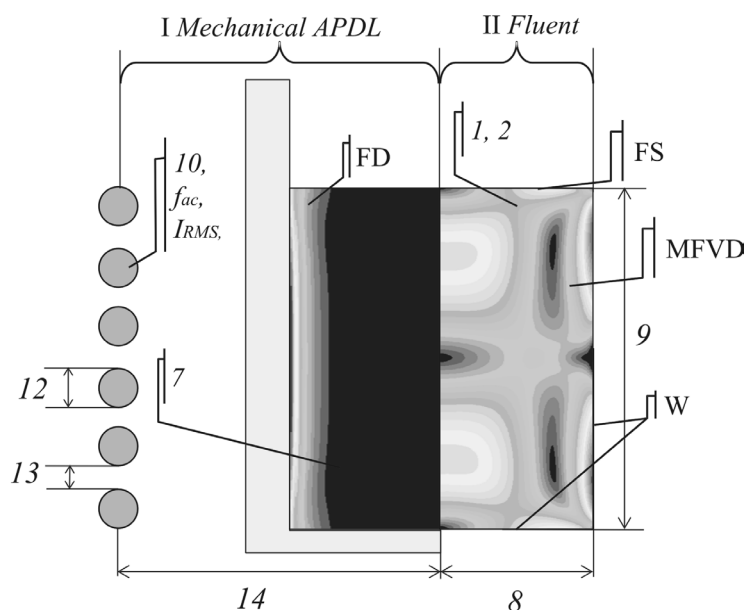


Рис. 2. Двухмерная модель, используемая в численном эксперименте движения расплава под действием стационарной силы Лоренца (FD – ее распределение); MFVD – распределение средней скорости потока; I, II – этапы моделирования.

Приведены параметры моделирования (номера позиций соответствуют приведенным в табл. 1), а также граничные условия (помимо FD), задаваемые при моделировании: W (стенка), FS (свободная поверхность)

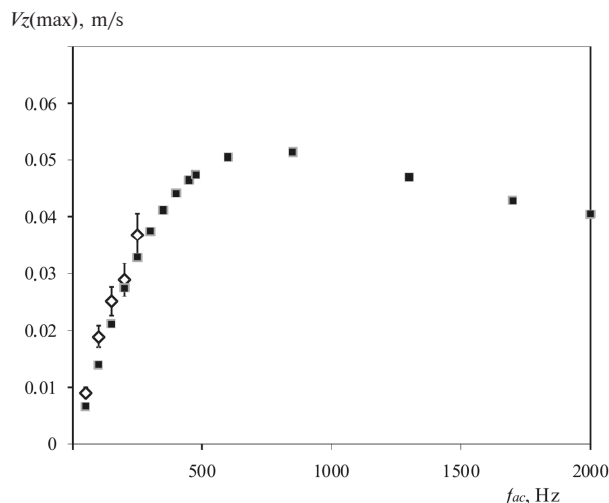


Рис. 3. Зависимости максимальной осевой скорости расплава по оси его цилиндрического объема ($r = 0$) от частоты переменного тока в индукторе, полученные численно (черные квадраты) и экспериментально (пустые ромбы). Сила Лоренца стационарна, $I_{\text{RMS}} = 200$ А. Расчетная модель 2D- k - ε . Диапазон ошибки ± 5 %

Моделирование движения расплава в индукционной печи в переменном ЭМ поле с применением k - ε модели турбулентности позволяет вычислить средние скорости и структуру потока, существенно согласующиеся с экспериментальными данными [3, 15, 16].

Верификация математической модели

Для проверки адекватности модели численно исследовалось движение жидкого металла для фиксированной величины силы тока $I_{\text{RMS}} = 200$ А и различных значений f_{ac} (рис. 3). График демонстрирует зависимость изменения максимальных значений осевой скорости на оси цилиндрического объема от частоты переменного тока в индукторе. Данная функциональная связь отражает эффективность наложенного ЭМ поля на поток и обычно выражается через безразмерное отношение диаметра цилиндра к толщине скин-слоя (D/δ). Приведенная форма кривой, содержащей максимум и далее монотонное поведение функции, характерна для взаимодействия переменного магнитного поля и проводящего материала в нем [17].

Результатами численного эксперимента стали также характерная картина потока и распределение осредненной по времени опыта осевой скорости на оси цилиндра ($r = 0$) при стационарном воздействии силы Лоренца (рис. 2 и 4). Профиль соответствует теоретическому представлению о формировании потока под действием переменного магнитного поля, так как на графике присутствуют два максимума значений измеренной скорости V_z , соответствующие расходящимся потокам двух

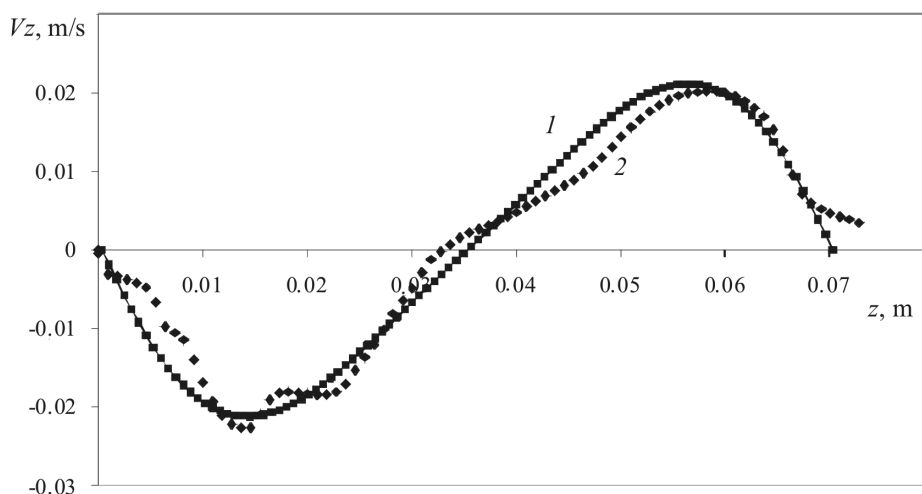


Рис. 4. Распределения осевой скорости ($r = 0$) по глубине расплава, полученные численно (1) и экспериментально (2). Стационарный режим, $f_{ac} = 150$ Гц, $I_{\text{RMS}} = 200$ А

тороидальных вихрей вдоль оси. Виден также переход кривой через ось абсцисс на отметке в 35 мм, который соответствует области минимальных осевых скоростей (поворота вихрей) в центральной области объема расплава [3 – 5]. Следует также отметить согласие между значениями максимальных скоростей, полученных численно и экспериментально.

Для проведения физического эксперимента, в соответствии с техническими возможностями оборудования, были выбраны следующие параметры для создания ЭМ поля для стационарного режима: частота переменного тока в индукторе $f_{ac} = 150$ Гц, а эффективное значение силы тока $I_{RMS} = 200$ А.

Движение расплава в условиях импульсного воздействия

Чтобы оценить влияние изменения частоты f_p на характер движения жидкости, проведено сопоставление интенсивностей пульсаций скорости потока для каждой частоты в диапазоне от 0,05 до 10 Гц. Для этого вычислялись стандартные откло-

нения измеренной осевой скорости от ее среднего значения на протяжении всего времени опыта. Результаты таких вычислений позволили оценить, насколько активно жидкость реагирует на переменное или постоянное внешнее воздействие (рис. 5). Сплошной горизонтальной линией на графике отмечено значение измеренной пульсации скорости потока, развиваемого под действием постоянной силы Лоренца.

Анализ экспериментальных данных показал, что импульсное воздействие силы ЭМ поля с частотой в диапазоне от 0,50 до 10 Гц оказывает незначительное влияние на поток: величины пульсаций скорости близки к значению, полученному для стационарного случая. Этот результат можно объяснить инертностью жидкости, что согласуется с экспериментальными данными других исследователей [10, 15]; такие режимы могут считаться псевдостационарными.

Наиболее существенное влияние на движение расплава оказали импульсные режимы воздействия силы Лоренца в диапазоне значений $f_p = 0,05 - 0,20$ Гц. При

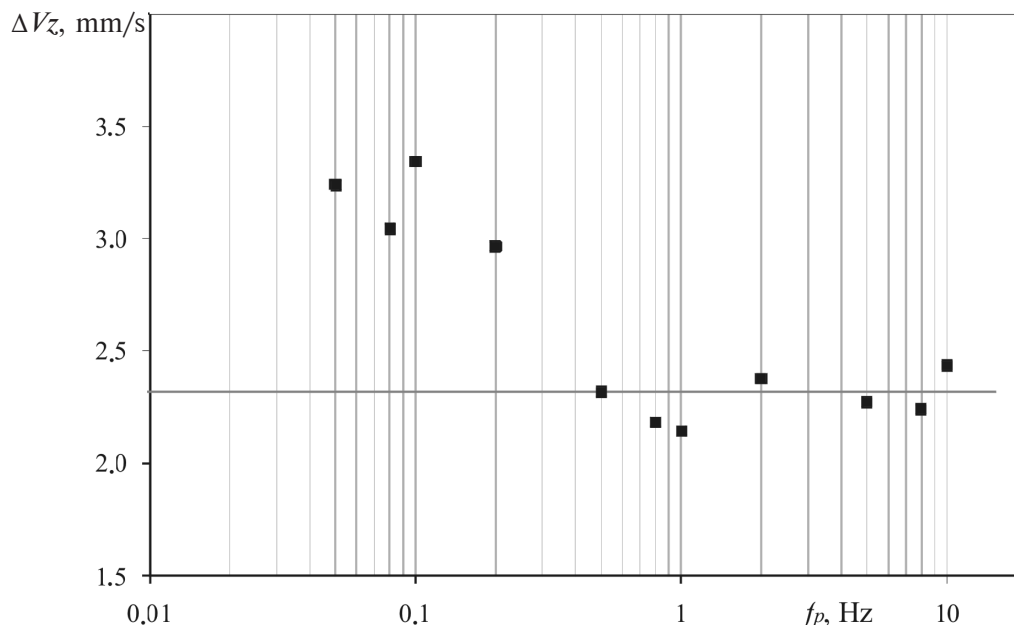


Рис. 5. Влияние частоты модуляции силы Лоренца на интенсивность пульсаций скорости потока. Сравниваются стандартные отклонения осевой скорости от ее среднего значения (ΔV_z) при стационарном (горизонтальная линия) и пульсирующем (точки, $\psi = 1$) воздействиях

этом наблюдается максимум развиваемых пульсаций осевой скорости для частоты $f_p = 0,10$ Гц.

Хорошо известно, что в потоке, который развивается под действием переменного магнитного поля, присутствуют пульсации скорости с относительно продолжительным периодом. Как показали авторы статьи [3], период таких колебаний зависит от силы ЭМ поля и геометрии контейнера, содержащего жидкость. Происхождение рассмотренных низкочастотных колебаний жидкости было подробно описано в статье [4] и связано с периодом обращения торoidalных вихревых структур в потоке (T_{ch}), которые генерируются переменным ЭМ полем. Характеристическая частота f_{ch} (обозначение, принятое авторами работы [18]), соответствующая данному периоду, была определена следующим образом:

$$T_{ch} = \frac{L_{ch}}{V_{ch}}; L_{ch} = 2\pi \cdot \frac{r_r + r_z}{2};$$

$$V_{ch} = \frac{V_{\max, wall} + V_{\max, axis}}{2}; f_{ch} = \frac{1}{T_{ch}},$$
(4)

где r_r , r_z – радиальный и осевой размеры вихрей, V_{ch} – характерная скорость потока.

Для эксперимента, описанного в настоящей статье, в качестве характерной скорости принимается осредненная по времени измерения величина осевой скорости для

точки C на оси контейнера с координатами $r = 0$ мм и $z = 60$ мм (см. рис. 1). Данная точка приблизительно соответствует максимуму на профиле измеренной осевой скорости для нижнего вихря (см. рис. 2). Замер скорости в точке C при стационарном воздействии производился несколько раз с целью снижения ошибки измерения. Значение скорости V_{ch} в точке C , развиваемой под действием постоянной силы Лоренца, составило 0,018 м/с.

Использование приведенных выше выражений для определения характеристических параметров потока (4), позволило получить значения периода и частоты оборота вихрей (табл. 2).

Предполагается, что присутствие максимума на рис. 5 обусловлено приближением частоты импульсов силы ЭМ поля к характеристической частоте оборота вихрей в потоке. Это повышает эффективность наложения импульсов и способствует росту значений локальных скоростей потоков в расплаве. Вполне резонно предположить, что реальный максимум пульсаций скорости для импульсного режима внешнего воздействия находится вблизи значения $f_p \sim 0,17$ Гц.

В предыдущем численном исследовании [19] было показано, что импульсное воздействие на поток с частотой, близкой к f_{ch} , приводит к значительному повыше-

Таблица 2

Результаты вычисления характеристических параметров потока расплава галинстана

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение
Размер вихря радиальный	r_r	см	1,55
осевой	r_z		1,75
Длина	L_{ch}	см	10,36
Скорость	V_{ch}	см/с	1,8
Период обращения вихревых структур	T_{ch}	с	5,88
Частота	f_{ch}	Гц	0,17

Примечание. Параметры рассчитаны по формуле (4).

нию как турбулентной кинетической энергии потока, так и интенсивности перемешивания жидкости. Это приводит в свою очередь к интенсификации теплообменных процессов в объеме.

Заключение

В статье рассмотрены результаты экспериментального исследования влияния низкочастотной импульсной силы электромагнитного поля на изменение осевой скорости потока эвтектического сплава галинстана (GaInSn). Значения осевой скорости были сопоставлены с величинами, полученными при наложении на поток постоянной силы Лоренца. Также была построена и верифицирована математическая модель стационарного течения галинстана под действием постоянной силы ЭМ поля.

Измерения, проведенные с применением доплеровского измерителя скорости, показали, что характер потока, формирующегося в стационарном процессе, согласуется с результатами, полученными другими экспериментаторами [8, 11 – 12, 14], а именно, что движение расплава в основ-

ном представлено двумя крупными вихрями с противоположными направлениями вращения относительно друг друга.

Наложение на поток импульсной силы Лоренца в диапазоне значений $f_p = 0,50 - 10$ Гц оказывает влияние, сравнимое по своей интенсивности со стационарным воздействием. Установлено, что значения измеренной осевой скорости жидкости близки к таковым, полученным при непрерывном приложении внешнего воздействия.

Под действием импульсов с частотой $f_p = 0,05 - 0,20$ Гц наблюдается повышение величины пульсационной составляющей осевой скорости потока, причем экспериментальный максимум достигается при $f_p = 0,10$ Гц. Предполагается, что максимальный эффект можно обнаружить при импульсном воздействии на поток расплава галинстана с частотой, близкой к $f_{ch} = 0,17$ Гц.

Работа выполнена при финансовой поддержке Германской службы академических обменов (DAAD) и Министерства образования и науки РФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Inaba T., Kubo T. Enhanced heat transfer through oscillatory flow // J. Heat Transfer Japanese Research. 1993. Vol. 22. No. 5. Pp. 480–492.
- [2] Mostinskii I.L., Lamden D.I., Stonik O.G. Influence of flow pulsations on the heat and mass transfer with particles // J. High Temperature. 1983. Vol. 21. No. 4. Pp. 576–582.
- [3] Baake E., Nacke B., Jakovičs A., Umbraško A. Heat and mass transfer in turbulent flows with several recirculated flow eddies // Magnetohydrodynamics. 2001. Vol. 37. No. 1–2. Pp. 13–22.
- [4] Kirpo M., Jakovičs A., Baake E., Nacke B. Modeling velocity pulsations in a turbulent recirculated melt flow // Magnetohydrodynamics. 2006. Vol. 42. No. 2–3. Pp. 207–218.
- [5] Cramer A., Zhang C., Eckert S. Local flow structures in liquid metals measured by ultrasonic Doppler velocimetry // Flow Meas. Instrum. 2005. Vol. 15. No. 3. Pp. 145–153.
- [6] Chen G.J., Zhang Y.J., Yang Y.S. Modelling the unsteady melt flow under a pulsed magnetic field // Chin. Phys. B. 2013. Vol. 22. No. 12. Pp. 120302-1–120302-5.
- [7] Branover H., Golbraikh E., Kapusta A., et al. Novel potentialities of electromagnetic stirring of melts in metallurgy // Proc. the Joint 15 the Riga and 6 the PAMIR Intern. Conf. on Fundamental and Applied MHD. 2005. Pp. 31–34.
- [8] Cramer A., Galindo V., Zennaro M. Frequency dependence of an alternating magnetic field driven flow // Magnetohydrodynamics. 2015. Vol. 51. No. 1. Pp. 133–148.
- [9] Dubodelov V.I., Fixsen V.N., Pogorsky V.K., et al. Research of the creation process of the modulated oscillations of electromagnetic force and their use processing aluminium alloy // Processing of the Third International Symposium on Electromagnetic Processing of Materials. Nagoya, Japan. April 3–6. 2000. Pp. 67–72.
- [10] Wang X., Fautrelle Y., Etay J., Moreau R. A periodically reversed flow driven by a modulated traveling magnetic field: Part I. Experiments with GaInSn // Metall. and Mater. Trans. 2009. Vol. 40B. No. 1. Pp. 82–90.
- [11] Eckert S., Nikrityuk P.A., Rabiger D., et al. Efficient melt stirring using pulse sequences of a rotating magnetic field: Part I. Flow field in a liquid metal column // Metall. Mater. Trans. B. 2007. Vol. 38. No. 6. Pp. 977–988.
- [12] Takeda Y. Measurement of velocity



profile of mercury flow by ultrasound Doppler shift method // Nucl. Techn. 1987. Vol. 79. No. 1. Pp. 120–124.

[13] **Takeda Y., Kikura H.** Flow mapping of the mercury flow // Exp. Fluids. 2002. Vol. 32. No. 2. Pp. 161–169.

[14] Fluent 6.2 User's Guide (ANSYS. Inc. USA, 2005).

[15] **Umbraško A.** Heat and mass transfer in electromagnetically driven recirculated turbulent flows (PhD thesis). Riga: University of Latvia, 2011.

[16] **Baake E., Mühlbauer A., Jakovičs A., Andree W.** Extension of the k - ε model for the numerical simulation of the melt flow in induction crucible

furnaces // Metall. Mater. Trans. B. 1994. Vol. 26. No. 3. Pp. 529–535.

[17] **Albach M., Patz J., Roßmanith H., Exner D., Stadler A.** Optimized Winding / Optimum in Power Efficiency // Pack Feindrahte. 2010. Vol. 1. No. 3 Pp. 1–8.

[18] **Kirpo M., Jakovičs A., Baake E.** Characteristics of velocity pulsations in a turbulent recirculated melt flow // Magnetohydrodynamics. 2005. Vol. 41. No. 2. Pp. 199–210.

[19] **Musaeva D., Ilin V., Baake E., Geza V.** Numerical simulation of the melt flow in an induction crucible furnace driven by a Lorentz force pulsed at low frequency // Magnetohydrodynamics. 2015. Vol. 51. No. 4. Pp. 771–785.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МУСАЕВА Диана Абдулаевна — аспирантка и ассистент кафедры «Энергообеспечение предприятий и энергоресурсосберегающих технологий» Казанского государственного энергетического университета, Российская Федерация.

420066, Российская Федерация, г. Казань, Красносельская ул., 51
musaeva.d.a@gmail.com

ИЛЬИН Владимир Кузьмич — доктор технических наук, профессор кафедры «Энергообеспечение предприятий и энергоресурсосберегающих технологий» Казанского государственного энергетического университета, Российская Федерация.

420066, Российская Федерация, г. Казань, Красносельская ул., 51
ilinwk@rambler.ru

ГЕЖА Вадимс — доктор физико-математических наук, инженер-исследователь лаборатории математического моделирования природных и технологических процессов Латвийского университета, г. Рига, Латвия.

8 Zellu str., LV-1002 Рига, Латвия
vadims.geza@gmail.com

БААКЕ Эгберт — доктор технических наук, профессор, директор по учебной части института электротехнологий Ганноверского университета им. Лейбница, г. Ганновер, Германия.

Welfengarten 1, 30167 Ганновер, Германия
baake@etp.uni-hannover.de

Musaeva D.A., Ilyin V.K., Geza V., Baake E. EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF LOW-FREQUENCY PULSED LORENTZ FORCE INFLUENCE ON THE MOTION OF GALINSTAN MELT.

The article presents the results of the numerical and physical experiments, aimed to recognize the influence of pulsed force of electromagnetic field on the melt motion and the fluid velocities. The experiment was performed on the eutectic alloy galinstan in the cylindrical volume, where Ultrasonic Doppler Velocimeter was employed for velocity measurements under conditions of pulsed and steady EM field application. A numerical simulation of the melt flow, forced by the steady forcing, involved a 2D axisymmetric model. The k - ε turbulence model was used to obtain the information about the melt velocities. The verification of the numerical model was carried out for the steady case. The effects of pulsed and steadily applied Lorentz force were compared using the physical experiment. An intensity of the velocity pulsations in galinstan for the pulsed frequencies in the range from 0.05 to 1 Hz considerably exceeded the values, measured in the

permanently stirred melt. For higher values of pulsed frequencies (from 1 to 10 Hz) the effect decreases and only slightly differs from the influence of the permanently applied Lorentz force.

PULSED, MODULATED LORENTZ FORCE, ELECTROMAGNETIC STIRRING, MATHEMATICAL SIMULATION, GALINSTAN.

REFERENCES

- [1] T. Inaba, T. Kubo, Enhanced heat transfer through oscillatory flow, *J. Heat Transfer Japanese Research*. 22 (5) (1993) 480–492.
- [2] I.L. Mostinskii, D.I. Lamden, O.G. Stonik, Influence of flow pulsations on the heat and mass transfer with particles, *J. High Temperature*. 21 (4) (1983) 576–582.
- [3] E. Baake, B. Nacke, A. Jakovičs, A. Umbrāsko, Heat and mass transfer in turbulent flows with several recirculated flow eddies, *Magnetohydrodynamics*. 37(1–2) (2001) 13–22.
- [4] M. Kirpo, A. Jakovičs, E. Baake, B. Nacke, Modeling velocity pulsations in a turbulent recirculated melt flow, *Magnetohydrodynamics*. 42(2–3) (2006) 207–218.
- [5] A. Cramer, C. Zhang, S. Eckert, Local flow structures in liquid metals measured by ultrasonic Doppler velocimetry, *Flow Meas. Instrum.* 15 (3) (2005) 145–153.
- [6] G.J. Chen, Y.J. Zhang, Y.S. Yang, Modelling the unsteady melt flow under a pulsed magnetic field, *Chin. Phys. B*. 22 (12) (2013) 120302-1–120302-5.
- [7] H. Branover, E. Golbraikh, A. Kapusta, et al., Novel potentialities of electromagnetic stirring of melts in metallurgy, *Proc. the Joint 15 the Riga and 6 the PAMIR Intern. Conf. on Fundamental and Applied MHD*. (2005) 31–34.
- [8] A. Cramer, V. Galindo, M. Zennaro, Frequency dependence of an alternating magnetic field driven flow, *Magnetohydrodynamics*. 51(1) (2015) 133–148.
- [9] V.I. Dubodelov, V.N. Fixsen, V.K. Pogorsky, et al., Research of the creation process of the modulated oscillations of electromagnetic force and their use processing aluminium alloy, *Processing of the Third International Symposium on Electromagnetic Processing of Materials*. Nagoya, Japan. April 3–6 (2000) 67–72.
- [10] X. Wang, Y. Fautrelle, J. Etay, R. Moreau, A periodically reversed flow driven by a modulated traveling magnetic field: Part I, Experiments with GaInSn, *Metall. and Mater. Trans. B*. 40B (1) (2009) 82–90.
- [11] S. Eckert, P.A. Nikrityuk, D. Rabiger, et al., Efficient melt stirring using pulse sequences of a rotating magnetic field: Part I, Flow field in a liquid metal column, *Metall. Mater. Trans. B*. 38(6) (2007) 977–988.
- [12] Y. Takeda, Measurement of velocity profile of mercury flow by ultrasound Doppler shift method, *Nucl. Techn.* 79 (1) (1987) 120–124.
- [13] Y. Takeda, H. Kikura, Flow mapping of the mercury flow, *Exp. Fluids*. 32 (2) (2002) 161–169.
- [14] *Fluent 6.2 User's Guide* (ANSYS. Inc. USA, 2005).
- [15] A. Umbrāsko, Heat and mass transfer in electromagnetically driven recirculated turbulent flows (PhD thesis), Riga, University of Latvia, 2011.
- [16] E. Baake, A. Mühlbauer, A. Jakovičs, W. Andree, Extension of the k - ε model for the numerical simulation of the melt flow in induction crucible furnaces, *Metall. Mater. Trans. B*. 26(3) (1994) 529–535.
- [17] M. Albach, Z. Patz, H. Roßmanith, D. Exner, A. Stadler, Optimized winding / Optimum in power efficiency, *Pack Feindrahte* (3) (2010) 1–8.
- [18] M. Kirpo, A. Jakovičs, E. Baake, Characteristics of velocity pulsations in a turbulent recirculated melt flow, *Magnetohydrodynamics*. 41 (2) (2005) 199–210.
- [19] D. Musaeva, V. Ilin, E. Baake, V. Geža, Numerical simulation of the melt flow in an induction crucible furnace driven by a Lorentz force pulsed at low frequency, *Magnetohydrodynamics*. 51 (4) (2015) 771–785.

THE AUTHORS

MUSAEVA Diana A.

Kazan State Power Engineering University

51 Krasnoselskaya St., 420066, Kazan, Russian Federation
musaeva.d.a@gmail.com

ILYIN Vladimir K.

Kazan State Power Engineering University

51 Krasnoselskaya St., 420066 Kazan, Russian Federation
ilinwk@rambler.ru

GEŽA Vadims

University of Latvia

8 Zellu St., LV-1002 Riga, Latvia

vadims.geza@gmail.com

BAAKE Egbert

Leibniz University of Hannover

Welfengarten 1, 30167 Hannover, Germany

baake@etp.uni-hannover.de

GEOMETRIC MODELING OF MIDI-FULLERENES GROWTH FROM C_{24} TO C_{48}

Axonometric projections together with corresponding graphs for fullerenes are constructed in the range from 24 to 48. The growth of fullerenes is studied on the basis of the mechanism, according to which a carbon dimer embeds in a hexagon of an initial fullerene. This leads to stretching and breaking the covalent bonds which are parallel to arising tensile forces. In this case, instead of the hexagon adjoining two pentagons, one obtains two adjacent pentagons adjoining two hexagons. As a result, there arises a new atomic configuration and there is a mass increase of two carbon atoms. We considered direct descendents of fullerene C_{24} ; namely, C_{2n} , where $n = 13 - 24$.

FULLERENE, MODELING, GROWTH, CARBON DIMER, GRAPH, STRUCTURE.

Introduction

In Ref. [1], we have extended the term “fullerene” to include any convex shape inscribed into a spherical surface which can be composed of atoms, each atom having three nearest neighbours, as in usual fullerenes, whenever discussing hollow carbon clusters. This new approach allowed us to obtain possible forms of mini-fullerenes, from C_4 to C_{20} which, in its turn, allowed filling up a gap by including in the list of fullerenes such broad-sense fullerenes.

The next step was done in Ref. [2], where the diagrams showing the forming of mini-fullerenes from single carbon atoms and carbon dimers were suggested. The diagrams have much in common for different fullerenes. In addition to the diagrams, here for the first time the graph theory was used for analysis of the fullerene structures obtained. The graph analysis provides a deep insight into both a fullerene structure and its way of forming. The graphs, similar to the formation diagrams, have also much in common for different fullerenes. Besides the graph analysis allows also solving an inverse problem, i. e.,

how to predict the ways of producing possible fullerenes, if their graphs are known [3]. It turned out to be possible to distinguish different families of mini-fullerenes on the graph basis and therefore to make a classification of these unusual carbon structures.

In Ref. [4], we considered the problem of fullerene growth more elaborately, namely, how to design new fullerenes and their graphs if given a basic elementary graph of a mini-fullerene playing the role of progenitor. We have developed a way of designing different families of fullerenes using such approach. As a result, we have found the family of bi-polyfoils: C_{14} , C_{18} , C_{24} , C_{30} , C_{36} ; the family of truncated bipyramids: C_{14} , C_{18} , C_{24} , C_{30} , C_{36} ; the family of cupola half-fullerenes: C_{10} , C_{12} , C_{16} , C_{20} , C_{24} ; and the family of tetra-hexa-cell equator fullerenes: C_{20} , C_{24} , C_{32} , C_{40} , C_{48} . This classification gives not only fullerene symmetry but also connects it with its relatives.

It is worth noting that we have obtained a medium size fullerene C_{36} with D_{6h} symmetry. It was synthesized and separated from arc derived carbon soot at UC, Berkeley [5]. In literature, it is referred to as a 36-atom-carbon cage, but



this name is of little value because 15 different isomers are possible [6]. Contrary to this name, our classification determines this fullerene uniquely [4]. However, some midi-fullerenes, e.g., C_{26} , C_{28} [7], were not constructed in Ref. [4], so their graphs were not known. This drawback was excluded in [8] using the graph approach developed in Refs. [2 – 4].

In Ref. [9], we have suggested a unified approach to drawing axonometric projections for both small and large fullerenes. In the long run, we came to the conclusion that the best way is the dimetric representation whose symmetry coincides with that of a corresponding graph. Then we have carefully studied a dimer mechanism of growing fullerenes, according to which a carbon dimer embeds either into a hexagon or a pentagon of an initial fullerene. This leads to stretching and breaking the covalent bonds which are parallel to the arising tensile forces. In the first case, instead of the hexagon adjoining two pentagons, when the dimer embeds in this hexagon, one obtains two adjacent pentagons adjoining two hexagons. In the second case, when the dimer embeds in the pentagon, two pentagons separated by a square are obtained. In both cases there arises a new atomic configuration and there is a mass increase of two carbon atoms. This process can continue until a new stable configuration is reached. In doing so, we modeled the growth of the first branch of the family of tetra-hexa-cell equator fullerenes beginning with C_{20} in the range from 20 to 36 together with some of their isomers. We have constructed the axonometric projections and the corresponding graphs for these fullerenes.

In this contribution, we consider the direct descendants of the second branch of the family of tetra-hexa-cell equator fullerenes beginning with C_{24} , namely, C_{2n} , where $n = 12 - 24$. Our aim is to study their growth constructing at first their graphs, what is simpler, and then to develop their structure on the basis of the graphs obtained.

Tri₂-tetra₃-hexa₉ polyhedral fullerene C_{24}

Its atomic configuration consists of three equilateral triangles, three squares, and nine hexagons (Fig. 1) so it could be termed a tri₂-tetra₃-hexa₉ polyhedron. This structure

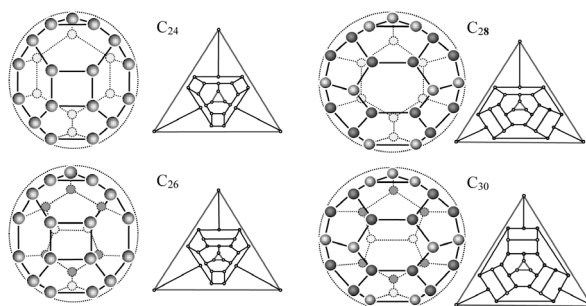


Fig. 1. Atomic structure and graphs of fullerenes C_{24} , C_{26} , C_{28} , and C_{30}

together with its consistent electronic structure was obtained in Ref. [1] on the basis of a new mathematic concept of fullerenes. According to the concept, a fullerene is any shape composed of atoms, each atom having three nearest neighbours, which can be inscribed into a spherical, ellipsoidal, or similar surface close to a sphere. But what is more important, it was suggested that not only the atoms but also the shared electron pairs forming covalent bonds, were located on one and the same sphere, ellipsoid or similar surface.

Branch of tri₂-tetra₃-hexa₉ polyhedral fullerene C_{24}

First stage. Starting with fullerene C_{24} , one can obtain the direct descendants of this fullerene with the help of the mechanism of dimer embedding into a hexagon. Taking as a basis the structure and the graph of the fullerene we have obtained the first four fullerenes and their graphs (see Fig. 1). Here fullerenes C_{24} and C_{30} are perfect (D_{3h} symmetry), and fullerenes C_{26} and C_{28} are imperfect (C_1 symmetry). In many respects, they are similar to those of the branch generated by fullerene C_{20} [3]. To gain a better understanding of the mechanism of dimer embedding, its main features are given in the form of schematic representation (Fig. 2).

Let us analyze this figure. From the configurations shown it follows that the first embedding, which transforms fullerene C_{24} into fullerene C_{26} , deeply influences only one of the hexagons and two of its square neighbours. The hexagon transforms into two adjacent pentagons and its square neighbours become pentagons. As a result, a cluster containing four pentagons

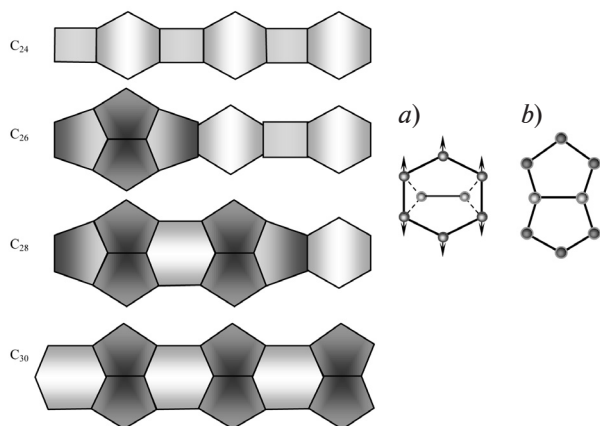


Fig. 2. Scheme reflecting the main local changes during the growth of fullerene C_{24} .
Dimer embedding into a hexagon (a) which transforms into two adjacent pentagons (b)

is obtained. The second imbedding transforms fullerene C_{26} into fullerene C_{28} . Similar to the previous case, one of the two remaining hexagons transforms into two adjacent pentagons, its square neighbour into a pentagon, and its pentagon neighbour into a hexagon. At last, the third embedding which leads from fullerene C_{28} to fullerene C_{30} , eliminates the last remaining hexagon and two its neighbouring pentagons, but, in return, creates two adjacent pentagons and two hexagons of another local orientation, so the hexa-octa-cell equator fullerene finally becomes a bow-tie-cell equator fullerene C_{32} (see Fig. 2), each bow tie having two bow-tie neighbors normal to it. It could be named a hexa-octa-cell equator fullerene where every two adjacent pentagons have the form of a bow tie. At the same time, in the pole areas there appear clusters composed of three adjacent hexagons with a trigon in their centers.

Second stage. The further growth of fullerene C_{30} differs from that of fullerene C_{24} . Fullerene C_{30} cannot grow in a manner similar to that of fullerene C_{24} , i.e., normal to the equator because now the equator hexagons have no neighbouring pentagons oriented normal to it. However, any equator hexagon can use, for its growth, two neighbouring pentagons of the equator, which are mutually antithetic. So fullerene C_{30} can continue the growth, only changing the growth direction. As a result, one obtains two imperfect fullerenes C_{32} and C_{34} with C_1 symmetry, and

one perfect C_{36} with D_{3h} symmetry (Fig. 3). To gain a better understanding of the mechanism of dimer embedding, its main features are given in the form of schematic representation (Fig. 4).

The structure of fullerene C_{36} is rather interesting. For studying this fullerene it is

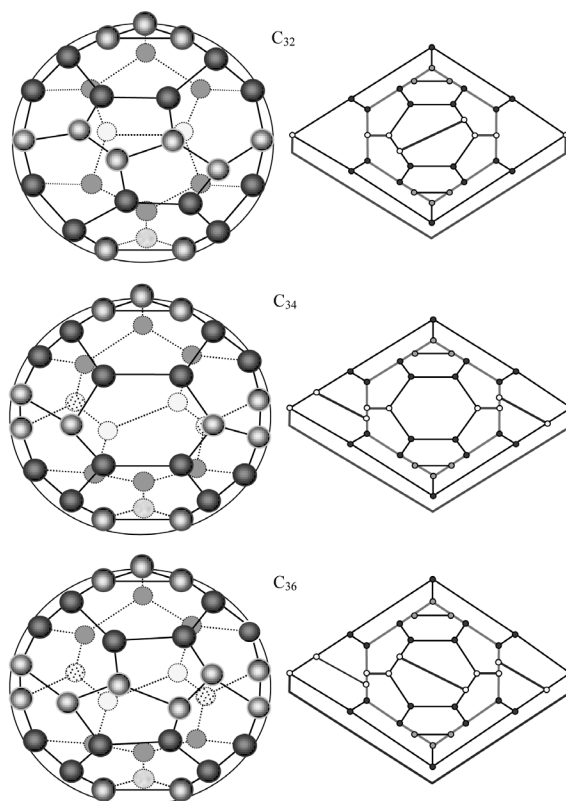


Fig. 3. Atomic structure and graphs of fullerenes C_{32} , C_{34} , and C_{36}

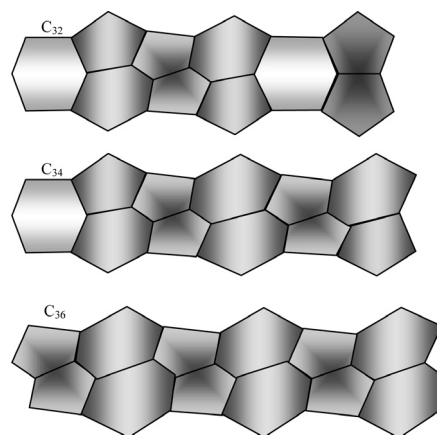


Fig. 4. Scheme reflecting the main local changes during the growth of fullerene C_{30}

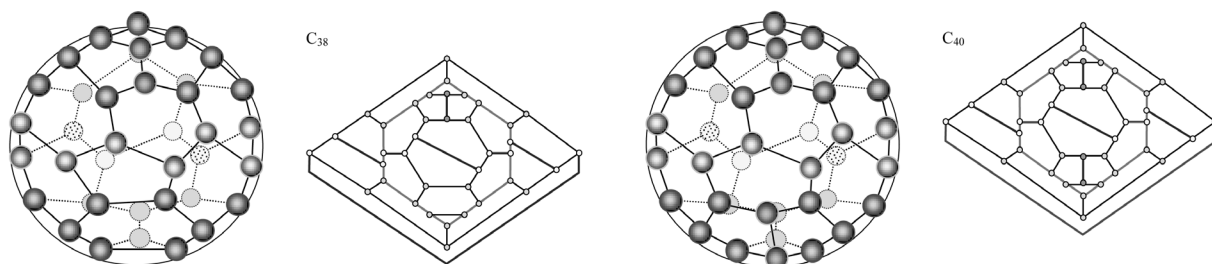


Fig. 5. Atomic structure and graphs of fullerenes C_{38} and C_{40}

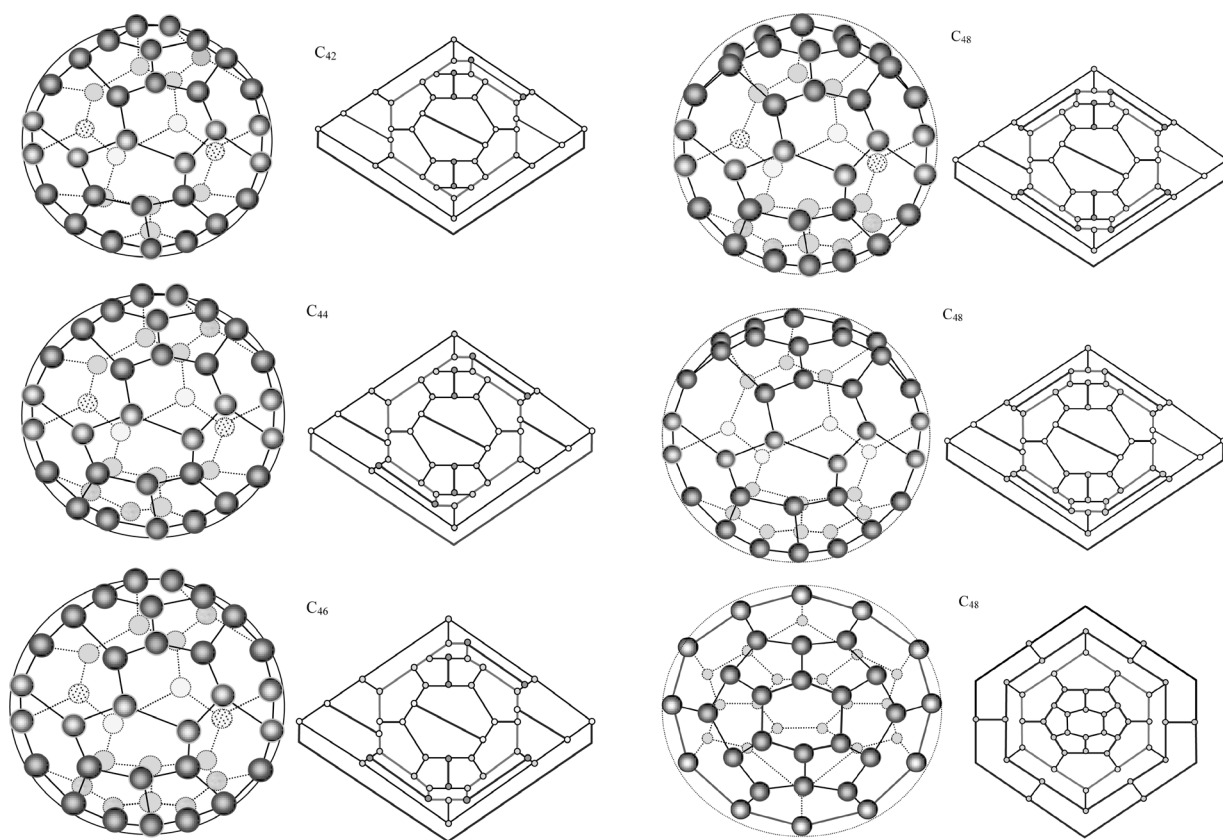


Fig. 6. Atomic structure and graphs of fullerenes C_{42} , C_{44} , and C_{46}

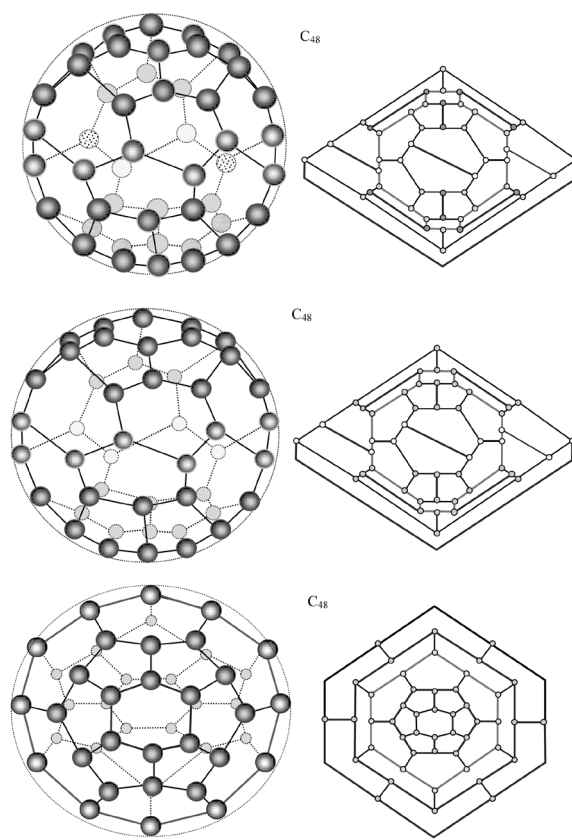


Fig. 7. Atomic structure and graphs of fullerene C_{48} .
Clusters of eighteen atoms in the polar areas;
each cluster containing six pentagons around a hexagon

convenient to use the system of coordinates where the axis z , or the main axis of symmetry, passes through the centers of two triangles. Each triangle surrounded by three hexagons forms a cluster. The clusters are separated by a zigzag ring of twelve atoms which create an equator. It is worth noting that all equator atoms are former dimer atoms. The fullerene is perfect,

and we have the group of perfect fullerenes including C_{24} , C_{30} , and C_{36} .

Third stage. Essentially, any hexagon of fullerene C_{36} of such configuration is capable of embedding a dimer, but it will more likely embed a hexagon with not only two neighbouring mutually antithetic pentagons, but one pentagon and a mutually antithetic

trigon. It is connected with the well-known fact: the less is the fullerene surface, the less is its energy. A local curvature is defined by the sum of adjacent angles having a common vertex. The less is the sum, the larger is the curvature, and therefore the more is the local stress concentration. Even the first embedding of a dimer into such a hexagon increases the sum from 300 to 330° , and thus the configuration becomes more stable.

The growth of fullerene C_{36} is shown in Figs. 5 – 7. Among the descendants there are imperfect fullerenes C_{38} , C_{42} , and C_{46} with C_1 symmetry, semi-perfect fullerenes C_{40} (C_{1h} symmetry), C_{44} (S_2 symmetry), and the perfect fullerene C_{48} (D_{6h} symmetry). The imperfect fullerenes have an odd number of dimers, the semi-perfect and the perfect fullerenes have an even number. The final high-symmetry fullerene C_{48} has the same structure as the fullerene C_{48} which was grown out earlier [6] from the fullerene C_{20} (Fig. 7, below). It contains clusters of eighteen atoms in the polar areas; each cluster is composed of six pentagons around a hexagon. This means that the problem of equifinality can arise here. This problem is well known in economic geography: a nucleus of towns can be different, but the final structure is the same; it has a center and outskirts.

Conclusion

Any calculations of fullerene energy need input data. For mini-fullerenes (up to C_{20}) the number of possible configurations is not very large, but with midi-fullerenes ($C_{20} - C_{60}$) a monstrous size of isomers can be obtained. It is clear that there is no big sense in studying all of them, so it is desirable to restrict their number to the most stable. In this respect, geometric modeling is very useful as a first step of computer simulation for further theoretical analysis [10]. As for fullerenes, the geometric modeling is based on the principle “the minimum surface at the maximum volume”. It means that a forming fullerene tends to take the form of a perfect spheroid with equal covalent bonds. We suppose that geometric modeling allows imagining from the very beginning a possible way of growing carbon clusters and thereby to decrease the number of configurations worth for studying. With the help of geometrical modeling, we

have considered here the growth of fullerenes through a series of dimer imbedding reactions with initial fullerenes.

As a result, axonometric projections together with the corresponding graphs for the second branch of the family of tetra-hexa-cell equator fullerenes including some isomers are constructed in the range from 24 to 48. Some of the graphs were obtained earlier [4] but the majority is given for the first time. The process of growth of fullerenes is studied on the basis of the mechanism, according to which a carbon dimer embeds in a hexagon of an initial fullerene. This leads to stretching and breaking the covalent bonds which are parallel to the arising tensile forces. In this case, instead of the hexagon adjoining two pentagons, two adjacent pentagons adjoining two hexagons are obtained. As a result, there arises a new atomic configuration and there is a mass increase of two carbon atoms. We considered direct descendents of the second branch of the tetra-hexa-cell-equator family beginning with C_{24} , namely, C_{2n} , where $n = 13 - 24$.

Fullerenes C_{24} , C_{30} , and C_{36} can be considered to be perfect fullerenes with a threefold symmetry. The symmetry can be easily discovered looking at their graphs. The fullerenes C_{26} , C_{28} , C_{32} , and C_{34} are imperfect. By analogy with crystal physics, it can be said that the reason for imperfection is connected with the fact that the fullerenes have extra ‘interstitial’ dimers or ‘vacant’ dimers. The structure of fullerene C_{36} is rather interesting. It has two triangles around a polar axis. Each triangle surrounded by three hexagons forms a cluster. The clusters are separated by a zigzag ring of twelve atoms which create an equator. It is worth noting that all equator atoms are former dimer atoms. Although any hexagon of fullerene C_{36} is capable of embedding a dimer, but a hexagon with not only two neighbouring mutually antithetic pentagons but one pentagon and a mutually antithetic trigon is more likely to do so. It is connected with the well-known fact; the less is the fullerene surface, the less is its energy. A local curvature is defined by the sum of adjacent angles having a common vertex. The less is the sum, the larger is the curvature, and therefore the more is the local



stress concentration. Even the first embedding of a dimer into such a hexagon increases the sum from 300 to 330°, and thus the configuration becomes more stable.

The process of growth of fullerene C_{36} leads to forming imperfect fullerenes C_{38} , C_{42} , and C_{46} , semi-perfect fullerenes C_{40} , C_{44} , and perfect fullerene C_{48} . The imperfect fullerenes have an odd number of dimers; the semi-perfect fullerenes, as well as the perfect one, have an even number. The final high-symmetry

fullerene C_{48} has the same structure as the one of fullerene C_{48} which was grown out of fullerene C_{20} [6]. It contains clusters of eighteen atoms in the polar areas; each cluster is composed of six pentagons around a hexagon. This means that there the principle of equifinality holds in this case; a nucleus of fullerenes can be different, but the final structure is the same. Therefore, the further growth of fullerene C_{48} formed in the second branch will not differ from that of the first branch.

REFERENCES

- [1] **A.I. Melker, V. Lonch**, Atomic and electronic structure of mini-fullerenes: from four to twenty, *Materials Physics and Mechanics*. 13(1) (2012) 22–26.
- [2] **A.I. Melker**, Possible ways of forming mini-fullerenes and their graphs, *Materials Physics and Mechanics*. 20(1) (2014) 1–11.
- [3] **A.I. Melker, S.A. Starovoitov, T.V. Vorobyeva**, Classification of mini-fullerenes on graph basis, *Materials Physics and Mechanics*. 20(1) (2014) 12–17.
- [4] **A.I. Melker, M.A. Krupina**, Designing mini-fullerenes and their relatives on graph basis, *Materials Physics and Mechanics*. 20 (1) (2014) 18–24.
- [5] **C. Piskoti, J. Yarger, A. Zettl**, C_{36} , a new carbon solid, *Nature*, No. 393 (1998) 771–774.
- [6] **A.M. Rao, M.S. Dresselhaus**, Nanostructured forms of carbon: an overview, In: *Nanostructured Carbon for Advanced Applications*, ed. by G. Benedek, P. Milani, V.G. Ralchenko, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001, NATO Science Series II, Mathematics, Physics and Chemistry, 24 (2001) 3–24.
- [7] **G. Benedek, M. Bernasconi, D. Donadio, L. Colombo**, Covalent clusters-assembled carbon solids, In: *Nanostructured Carbon for Advanced Applications*, ed. by G. Benedek, P. Milani, V.G. Ralchenko, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001, NATO Science Series II, Mathematics, Physics and Chemistry, 24 (2001) 89–126.
- [8] **M.A. Krupina, A.I. Melker, S.A. Starovoitov, T.V. Vorobyeva**, Structure and graphs of midi-fullerenes, *Proceedings of NDTCS' 2015*, 16 (2015) 23–26.
- [9] **A.I. Melker**, Growth of midi-fullerenes from twenty to sixty, *Proceedings of NDTCS' 2015*, 16 (2015) 34–37.
- [10] **A.I. Melker**, Dynamics of Condensed Matter, Vol. 2, Collisions and Branchings, St. Petersburg, St. Petersburg Academy of Sciences on Strength Problems, 2010, 342 p.

THE AUTHORS

MELKER Alexander I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195261, Russian Federation
newton@imop.spbstu.ru

KRUPINA Maria A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195261, Russian Federation
newton@imop.spbstu.ru

Мелькер А.И., Крупина М.А. ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА МИДИФУЛЛЕРЕНОВ ОТ C_{24} ДО C_{48} .

Построены аксонометрические проекции фуллеренов вместе с соответствующими им графами в интервале составов от 24 до 48. Рост фуллеренов изучался на основе механизма, согласно которому

димер углерода внедряется в шестиугольник исходного фуллерена. Это приводит к растяжению и разрыву ковалентных связей, которые параллельны возникающим растягивающим силам. В этом случае вместо шестиугольника, граничащего с двумя пятиугольниками, образуются два смежных пятиугольника, граничащие с двумя шестиугольниками. Как следствие, возникает новая атомная конфигурация, и масса фуллерена увеличивается на два атома углерода. Рассмотрены прямые потомки фуллерена C_{24} , а именно C_{2n} , где $n = 13 - 24$.

ФУЛЛЕРЕН. РОСТ, ДИМЕР УГЛЕРОДА, ГРАФ, СТРУКТУРА, МОДЕЛИРОВАНИЕ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Melker A.I., Lonch V.** Atomic and electronic structure of mini-fullerenes: from four to twenty // *Materials Physics and Mechanics*. 2012. Vol. 13. No. 1. Pp. 22–26.
- [2] **Melker A.I.** Possible ways of forming mini-fullerenes and their graphs // *Materials Physics and Mechanics*. 2014. Vol. 20. No. 1. Pp. 1–11.
- [3] **Melker A.I., Starovoitov S.A., Vorobyeva T.V.** Classification of mini-fullerenes on graph basis // *Materials Physics and Mechanics*. 2014. Vol. 20. No. 1. Pp. 12–17.
- [4] **Melker A.I., Krupina M.A.** Designing mini-fullerenes and their relatives on graph basis // *Materials Physics and Mechanics*. 2014. Vol. 20. No. 1. Pp. 18–24.
- [5] **Piskoti C., Yarger J., Zettl A.** C_{36} , a new carbon solid // *Nature*. 1998. No. 393. Pp. 771–774.
- [6] **Rao A.M., Dresselhaus M.S.** Nanostructured forms of carbon: an overview // In: *Nanostructured Carbon for Advanced Applications*; ed. by G. Benedek, P. Milani, V.G. Ralchenko. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2001. NATO Science Series II. Mathematics, Physics and Chemistry. 2001. Vol. 24. Pp. 3–24.
- [7] **Benedek G., Bernasconi M., Donadio D., Colombo L.** Covalent clusters-assembled carbon solids // In: *Nanostructured Carbon for Advanced Applications*; ed. by G. Benedek, P. Milani, V.G. Ralchenko. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2001. NATO Science Series II. Mathematics, Physics and Chemistry. 2001. Vol. 24. Pp. 89–126.
- [8] **Krupina M.A., Melker A.I., Starovoitov S.A., Vorobyeva T.V.** Structure and graphs of midi-fullerenes // *Proceedings of NDTCS' 2015*. 2015. Vol. 16. Pp. 23–26.
- [9] **Melker A.I.** Growth of midi-fullerenes from twenty to sixty // *Proceedings of NDTCS' 2015*. 2015. Vol. 16. Pp. 34–37.
- [10] **Мелькер А.И.** Динамика конденсированных сред. Ч. II. Столкновения и ветвления. СПб.: Санкт-Петербургская академия наук по проблемам прочности, 2014. 342 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МЕЛЬКЕР Александр Иосифович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Механика и процессы управления» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
newton@imop.spbstu.ru

КРУПИНА Мария Алексеевна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
newton@imop.spbstu.ru

*A.I. Melker, T.V. Vorobyeva*

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

FUSION REACTIONS OF CUPOLA HALF FULLERENES

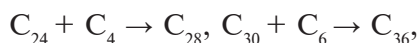
Reactions of cupola half fullerenes C_{10} , C_{12} , C_{16} , C_{20} and C_{24} with each other are considered on the basis of Arrhenius's postulate. It means that at first there forms an intermediate compound and only afterwards a usual chemical reaction is going on. We supposed that during the reactions new covalent bonds are formed and some old covalent bonds between the reacting atoms are destroyed. The final structure of a fullerene is obtained through the use of geometric modeling. As applied to fullerenes, geometric modeling supposes that a forming fullerene tends to take the appearance of a perfect spheroid with equal covalent bonds. The graphs describing the process are constructed.

CUPOLA HALF FULLERENE, FUSION REACTION, GRAPH, MODELING.

1. Introduction

Up to now the fullerene-formation mechanism is a controversial point. Research suggests that fullerene assemblage originates of individual atoms and C_2 dimers, and, probably, of very small clusters. In Ref. [1, 2], we have exhaustively investigated a dimer mechanism of fullerene growing. According to it, a carbon dimer embeds either into a hexagon or a pentagon of an initial fullerene. This leads to stretching and breaking the covalent bonds which are parallel to arising tensile forces. In both cases there arises a new atomic configuration and there is a mass increase of two carbon atoms. However, the above-stated mechanisms of fullerene growth are not unique. Fullerenes can be imagined to grow by reacting with each other, similar to a bubble growth in the soap solution.

This possibility was demonstrated by the example of such reactions as



and



through the use of a new molecular dynamics that takes into consideration both atomic and electronic degrees of freedom simultaneously, especially the excited electronic states created by electronic transitions [4 – 7]. Fullerenes and nanotubes are formed at high temperatures and

the new molecular dynamics, termed ‘charged-bond’ molecular dynamics, accounts for this factor properly. At first this molecular dynamics was developed as a rather sophisticated design, but later it obtained a strict theoretical basis [8].

Any molecular dynamics needs input data. For mini-fullerenes (up to C_{20}) the number of possible configurations is not very large, but as one passes to midi-fullerenes ($C_{20} - C_{60}$) one obtains a monstrous size of isomers. It is clear that there is no big sense in studying all of them, so it is desirable to restrict their number to the most stable. In this respect, it makes sense to use geometric modeling as a first step of a computer simulation and further theoretical analysis [9]. We suppose that the geometric modeling will allow us to envision a possible way of growing carbon clusters from the very beginning and thereby to decrease the number of configurations being worthy of further study.

In this contribution, we treat the growth of fullerenes as a series of joining reactions of cupola half fullerenes C_{10} , C_{12} , C_{16} , C_{20} , and C_{24} [5] through the use of the geometrical modeling.

2. Reaction between two base-truncated triangular pyramids

The atomic configurations corresponding to reaction



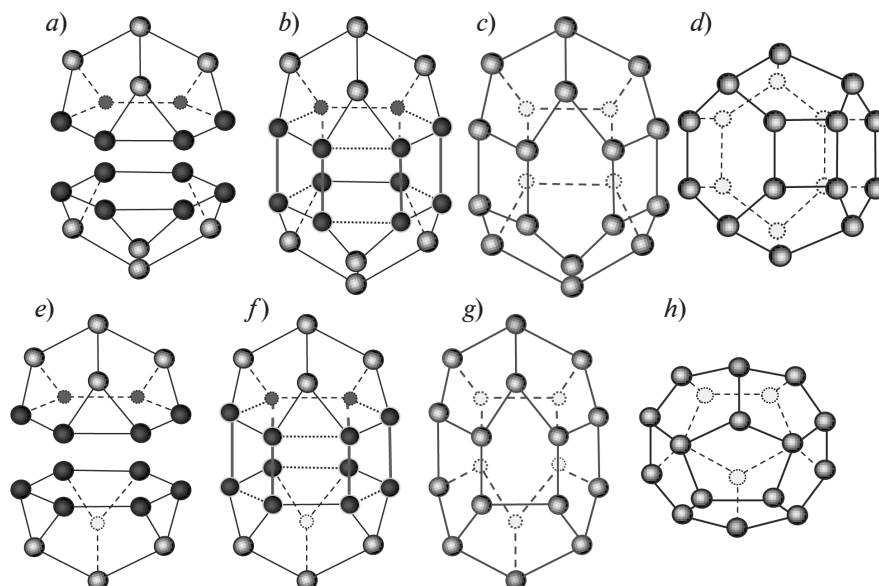


Fig. 1. Joining of two half fullerenes C_{10} with the mirror symmetry ($a - d$) and the rotation-reflection symmetry ($e - h$):

(a, e) Separate carbon cupolas C_{10} ; (b, f) Intermediate compound; (c, g) Distorted polyhedron formed; (d) (Tetra-hexa)₃-penta₆ polyhedron C_{20} ; (h) Dodecahedron C_{20} after relaxation;
Black and light-grey balls are reacting and neutral atoms, respectively; thin black solid and dashed lines are covalent bonds; light-grey dashed lines are old covalent bonds to be destroyed; heavy-black solid lines are new covalent bonds

between two base-truncated triangular pyramids C_{10} are presented in Fig. 1. At first two molecules C_{10} are moving towards each other (Fig. 1, a). Then the atoms, marked in black, interact with each other producing a compound (Fig. 1, b). New covalent bonds (heavy-black solid lines) have formed in this process, whereas the old covalent bonds between the reacting atoms (light-grey dashed lines) have splitted. As a result, a distorted polyhedron has formed (Fig. 1, c), then it relaxes into a perfect polyhedron (Fig. 1, d). The surface of its atomic configuration consists of three squares, three hexagons and six pentagons so it has been termed a (tetra-hexa)₃-penta₆ polyhedron

[1]. This structure together with its consistent electronic one was obtained in Ref. [1] on a basis of a new mathematic concept of fullerenes. According to this concept, a fullerene has any shape composed of atoms, each atom having three nearest neighbors, which can be inscribed into a spherical, ellipsoidal, or similar surface.

We have examined the case when the lower cupola is a mirror copy of the upper one. However, there is another case when the lower cupola is a rotary reflection of the upper one (Fig. 1, $e - h$). Here the reacting atoms and the broken covalent bonds are the same (Fig. 1, a, b, e, f), but due to changing the sym-

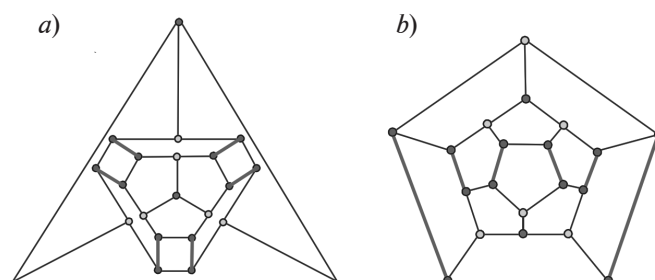


Fig. 2. Graphs of two isomers of fullerene C_{20} : (tetra-hexa)₃-penta₆ polyhedron (a) and dodecahedron (b); heavy-black lines are new covalent bonds

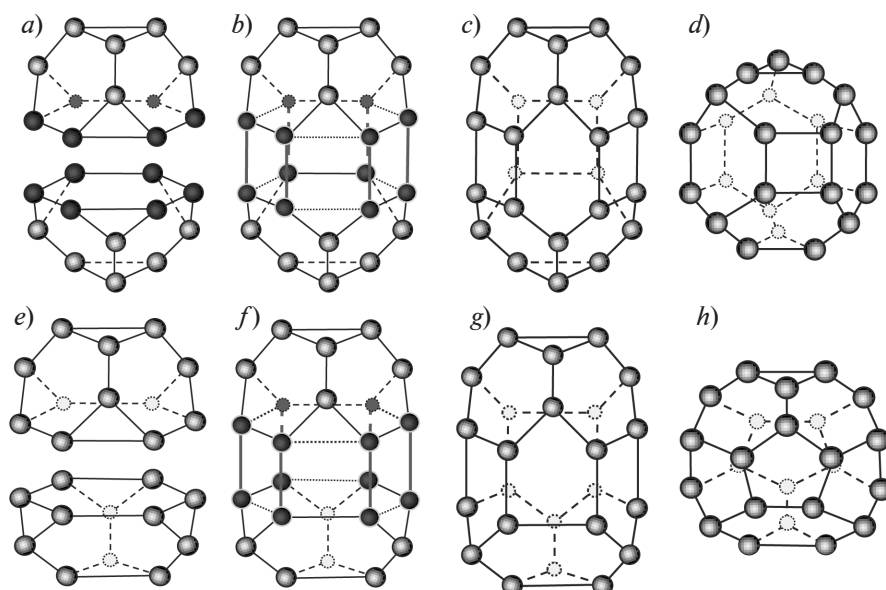


Fig. 3. Joining of two half fullerenes C_{12} . This caption is almost identical to that of Fig. 1, with the following differences: (a, e) Separate carbon cupolas C_{12} ; (d) $\text{Tri}_2\text{-tetra}_3\text{-hexa}_9$ polyhedron C_{24} ; (h) Truncated dodecahedron C_{24} after relaxation

metry at first a distorted dodecahedron is formed (Fig. 1, g). Then it relaxes into a perfect dodecahedron (Fig. 1, h).

To make clear the symmetry of the obtained fullerenes it is necessary to turn to their graphs (Fig. 2). It can be assumed that the most stable fullerenes will have the form close to a spherical one. It is apparent that the dodecahedron is more stable than the $(\text{tetra-hexa})_3\text{-penta}_6$ polyhedron. However, the latter can become more spherical if it is modified by embedding three dimers into its three hexagons [7]. In doing so it transforms into a C_{26} fullerene.

Reaction between two truncated triangular pyramids

Similar to the previous reasoning, let us consider the atomic configurations

corresponding to the reaction



between two truncated triangular pyramids C_{12} . As before, we have two joinings, mirror-symmetry and rotation-reflection-symmetry ones (Fig. 3).

The first case (see Fig. 3, d) results in the atomic configuration corresponding to a perfect polyhedron that consists of three equilateral triangles, three squares, and nine hexagons, so it could be named a $\text{tri}_2\text{-tetra}_3\text{-hexa}_9$ polyhedron. This structure was constructed in Ref. [5] on the basis of the graph theory. In the second case (see Fig. 3, h) an isomer of fullerene C_{24} considered in Ref. [6] is obtained; it is a truncated dodecahedron.

The symmetry of both polyhedrons is shown

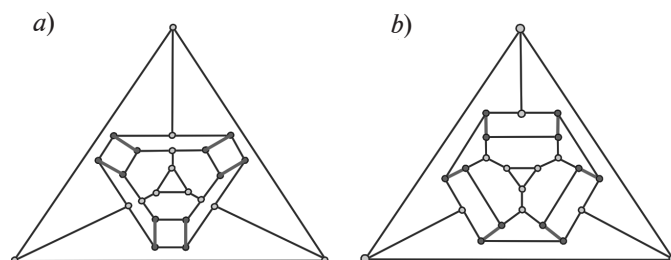


Fig. 4. Graphs of two isomers of fullerene C_{24} : $\text{Tri}_2\text{-tetra}_3\text{-hexa}_9$ polyhedron (a) and fullerene obtained by truncating two opposite vertices of a dodecahedron (b) [6]

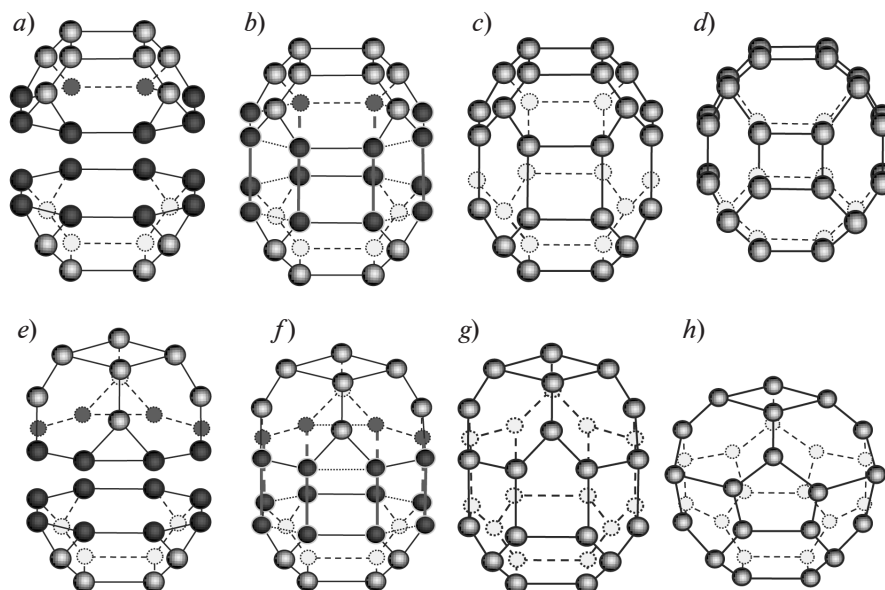


Fig. 5. Mirror-symmetry joining of two half fullerenes C_{16} . This caption is almost identical to those of Figs. 1, 3 with the following differences:
(a, e) Separate carbon cupolas C_{16} ; (d) Tetra₆-hexa₁₂ polyhedron C_{32} and (h) Tetra₂-(penta-hexa)₈ polyhedron C_{32} after relaxation

in Fig. 4. It is apparent that the truncated dodecahedron is more stable than the tri₂-tetra₃-hexa₉ polyhedron. However, the latter can become more spherical if it is modified by embedding three dimers into its three hexagons. As a result, C_{30} fullerene is obtained.

Reaction between two truncated tetra-angular pyramids

The procedure for visualization of reaction



is the same as before. In the case of mirror-symmetry joining (Fig. 5), the atomic configuration corresponding to a perfect polyhedron (see

Fig. 5, d) consists of six squares and twelve hexagons, so it could be termed a tetra₆-hexa₁₂ polyhedron. This structure was constructed in Ref. [5] on the basis of the graph theory. In the case of rotation-reflection-symmetry joining an isomer of fullerene C_{32} is obtained (Fig. 5, h); it is composed of two squares, eight pentagons and eight hexagons, so it could be termed a tetra₂-(penta-hexa)₈ polyhedron. In both cases their structure and symmetry can be described by application of their graphs. The graphs of both polyhedrons are shown in Fig. 6; they enable us to gain some insight into the symmetry of these polyhedrons. The tetra₆-hexa₁₂ polyhedron can become more spherical if it is modified by

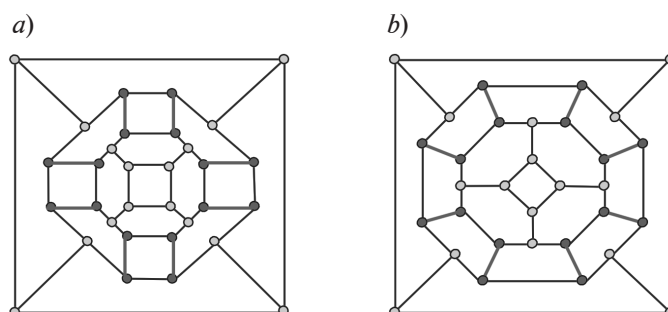


Fig. 6. Graphs of two isomers of fullerene C_{32} : Tetra₆-hexa₁₂ polyhedron (a) and Tetra₂-(penta-hexa)₈ polyhedron (b)

embedding four dimers into its four hexagons lying along an equator or a meridian. This leads to the formation of C_{40} fullerene.

Reaction between two truncated penta-angular pyramids

The procedure for visualization of reaction



is the same as before. In the case of mirror-symmetry joining (Fig. 7), the atomic configuration corresponding to a perfect polyhedron (see Fig. 7, *d*) consists of five squares, two pentagons and ten hexagons, so it could be termed a tetra₅-penta₂-hexa₁₅ polyhedron. This structure was constructed

in Ref. [5] on the basis of the graph theory. In the case of rotation-reflection-symmetry joining (Fig. 11) one obtains an isomer of fullerene C_{40} (Fig. 7, *h*) composed of twelve pentagons and ten hexagons, so it could be termed a penta₁₂-hexa₁₀ polyhedron. In both cases their structure and symmetry can be described with the help of their graphs. The graphs of both polyhedrons are shown in Fig. 8; they enable us to gain some insight into the symmetry of these polyhedrons. The tetra₅-penta₂-hexa₁₀ polyhedron can become more spherical if it is modified by embedding five dimers into its five hexagons lying along an equator, and so transforming into an isomer of fullerene C_{50} .

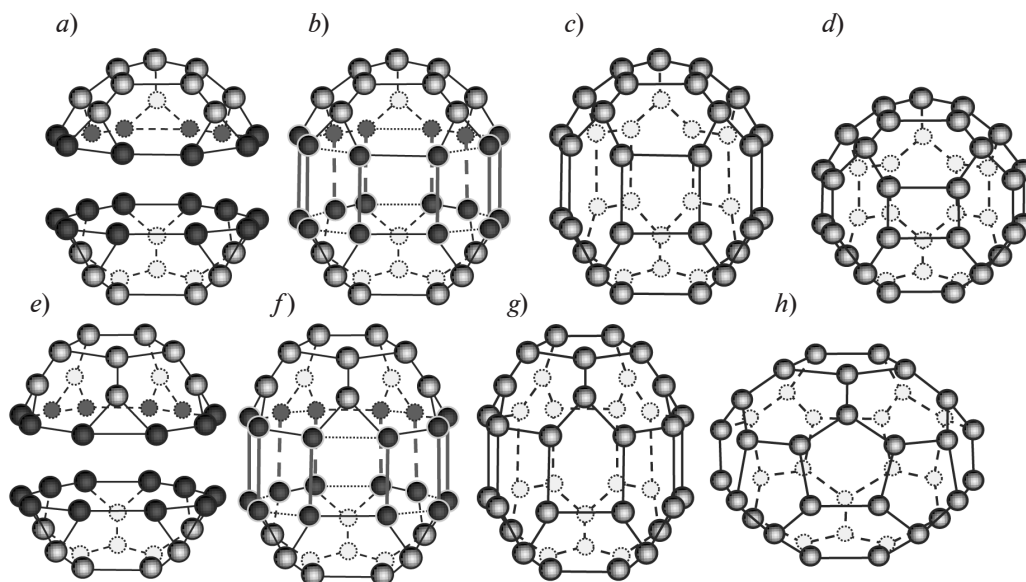


Fig. 7. Joining of two half fullerenes C_{20} . This caption is almost identical to those of Figs. 1, 3, 5 with the following difference:
(*a*, *e*) Separate carbon cupolas C_{20} ; (*d*) Tetra₅-penta₂-hexa₁₅ polyhedron C_{40} and (*h*) Penta₁₂-hexa₁₀ polyhedron C_{40} after relaxation

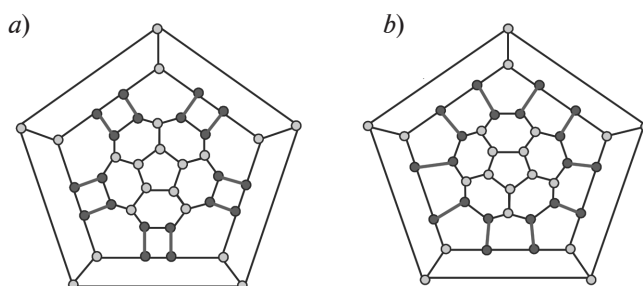


Fig. 8. The graphs of two C_{40} fullerene isomers: tetra₅-penta₂-hexa₁₅ polyhedron (*a*) and penta₁₂-hexa₁₀ polyhedron (*b*)

Reaction between two truncated hexa-angular pyramids

The procedure for visualization of reaction



is the same as before. In the case of mirror-symmetry joining (Fig. 9), the atomic configuration corresponding to a perfect polyhedron (Fig. 9, *d*) consists of six squares and twenty hexagons, so it could be termed a tetra₆-hexa₂₀ polyhedron. This structure was constructed in Ref. [5] on the basis of the graph theory. In the case of rotation-reflection-symmetry joining (Fig. 9) one obtains an isomer of fullerene C_{48} (see Fig. 9, *h*) composed of twelve pentagons and ten hexagons, so it could

be termed a penta₁₂-hexa₁₄ polyhedron. In both cases their structure and symmetry can be described using their graphs. The graphs of both polyhedrons are shown in Fig. 10; they enable us to gain some insight into the symmetry of these polyhedrons.

The tetra₅-penta₂-hexa₁₀ polyhedron can become more spherical by embedding six dimers into its six hexagons lying along an equator [21]. This leads to transforming an isomer of fullerene C_{48} into an isomer of fullerene C_{60} .

Summary

The growth of fullerenes through a series of joining reactions of cupola half fullerenes C_{10} , C_{12} , C_{16} , C_{20} , and C_{24} has been considered. We

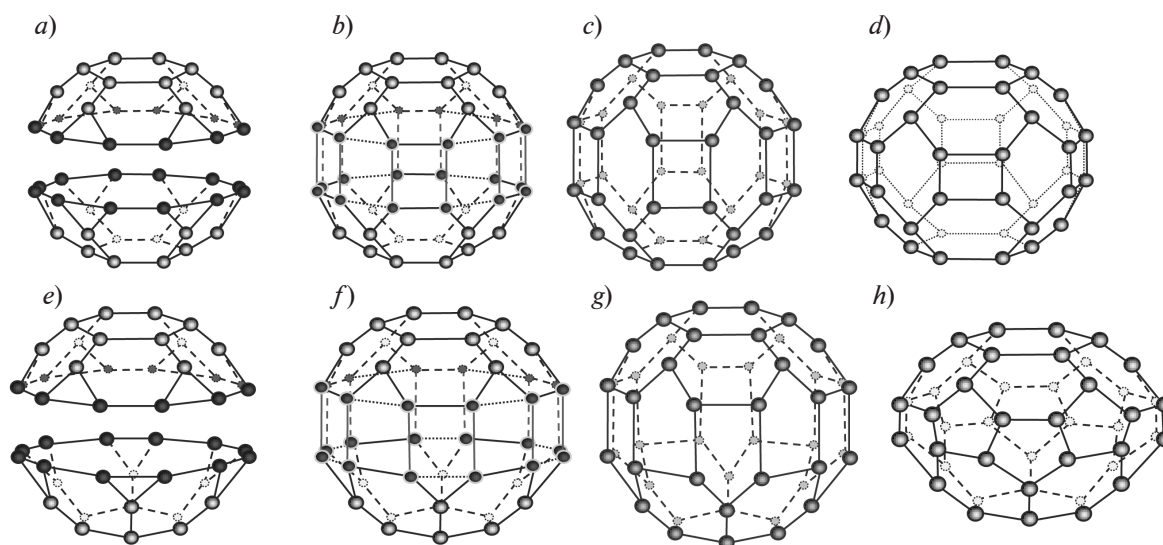


Fig. 9. Joining of two half fullerenes C_{24} . This caption is almost identical to those of Figs. 1, 3, 5, 7 with the following differences:
(*a*, *e*) Separate carbon cupolas C_{24} ; (*d*) Tetra₆-hexa₂₀ polyhedron C_{48} and (*h*) Penta₁₂-hexa₁₄ polyhedron C_{48} after relaxation

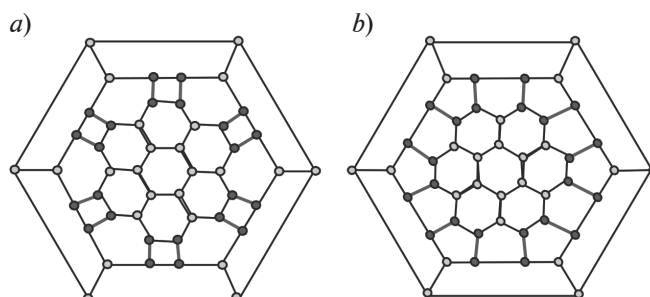


Fig. 10. Graphs of two isomers of fullerenes C_{48} : tetra₆-hexa₂₀ polyhedron (*a*) and penta₁₂-hexa₁₄ polyhedron (*b*)



supposed that during the reactions new covalent bonds are formed and some old covalent bonds between the reacting atoms are splitted. The final structure of fullerenes was obtained through the use of geometric modeling. The fullerene symmetry was shown by means of graphs constructed. As to fullerenes, the geometric modeling was based on the principle “the minimum surface at the maximum volume”. In other words, a forming fullerene tends to take the form of a perfect spheroid with equal covalent bonds.

The geometric modeling has shown its efficiency as a first step of a computer simulation, usually of molecular dynamics, and further theoretical analysis. The reason is that any molecular dynamics needs input data. For mini-fullerenes (up to C_{20}) the number of possible configurations is not very large, but by passing to half fullerenes ($C_{20} - C_{60}$), one obtains a monstrous size of isomers. It is clear that there is no big sense in studying all of them, so it is desirable to restrict their number to the most stable configuration. In this respect, the geometric modeling allows one to imagine a possible way of growing carbon clusters from the very beginning and thereby to decrease the number of configurations worth for studying.

Using geometrical modeling we obtained two families of fullerenes, each being composed of C_{20} , C_{24} , C_{32} , C_{40} , and C_{48} fullerenes. Both families have a layer structure. By analogy with geography, one can distinguish an equator zone, two temperate zones and two polar circles. The first family, designed in Ref. [5] on the graph basis, was termed the family of 4 – 6 equator fullerenes.

The second family was constructed for the first time. Its progenitor C_{20} is a pentagonal dodecahedron, the next fullerene C_{24} can be realized as a twice truncated dodecahedron along one of three-fold symmetry axis. With the exception of the dodecahedron, the other fullerenes of this family can be considered similar to the previous case. Their equator zone consists of adjacent pentagons creating a zigzag; the temperate zones are formed by hexagons; each polar circle consists of an equilateral triangle, a square, a pentagon or a hexagon, these figures defining symmetry of the related fullerene. The family progenitor C_{20} is an exception; it has six five-fold symmetry axes, ten three-fold symmetry axes and fifteen two-fold symmetry ones. For this reason its graph is given in the form reflecting its highest symmetry.

REFERENCES

- [1] **A.I. Melker, V. Lonch**, Atomic and electronic structure of mini-fullerenes: from four to twenty, *Materials Physics and Mechanics*. 13(1) (2012) 22–26.
- [2] **A.I. Melker**, Possible ways of forming mini-fullerenes and their graphs, *Materials Physics and Mechanics*. 20 (1) (2014) 1–11.
- [3] **F. Harary**, *Graph Theory*, Addison-Wesley Publishing, Reading, 1969.
- [4] **A.I. Melker, S.A. Starovoirov, T.V. Vorobyeva**, Classification of mini-fullerenes on graph basis, *Materials Physics and Mechanics*. 20(1) (2014) 12–17.
- [5] **A.I. Melker, M.A. Krupina**, Designing mini-fullerenes and their relatives on graph basis, *Materials Physics and Mechanics*. 20 (1) (2014) 18–24.
- [6] **M.A. Krupina, A.I. Melker, S.A. Starovoirov, T.V. Vorobyeva**, Structure and graphs of midi-fullerenes, *Proceedings of NDTCS' 2015.16* (2015) 23–26.
- [7] **A.I. Melker**, Growth of midi-fullerenes from twenty to sixty, *Proceedings of NDTCS' 2015. 16* (2015) 34–37.
- [8] **C. Piskoti, J. Yarger, A. Zettl**, C_{36} , a new carbon solid, *Nature*. No. 393 (1998) 771–774.
- [9] **A.I. Melker, S.N. Romanov, D.A. Kornilov**, Computer simulation of formation of carbon fullerenes, *Materials Physics and Mechanics*. 2(1) (2000) 42–50.
- [10] **D.A. Kornilov, A.I. Melker, S.N. Romanov**, New molecular dynamics predicts fullerene formation, *Proceedings of SPIE*. 4348 (2001) 146–153.
- [11] **D.A. Kornilov, A.I. Melker, S.N. Romanov**, Conformation transitions in fullerenes at non-zero temperatures, *Proceedings of SPIE*. 5127 (2003) 81–85.
- [12] **A.I. Melker**, Fullerenes and nanotubes: molecular dynamics study, *Proceedings of SPIE*. 5400 (2004) 54–64.
- [13] **A.I. Melker, M.A. Vorobyeva**, Electronic theory of molecule vibrations, *Proceedings of SPIE*. 6253 (2006) 6253–05.
- [14] **A.I. Melker**, *Dynamics of Condensed Matter*, Vol. 2, Collisions and Branchings, St. Petersburg, St. Petersburg Academy of Sciences on Strength Problems, 2010, 342 p.

THE AUTHORS

MELKER Alexander I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195261, Russian Federation

newton@imop.spbstu.ru

VOROBYEVA Tatiana V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195261, Russian Federation

newton@imop.spbstu.ru

Мелькер А.И., Воробьева Т.В. РЕАКЦИИ СИНТЕЗА КУПОЛООБРАЗНЫХ ПОЛУ-ФУЛЛЕРЕНОВ.

На основе постулата Аррениуса рассмотрены реакции синтеза куполообразных полуфуллеренов C_{10} , C_{12} , C_{16} , C_{20} и C_{24} друг с другом. Согласно постулату, вначале образуется промежуточное соединение, а затем проходит обычная химическая реакция. Предполагается, что во время реакции возникают новые ковалентные связи, а старые ковалентные связи между атомами, вступающими в реакцию, разрушаются. Конечная структура фуллерепа получена с помощью геометрического моделирования. В случае фуллеренов геометрическое моделирование предполагает, что образующийся фуллерен стремится принять форму совершенного сфероида с равными ковалентными связями. Построены графы, отражающие этот процесс.

КУПОЛООБРАЗНЫЙ ПОЛУФУЛЛЕРЕН, РЕАКЦИЯ СИНТЕЗА, ГРАФ, МОДЕЛИРОВАНИЕ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Melker A.I., Lonch V. Atomic and electronic structure of mini-fullerenes: from four to twenty // Materials Physics and Mechanics. 2012. Vol. 13. No. 1. Pp. 22–26.
- [2] Melker A.I. Possible ways of forming mini-fullerenes and their graphs // Materials Physics and Mechanics. 2014. Vol. 20. No. 1. Pp. 1–11.
- [3] Harary Frank. Graph Theory. Addison–Wesley Publishing, Reading, 1969. 300 p.
- [4] Melker A.I., Starovoitov S.A., Vorobyeva T.V. Classification of mini-fullerenes on graph basis // Materials Physics and Mechanics. 2014. Vol. 20. No. 1. Pp. 12–17.
- [5] Melker A.I., Krupina M.A. Designing mini-fullerenes and their relatives on graph basis // Materials Physics and Mechanics. 2014. Vol. 20. No. 1. Pp. 18–24.
- [6] Krupina M.A., Melker A.I., Starovoitov S.A., Vorobyeva T.V. Structure and graphs of midi-fullerenes // Proceedings of NDTCS' 2015. 2015. Vol. 16. Pp. 23–26.
- [7] Melker A.I. Growth of midi-fullerenes from twenty to sixty // Proceedings of NDTCS' 2015. 2015. Vol. 16. Pp. 34–37.
- [8] Piskoti C., Yarger J., Zettl A. C_{36} , a new carbon solid // Nature. 1998. No. 393. Pp. 771–774.
- [9] Melker A.I., Romanov S.N., Kornilov D.A. Computer simulation of formation of carbon fullerenes // Materials Physics and Mechanics. 2000. Vol. 2. No. 1. Pp. 42–50.
- [10] Kornilov D.A., Melker A.I., Romanov S.N. New molecular dynamics predicts fullerene formation // Proceedings of SPIE. 2001. Vol. 4348. Pp. 146–153.
- [11] Kornilov D.A., Melker A.I., Romanov S.N. Conformation transitions in fullerenes at non-zero temperatures // Proceedings of SPIE. 2003. Vol. 5127. Pp. 81–85.
- [12] Melker A.I. Fullerenes and nanotubes: molecular dynamics study // Proceedings of SPIE. 2004. Vol. 5400. Pp. 54–64.
- [13] Melker A.I., Vorobyeva M.A. Electronic theory of molecule vibrations // Proceedings of SPIE. 2006. Vol. 6253. P. 6253-05.
- [14] Мелькер А.И. Динамика конденсированных сред. Ч. II. Столкновения и ветвления. СПб.: Санкт-Петербургская академия наук по проблемам прочности, 2014. 342 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МЕЛЬКЕР Александр Иосифович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Механика и процессы управления» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
newton@imop.spbstu.ru

ВОРОБЬЕВА Татьяна Владимировна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
newton@imop.spbstu.ru

DOI: 10.5862/JPM.248.8

УДК: 579:53.086

К.И. Крымская, Н.В. Андреева, А.В. Филимонов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ МОДУЛЯ ЮНГА БИООБЪЕКТОВ С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР НИЖЕ КОМНАТНОЙ

В работе предлагается новая методика определения модуля Юнга биообъектов с помощью криогенной атомно-силовой микроскопии (АСМ) в температурном интервале 30 – 300 К. Новая методика основана на работе с АСМ с оптической системой регистрации положения зонда, построенной по интерферометрическому принципу. Модуль Юнга определяется из полученных данных путем расчета, учитывающего температурную зависимость модуля упругости балки зонда. В результате исследования была получена температурная зависимость модуля Юнга полилизина в температурном диапазоне 60 – 300 К.

КРИОГЕННАЯ АТОМНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ, КРИВАЯ ПОДВОДА-ОТВОДА, МОДУЛЬ ЮНГА.

Введение

Метод атомно-силовой микроскопии позволяет исследовать трибологические свойства поверхности объекта на микромасштабном уровне. В режиме спектроскопических измерений этот метод используется для изучения распределения модуля Юнга по поверхности образцов с нанометровым разрешением, для проведения качественного и количественного анализа адгезионных свойств материалов.

Механические свойства поверхности объектов играют важную роль во многих случаях их применения в биологии и медицине. При конструировании протезов, кардио- и нейростимуляторов, свойства поверхности определяют не только прочность и долговечность этих устройств, но и адгезию клеток к ним, что, в свою очередь, оказывает влияние на весь процесс адаптации организма к такого рода конструкциям.

Исследование температурной динами-

ки механических свойств клеток важны в решении проблем криобиологии, которая изучает поведение клеток и тканей при низких температурах [1, 2]. Данные свойства плазматической мембраны обуславливают механизм процесса, приводящего к разрушению клетки при обезвоживании в результате замораживания. Изучение механических свойств мембраны необходимо для подбора наилучших режимов замораживания и отогрева биообъектов, а также условий их хранения.

Клетка — это сложный объект для исследования температурной динамики механических свойств мембраны, поскольку на результаты измерений оказывают влияние разные процессы, в том числе кристаллизация льда. Поэтому перед тем, как приступать к изучению механических свойств клеток, целесообразно проводить исследование на модельных объектах, с тем, чтобы выявлять и разделять вклады от различных явлений и процессов в изменение механи-

ческих свойств клеточной мембраны при ее замораживании. В качестве такого модельного объекта мы выбрали биополимер полилизин, который представляет собой небольшой природный гомополимер незаменимой аминокислоты *L*-лизина.

Цель нашего исследования — разработка методики определения модуля Юнга методом АСМ на примере полилизина в широком диапазоне температур ниже комнатной.

Методическая часть

Для определения модуля упругости полилизина применялась методика регистрации кривых подвода-отвода. Поскольку оптическая система, которая фиксирует отклонения балки зонда в криогенном атомно-силовом микроскопе (АСМ), имеет ряд особенностей, методика регистрации указанных кривых отличалась от стандартной.

Оптическая система регистрации положения балки зонда 4 (рис. 1, а) в кри-

огенном АСМ построена по интерферометрическому принципу. Она состоит из одномодового оптоволоконна 6, полупроводникового ИК-лазера 5 с длиной волны 1330 нм и фотодетектора. Между зондом микроскопа 3-4 и отполированным концом 7 оптоволоконна 6 реализован интерферометр Фабри — Перо. Таким образом, оптоволоконно выполняет двойную функцию: с одной стороны, доставляет лазерное излучение к зонду (примерно 96 % излучения проходит через отполированный конец оптоволоконна и частично отражается зондом), с другой — образует часть интерферометра (остальное излучение отражается от границы оптоволоконно — воздух). Отраженный от зонда лазерный луч частично проходит обратно в оптоволоконно и интерферирует с лучом, отраженным от границы оптоволоконно — воздух. При отклонении зонда от исходного положения изменяется размер полости интерферометра, что соответствует изменению уровня интерферометрического сигнала и, в свою очередь, приводит к из-

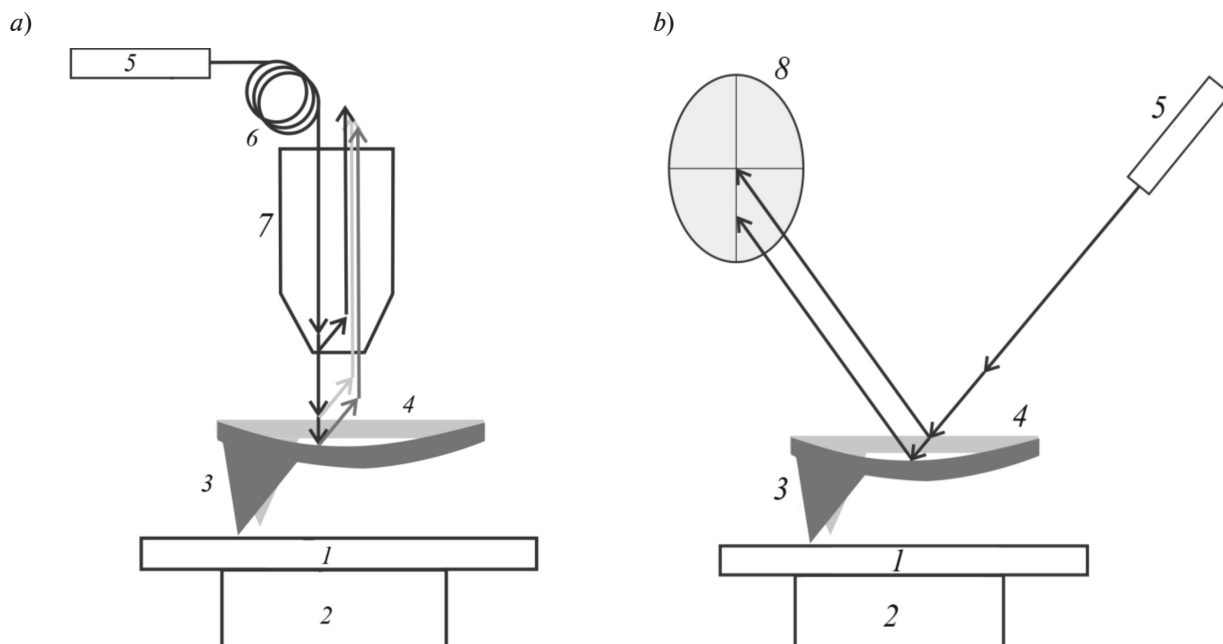


Рис. 1. Схемы оптической системы регистрации положения зонда в атомно-силовом микроскопе: построенная по интерферометрическому принципу (а) и с четырехсекционным фотодетектором (b); 1 — образец; 2 — XYZ-сканер; 3, 4 — острие и балка зонда; 5 — лазер; 7 — конец оптоволоконна 6 в увеличенном масштабе; 8 — четырехсекционный фотодетектор.

Линии со стрелками указывают распространение лазерного луча: а — 96 % излучения показано черными линиями, 4 % — серыми; б — 100% — черными линиями

менению сигнала, поступающего на фотодетектор. Процесс юстировки оптической системы, которая чувствительна к отклонению балки зонда в системе, заключается в регистрации зависимости выходного сигнала с интерферометра от размера его полости, т. е. расстояния между балкой зонда 4 и оптоволоконном 6.

Изменение размера полости интерферометра можно достичь двумя способами: либо с помощью пьезоэлемента, расположенного непосредственно под зондом (предназначен для работы АСМ в динамических режимах [3]), либо в процессе сканирования, когда острие зонда АСМ находится в контакте с поверхностью образца. В процессе калибровки оптической системы зонд не взаимодействует с поверхностью и изменение размеров полости интерферометра осуществляется с помощью пьезоэлемента.

Типичный вид интерферограммы, получаемой при калибровке оптической системы, представлен на рис. 2, а. По оси абсцисс откладывается подаваемое на пьезоэлемент напряжение V , вследствие чего он меняет свои размеры dX и двигает зонд по направлению к оптоволокну. По оси ординат откладывается уровень сигнала с выхода интерферометра dV . Расстояние между максимумами на интерферограмме соответствует половине длины волны ($\lambda/2$) полупроводникового лазера оптической системы регистрации. Уровень сигнала dV по оси ординат можно пересчитать в величину смещения острия зонда dZ по следующей формуле:

$$dZ = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \frac{dV}{\Delta V},$$

где ΔV — разность между максимальным и минимальным пропусканием интерферометра (см. рис. 2, а).

Регистрация кривых подвода-отвода для измерения механических свойств образца осуществляется следующим образом: образец 1 закрепляется на пьезосканере 2 АСМ (см. рис. 1, а), пьезосканер выдвигается к зонду 3-4, при контакте острия зонда 3 с поверхностью образца 1 на зонд начинают действовать силы упругости; это приводит

к изгибу балки зонда 4 и соответствующему изменению полости интерферометра. Характерный вид полученной таким образом кривой подвода приведен на рис. 2, б. По оси абсцисс на ней откладывается выдвижение пьезосканера dZ , по оси ординат — пропускание интерферометра (уровень сигнала) dV . Участок I соответствует ситуации, когда зонд не взаимодействует с поверхностью образца и сигнал с интерферометра максимальный; участок II характеризует изменение изгиба балки вследствие действия на зонд сил Ван-дер-Ваальса; участок III отражает контактный режим взаимодействия, когда острие зонда находится в контакте с поверхностью образца и изгиб балки уравнивает силы упругости, действующие со стороны образца на зонд. Именно этот участок III используется для расчета модуля Юнга образца.

В качестве сравнения на рис. 2, д приведен вид кривой подвода зонда к измеряемому образцу (кривая 2) для случая использования стандартной системы регистрации положения острия зонда. Такая система построена по принципу регистрации положения отраженного от зонда лазерного луча на четырехсекционном фотодетекторе (рис. 1, б). Луч, отраженный от неизогнутой балки, попадает в середину фотодетектора. При деформации балки зонда происходит смещение луча [3]. Следует отметить, что интерферометрические оптические системы обеспечивают большую точность измерений по сравнению с системами, использующими четырехсекционный фотодетектор. Так, точность измерения амплитуды колебаний зонда в динамических режимах сканирования может превышать $160 \text{ фм}/(\text{Гц})^{1/2}$ [4].

Согласно предлагаемой нами методике, для определения модуля Юнга используется участок кривой подвода, который соответствует контактному режиму взаимодействия зонд — поверхность (участок III на рис. 2, б). Острие зонда моделируется полусферой, радиус которой равен радиусу кривизны острия зонда, а образец — бесконечной полуплоскостью. Острие зонда вдавливается в поверхность образца. Экспериментально измеренная величина вдавливания используется для решения задачи Герца [5]. Ре-

шение указанной задачи определяет зависимость силы F , действующей со стороны образца на зонд, от величины вдавливания δ зонда в поверхность образца. Данная зависимость выражается формулой

$$F = \delta^{3/2} \frac{2\pi}{3} \frac{E}{1-\mu^2} R^{1/2}, \quad (1)$$

где E – модуль Юнга, R – радиус кривизны острия зонда ($R = 10$ нм), μ – коэффициент Пуассона (для биологических объектов принято считать $\mu = 0,5$).

Корректное использование модели Герца возможно лишь в том случае, если величина вдавливания зонда в поверхность образца много меньше радиуса кривизны острия зонда (в нашей работе она меньше 10 нм и условие выполнено). Это условие

ставится в теории упругости для того, чтобы исключить возникновение пластических деформаций в образце.

Основная трудность, возникающая при наших измерениях зависимости силы F от величины вдавливания δ (для определения модуля Юнга), заключается в определении точки контакта зонда с поверхностью образца на кривой подвода. Мы разработали следующую процедуру определения указанной точки. В контактном режиме сканирования за точку контакта dV_{av} принимается уровень сигнала с выхода интерферометра, соответствующий величине, средней между максимальным и минимальным значениями пропускания интерферометра $dV_{av} = \Delta V/2$ (см. рис. 2, а). Другими словами, когда зонд не взаимодействует с поверхно-

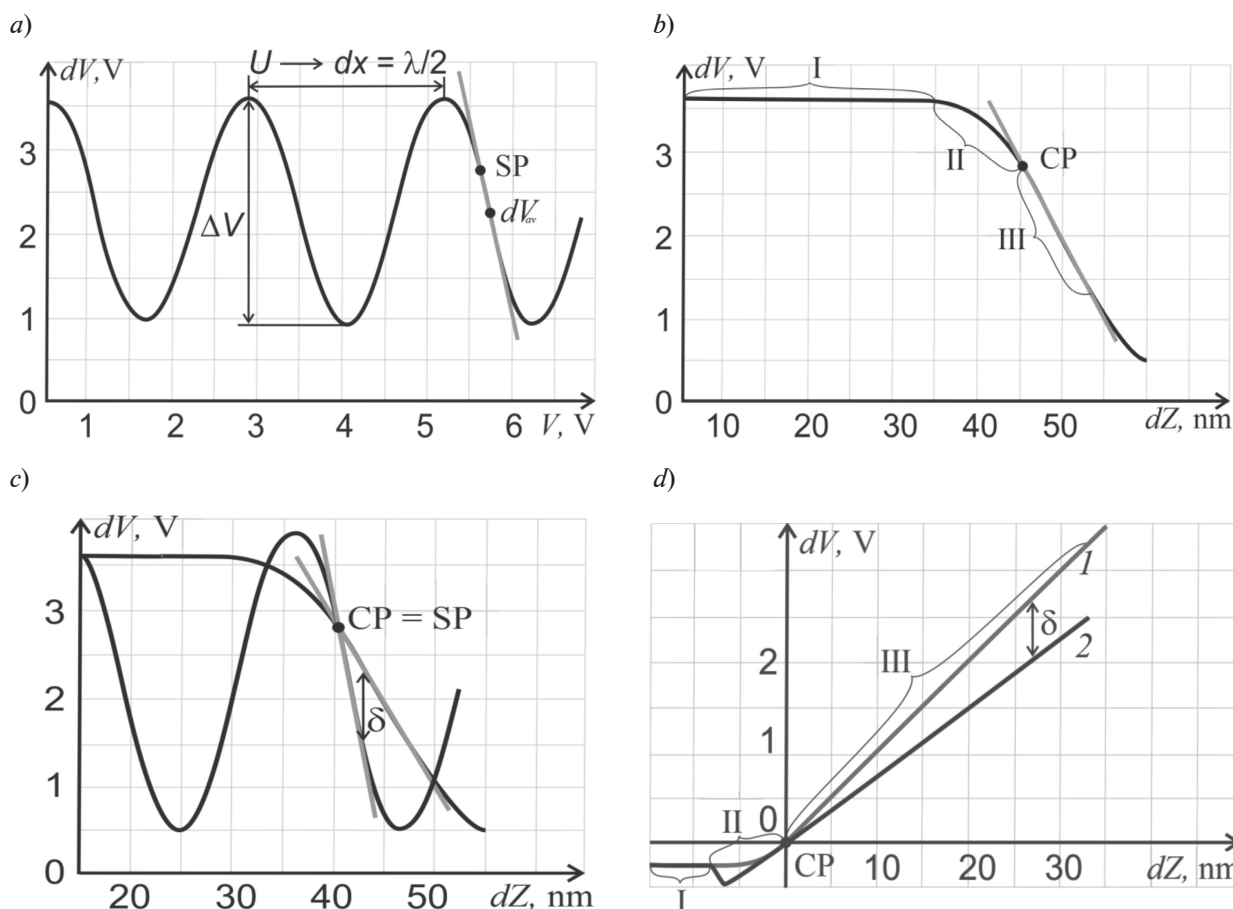


Рис. 2. Определение величины вдавливания зонда в поверхность образца (см. схему на рис. 1, а): а – калибровочная интерферограмма, б – характерный вид кривой подвода зонда к образцу, с – совмещение обеих кривых; д – кривые подвода для стандартной системы регистрации (см. рис. 1, б)

стью образца, оптическая система настраивается таким образом, что пропускание интерферометра максимально (участок I на рис. 2, *b*); при подведении зонда к поверхности образца пьезосканер выдвигается до тех пор, пока сигнал с интерферометра не упадет до величины dV_{av} . Участок в окрестности этой точки контакта является линейным в силу свойств интерферометра Фабри – Перо и соответствует его максимальной чувствительности. Мы аппроксимировали этот участок в окрестности рабочей точки контактного режима линией, а точку контакта зонда (CP (contact point) на рис. 2, *b*) с поверхностью образца определяли как точку, в которой линия кривой подвода расходитсся с аппроксимирующей прямой.

Для определения величины δ использовалась калибровочная интерферограмма (см. рис. 2, *a*). Участок в окрестности точки dV_{av} аппроксимировали прямой. По отрыву прямой от интерферограммы определялась реперная точка SP (set point), которая затем совмещалась с точкой контакта CP на кривой подвода-отвода (рис. 2, *c*). Величину δ находили как разность между значениями dV для прямых, аппроксимирующих линейные участки (см. графики на рис. 2, *a* и *b*), при значениях dZ , соответствующих точке контакта (CP) и больших.

Мы считаем, что данная процедура определения величины вдавливания зонда в поверхность образца аналогична таковой для систем, в которых используется четырехсекционный фотодетектор (см. рис. 1, *b*). В таких системах величина вдавливания вычисляется как разность δ между соответствующими значениями на кривых подвода, полученных на тестовом и на исследуемом образцах (соответственно кривые 1 и 2 на рис. 2, *d*). Эту методику можно применять и для определения жесткости балки зонда. Константа упругости тестового образца намного превосходит по величине соответствующую константу балки зонда. В этом случае зонд не будет продавливать в контактом режиме поверхность образца и кривая 1 может служить для определения константы упругости балки зонда. Разница между кривыми подвода, полученными на тестовом и на исследуемом образцах при

значениях dZ , начиная от точки контакта и больших, принимается за величину вдавливания δ . По аналогии, разница между линейными участками в окрестности dV_{av} на калибровочной интерферограмме и на кривой подвода в системах с интерферометром принимается за величину вдавливания δ (см. рис. 2, *c*).

По измеренным кривым подвода мы определяли силу, действующую на зонд со стороны поверхности образца, как произведение константы жесткости k балки зонда на величину выдвижения пьезосканера dZ (величина отложена на оси абсцисс рис. 2, *b*). Далее, для определения модуля Юнга образца строились зависимости $F(\delta)$. Полученные экспериментальные точки затем аппроксимировали зависимостью, выраженной формулой (1); для этого использовался метод наименьших квадратов, где в качестве параметра подгонки выступал модуль Юнга E . Результаты проведенного регрессионного анализа для отдельной кривой подвода приведены на рис. 3, *b*.

Одной из основных проблем при решении контактной задачи в исследованиях температурной зависимости модуля Юнга является корректное определение константы k . Последняя используется при расчете силы F , действующей со стороны образца на острие зонда в контактом режиме. Трудность заключается в том, что константа жесткости балки зонда зависит от температуры. Поэтому константу k необходимо находить для каждой температурной точки перед тем как решать задачу Герца. Для определения константы жесткости балки зонда мы использовали метод Садера [6]. Он позволяет связать константу нормальной жесткости гибкой консоли со спектром ее тепловых колебаний в среде с известными значениями вязкости и плотности. Для константы k измеряли спектр тепловых колебаний консоли зонда (краткое название – термопик) (рис. 3, *a*). Форма полученного спектра аппроксимировалась следующей функцией:

$$R(\omega) = \frac{A_0 \omega^4}{(\omega^2 - \omega_r^2)^2 + \frac{\omega^2 \omega_r^2}{Q^2}}, \quad (2)$$

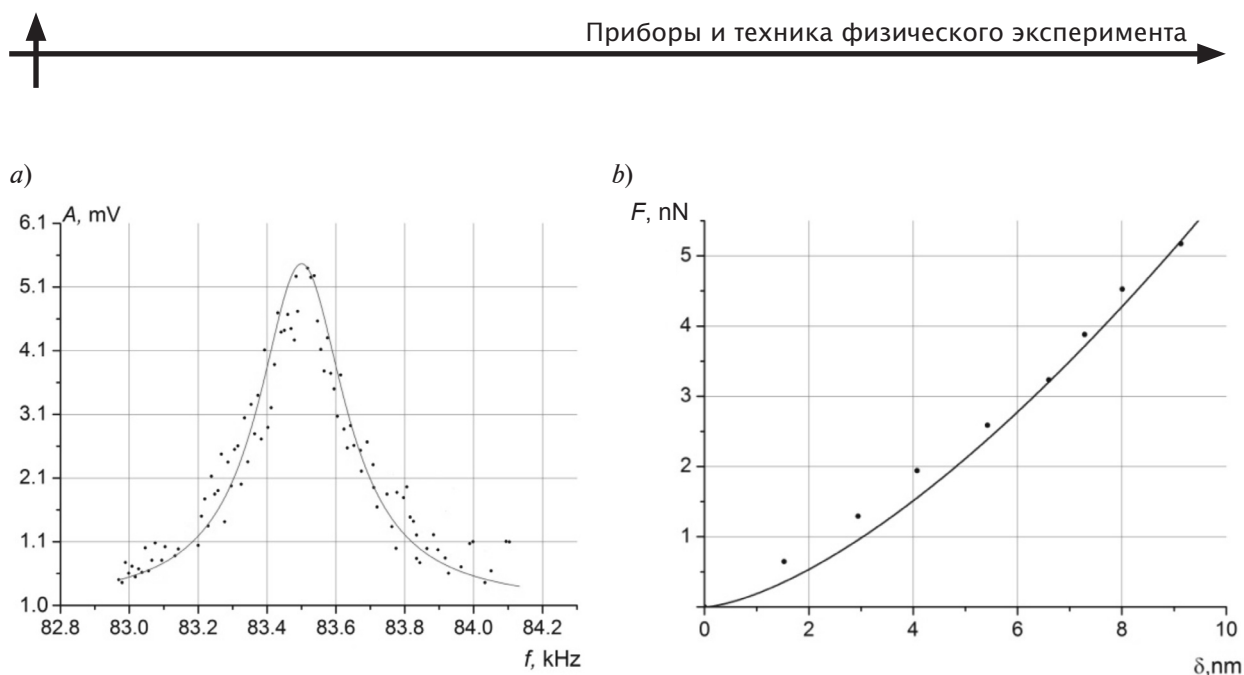


Рис. 3. Экспериментальные данные (точки) и их аппроксимации (линии) для определения модуля Юнга исследуемого образца: *a* – спектр тепловых колебаний балки зонда; *b* – зависимость силы F , действующей на зонд со стороны образца, от величины δ (глубина вдавливания зонда в поверхность образца).

Представлены результаты аппроксимаций по формулам (2) и регрессионного анализа кривой подвода по формуле (1) (соответственно *a* и *b*)

где Q – добротность, ω_r – резонансная частота свободных колебаний зонда, A_0 – амплитуда пика.

Эти подгоночные параметры затем использовались при расчете константы жесткости по формуле

$$k = 0,1906\rho b^2 L Q \omega_r^2 \Gamma(\omega, \rho, \eta, b),$$

где ρ , η – плотность и вязкость среды; b , L – ширина и длина кантилевера; Q – добротность его колебаний; ω_r – частота первого резонансного пика; Γ – мнимая компонента гидродинамической функции.

Результаты и их обсуждение

Механические свойства полилизина изучались на криогенном атомно-силовом микроскопе AttoAFM I (Attocube Systems, Германия). Для измерений были выбраны зонды NSC15 (MMAsch, Болгария) с жесткостью балки, лежащей в диапазоне 20 – 75 Н/м, и резонансной частотой 265 – 400 кГц. Использовались предметные стекла с нанесенным слоем поли-*L*-лизина толщиной 1 мкм (Yancheng Huida Medical Instruments CO, LTD, Китай).

Мы измеряли топографию поверхности образца на участке размером 15 × 15

мкм в диапазоне температур от 60 до 300 К, с шагом 30 К. На выбранной области выбирали 16 точек таким образом, чтобы расстояние между ними было не менее 1 мкм. В каждой из точек измеряли кривые подвода. Затем для каждой кривой подвода определяли модуль Юнга по описанной выше методике. Найденные значения модуля Юнга усреднялись по 16 кривым подвода. Характерный вид полученной топогра-

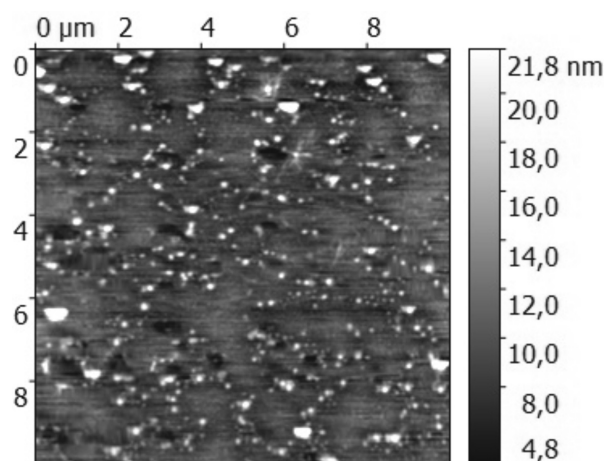


Рис. 4. Топография поверхности полилизина, полученная методом АСМ

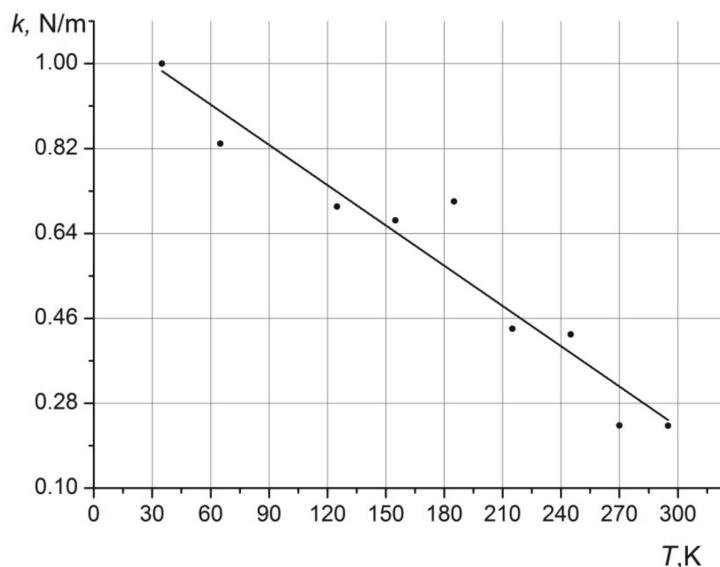


Рис. 5. Экспериментальная температурная зависимость константы жесткости балки зонда (точки) и ее аппроксимация (прямая линия)

фии поверхности полилизина приведен на рис. 4. Анализ результатов позволил заключить, что его поверхность — относительно гладкая, с небольшими круглыми включениями. Средняя шероховатость поверхности, определенная на участке 15×15 мкм, составляет 1,75 нм.

Зависимость константы жесткости балки зонда от температуры, рассчитанная по методу Садера, представлена на рис. 5. Как

следует из полученных данных, указанная константа линейно растет с уменьшением температуры, а при температуре 5 К ее значение примерно в 6 — 7 раз выше соответствующего значения при комнатной температуре.

Экспериментальные зависимости силы F , действующей на зонд со стороны образца, от величины δ для разных температур представлены на рис. 6, а.

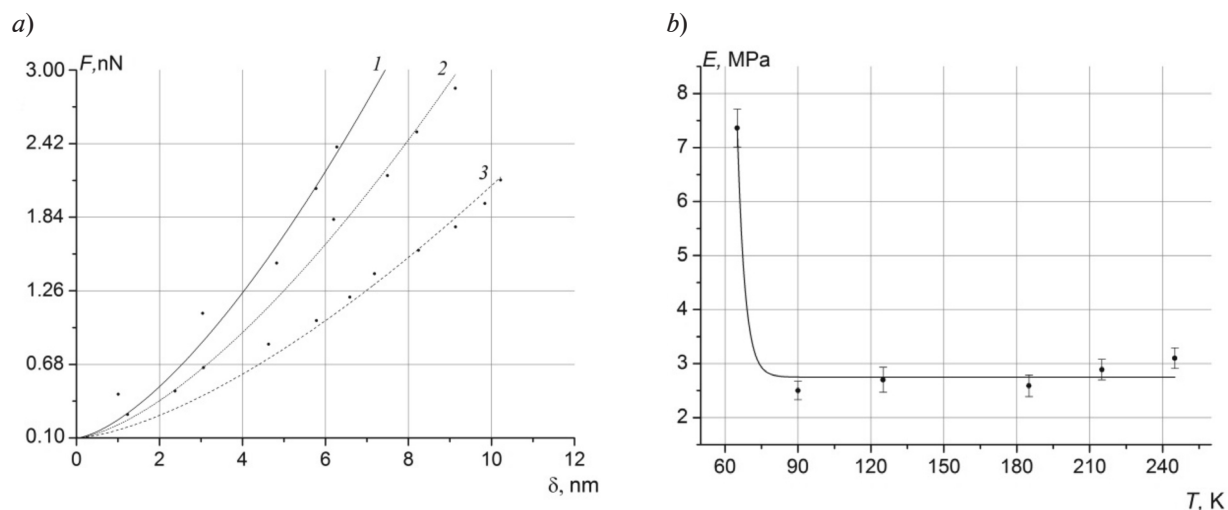


Рис. 6. Получение температурной зависимости модуля Юнга для полилизина: а — график зависимости $F(\delta)$ при температурах 125 К (1), 215 К (2), 245 К (3); б — итоговая зависимость модуля Юнга от температуры, учитывающая температурную зависимость константы жесткости балки зонда



Таблица

Зависимость модуля Юнга полилизина от температуры

Температура, К	Модуль Юнга, МПа	
	С учетом $k(T)$	Без учета $k(T)$
65	$68,40 \pm 0,23$	$7,36 \pm 0,35$
90	$17,09 \pm 2,07$	$2,50 \pm 0,17$
125	$18,96 \pm 1,90$	$2,70 \pm 0,23$
185	$12,03 \pm 2,38$	$2,59 \pm 0,20$
215	$8,39 \pm 1,75$	$2,89 \pm 0,19$
245	$7,76 \pm 0,46$	$3,10 \pm 0,19$

Примечание. $k(T)$ – температурная зависимость константы жесткости балки зонда АСМ

Для полученных экспериментальных зависимостей из решения задачи Герца были найдены модули Юнга полилизина в заданном диапазоне температур; при этом учитывалась температурная зависимость константы жесткости балки зонда АСМ (см. рис. 5). Для сравнения в таблице приведены значения модуля Юнга, вычисленные без ее учета. Установлено, что в диапазоне температур 90 – 295 К модуль Юнга полилизина плавно растет при снижении температуры (рис. 6, *b*). Согласно полученным результатам, значения модуля Юнга полилизина при $T = 90$ К в 2,5 раза превосходят соответствующие значения для комнатных температур. Ниже 90 К модуль Юнга полилизина скачкообразно (в 7 раз) увеличивается, по сравнению со значениями, полученными для комнатных температур. Наблюдаемое различие, а именно резкий скачок на температурной зависимости упругих свойств полилизина при температуре около 80 К, обусловлено, скорее всего, структурной модификацией полимера при данных условиях.

Заключение

Таким образом, нами разработана методика определения модуля Юнга поверхности образцов, при которой используется АСМ с оптической системой регистрации положения зонда, организованной по интерферометрическому принципу. Получена температурная зависимость константы жесткости балки зонда АСМ в диапазоне от 30 до 295 К. Предложенная методика использована для определения температурной зависимости модуля Юнга полилизина, при этом учитывалось изменение упругих свойств зонда АСМ в температурном диапазоне от 60 до 295 К.

Выдвинутая методика открывает новые возможности для изучения различных объектов, в том числе биологических. Ближайшая задача – использовать новую методику для изучения механических свойств клеточных мембран.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых МК 7005.2016.8.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Zhmakin A.I. Fundamentals of cryobiology // Physical Phenomena and mathematical models. Springer, 2009.
- [2] Белоус А.М. Кробиология. Киев: Наукова думка, 1994. 431 с.
- [3] Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Нижний Новгород: Изд. Института физики микроструктур РАН, 2004. 114 с.
- [4] Rugar D., Mamin H.J., Erlandsson R., Stern J.E., Terris B.D. Force microscope using a fiber-optic displacement sensor // Rev. Sci. Instrum. 1988. Vol. 59. No. 11. Pp. 2337–2340.
- [5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1987.
- [6] Sader J.E., Chon J.W.M., Mulvaney P. AFM cantilevers and force measurements // Rev. Sci. Instrum. 1999. Vol. 70. No. 10. Pp. 3967–3969.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КРЫМСКАЯ Ксения Игоревна — студентка Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ksenia.krymskaya@gmail.com

АНДРЕЕВА Наталья Владимировна — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nvandr@gmail.com

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
filimonov@rphf.spbstu.ru

Krymskaya K.I., Andreeva N.V., Filimonov A.V. A TECHNIQUE FOR DETERMINING THE YOUNG'S MODULUS OF BIOLOGICAL OBJECTS USING ATOMIC-FORCE MICROSCOPY IN THE WIDE TEMPERATURE RANGE BELOW RT.

In the paper, we suggest widening the scope of the cryogenic atomic-force microscopy in order to determine the Young's modulus of biological objects over a temperature range stretching from 30 to 300 K. A new technique assumes some modification of the arrangement for the optical system recording the probe position in the cryogenic atomic-force microscope and making measurements of approach and retraction force-distance curves under these conditions. The Young's modulus is determined from the obtained data by the calculation taking into account the temperature dependence of a cantilever spring constant. As an example we have obtained a temperature dependence of the Young's modulus for polylysine in the temperature range stretching from 60 to 300 K (RT) using the proposed technique.

CRYOGENIC ATOMIC-FORCE MICROSCOPY, FORCE-DISTANCE CURVE, YOUNG'S MODULUS.

REFERENCES

- [1] **A.I. Zhmakin**, Fundamentals of cryobiology, Physical Phenomena and mathematical models, Springer, 2009.
- [2] **A.M. Belous**, Kriobiologiya [Cryobiology], Kiev, Naukova dumka, 1994.
- [3] **V.L. Mironov**, Osnovy skaniruyushchey zondovoy mikroskopii [Fundamentals of scanning probe microscopy], Nizhniy Novgorod, Institut fiziki mikrostruktur of RAS, 2004.
- [4] **D. Rugar, H.J. Mamin, R. Erlandsson, J.E. Stern, B.D. Terris**, Force microscope using a fiber-optic displacement sensor, Rev. Sci. Instrum. 59 (11) (1988) 2337–2340.
- [5] **L.D. Landau, E.M. Lifshits**, Teoriya uprugosti [Theory of elasticity], Moscow, Nauka, 1987.
- [6] **J.E. Sader, J.W.M. Chon, P. Mulvaney**, AFM cantilevers and force measurements, Rev. Sci. Instrum. 70 (10) (1999) 3967–3969.

THE AUTHORS

KRYMSKAYA Kseniya I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
ksenia.krymskaya@gmail.com

ANDREEVA Nataliya V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
nvandr@gmail.com

FILIMONOV Aleksey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

filimonov@rphf.spbstu.ru

УЧЕТ ВЛИЯНИЯ ЭМИССИОННЫХ ПРОЦЕССОВ НА ЗАРЯД МИКРО- И НАНОЧАСТИЦ В ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЕ ДЛЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

Для описания процесса зарядки пылевой частицы в невозмущенной плазме с учетом различных видов эмиссии (вторичная, ионно-электронная, фото- и термополевая) в промежуточном режиме движения ионов используются уравнения баланса заряда и энергии, а также моментные уравнения и уравнение Пуассона. Такой подход связан с тем, что заряд пылевых частиц, определяемый параметрами указанной плазмы, существенно зависит от эмиссионных эффектов с поверхности частицы. Также значительное влияние на формирование ионного потока на поверхность пылевой частицы оказывают столкновения ионов с атомами и ионизация. Предложенная методика расчета позволяет решить выбранную систему уравнений для произвольных соотношений между длиной свободного пробега ионов, радиуса частицы и дебаевского радиуса. Показано, что эмиссия электронов снижает абсолютное значение заряда пылевой частицы. Столкновения с атомами ведут к торможению потока ионов на поверхность частицы, а толщина области возмущения плазмы растет с уменьшением частоты ионизации.

ПЫЛЕВАЯ ПЛАЗМА, ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ, СТОЛКНОВЕНИЯ ИОНОВ И АТОМОВ, ИОНИЗАЦИЯ, ЗАРЯД НАНОЧАСТИЦ.

Введение

Пылевая плазма представляет собой ионизированный газ, содержащий заряженные частицы конденсированного вещества. С помощью такой плазмы можно получать принципиально новые наноструктурированные и композитные материалы. Вопрос об электрическом заряде пылевых частиц, который они могут приобретать в плазме разряда, занимает одно из ведущих мест в физике пылевой плазмы [1]. Несмотря на то, что в ряде работ учитывается влияние столкновений и ионизации атомов газа при расчете ионного тока на поверхность частицы [2, 3], не развита теория зарядки пылевых частиц в промежуточном режиме, на стыке применимости диффузионно-дрейфового приближения

[4] и приближения ограниченного орбитального движения [5]. Активно развиваемые методы молекулярной динамики [6 – 8] или метод частиц в ячейках с розыгрышем столкновений методом Монте-Карло [9], при моделировании реальных задач оказываются сложными. Решение подобных задач осложняется наличием процессов электронной эмиссии различного типа (вторичная, ионно-электронная, фото- и термополевая) с поверхности пылевых частиц. В данной работе режим движения ионов на поверхность пылевой частицы рассматривается с использованием моментных уравнений и уравнения Пуассона. Такое рассмотрение позволяет относительно просто учесть процессы эмиссии электронов с поверхности пылевой частицы.



Система моментных уравнений и уравнение Пуассона

Для описания процесса зарядки сферической пылевой частицы радиуса a в случае промежуточного режима используем уравнения баланса частиц, уравнения движения и уравнение Пуассона [10] в сферической системе координат:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 n_i u_{ir} = n_e z_e, \quad n_e u_{er} = n_i u_{ir}, \quad (1)$$

$$T_e \frac{dn_e}{dr} = -en_e E_r - m_e n_e u_{er} v_{ea}, \quad (2)$$

$$m_i n_i u_{ir} \frac{du_{ir}}{dr} + T_i \frac{dn_i}{dr} =$$

$$= en_i E_r - \frac{m_i}{2} v_{ia} n_i u_{ir} - m_i u_{ir} n_e z_e, \quad (3)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d\phi}{dr} = -\frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e), \quad (4)$$

где r — координата, $n_{i(e)}$ — концентрация ионов (электронов), $u_{i(e)r}$ — радиальная направленная скорость ионов (электронов), z_e — частота ионизации, E_r — напряженность электрического поля, $T_{i(e)}$ — температура ионов (электронов) в энергетических единицах, $m_{i(e)}$ — масса ионов (электронов), $v_{i(e)a}$ — частота столкновений ионов (электронов) с атомами, e — элементарный заряд, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная.

Для электронов пренебрежение инерционным членом и объемными силами трения ($v_{ea} = 0$) в силу малости радиальной направленной скорости, по сравнению с хаотической скоростью, позволяет получить простое уравнение движения электронов (2) с температурой T_e . В этом случае распределение электронов является больцмановским вне зависимости от режима движения ионов на поверхность пылевой частицы. Таким образом, плотность потока электронов на частицу следует выражению

$$J_{ew} = \sqrt{\frac{T_e}{2\pi m_e}} n_{e0} \exp\left(\frac{e\phi_w}{T_e}\right), \quad (5)$$

где n_{e0} — концентрация электронов на границе области возмущения, ϕ_w — потенциал поверхности пылевой частицы.

Введем безразмерные величины:

$$s = r/a, \quad N_i = n_i/n_{e0}, \quad N_e = n_e/n_{e0},$$

$$U_i = u_{ir}/u_0, \quad \eta = -e\phi/T_e, \quad Z = eaE_r/T_e,$$

где $u_0 = \sqrt{T_e/m_i}$.

Тогда уравнения (1) — (4) будут иметь следующий вид:

$$\frac{dN_i}{ds} = \delta_i \frac{N_e}{U_i} - 2 \frac{N_i}{s} - \frac{N_i}{U_i} \frac{dU_i}{ds}, \quad (6)$$

$$\frac{dN_e}{ds} = -N_e Z, \quad (7)$$

$$N_i U_i \frac{dU_i}{ds} + \frac{T_i}{T_e} \frac{dN_i}{ds} =$$

$$= N_i Z - \delta_c N_i U_i - \delta_i N_e U_i,$$

$$\frac{dZ}{ds} = \frac{1}{\alpha^2} (N_i - N_e) - \frac{2Z}{s}, \quad Z = \frac{d\eta}{ds}. \quad (9)$$

Безразмерные параметры подобия $\alpha = \lambda_d/a$, $\delta_c = a v_{ia}/2u_0$, $\delta_i = a z_e/u_0$ определяются режимами зарядки пылевых частиц; $\lambda_d = \sqrt{\epsilon_0 T_e / e^2 n_{e0}}$ — дебаевский радиус электронов [11]; $\tau = T_e/T_a$ — нормированная температура электронов, используемая в расчетах температуры атомов (ионов), при этом

$$T_a \approx T_i = 0,026 \text{ эВ (300 К)}.$$

Вблизи пылевой частицы квазинейтральность плазмы нарушается. Характерным масштабом области возмущения плазмы является дебаевский радиус электронов λ_d . Соотношения между характерными длинами задачи a , λ_d , λ_{ia} описывают определенный режим зарядки пылевых частиц в плазме разряда. Здесь $\lambda_{ia} = 1/\sqrt{2} n_a \sigma_{ir}$ — длина свободного пробега иона, n_a — концентрация атомов, σ_{ir} — усредненное транспортное сечение столкновений ионов с атомами [12], $v_{ia} = \sqrt{8T_a/\pi m_a}/\lambda_{ia}$.

На границе области возмущения (обозначим ее r_0) потенциал, электрическое поле и радиальная направленная скорость — нулевые, а концентрация ионов и электронов могут отличаться [1], т. е.

$$u_{ir}(r_0) = 0, \quad \phi(r_0) = 0, \quad E_r(r_0) = 0,$$

$$n_i(r_0) = n_{i0}, \quad n_e(r_0) = n_{e0}.$$

Для уединенной частицы $n_{i0} = n_{e0} = n_0$, где n_0 — концентрация заряженных частиц невозмущенной плазмы; кроме того, для

указанной частицы неизвестна заранее толщина области возмущения r_0 .

Заряд (потенциал) частицы в стационарном случае определяется уравнением баланса заряда [1]:

$$J_{iw} - J_{ew} + J_{em} = 0,$$

где J_{em} — суммарная плотность потока электронов эмиссии.

Плотность потока ионов на поверхности J_{iw} , а также потенциал поверхности определяются в результате решения системы дифференциальных уравнений в области возмущения. Необходимое значение r_0 находится методом оптимизации (описан в работе [13]) по минимальному значению целевой функции

$$(J_{iw} - J_{ew} + J_{em})^2.$$

Данный подход позволяет определить размер области возмущения и получить распределение плазменных параметров в этой области, а также выражение для плотности потока ионов на поверхность частицы

$$J_{iw} = n_{e0} u_0 N_{iw} U_{iw},$$

где N_{iw} , U_{iw} — нормированные концентрация и скорость ионов на поверхности частицы.

Для плазменного кристалла толщина r_0 может превосходить радиус ячейки Зейтца — Вигнера

$$r_d = (3/4 \pi n_d)^{1/3},$$

где n_d — концентрация пылевых частиц.

В этом случае частицу нельзя рассматривать как уединенную, и в качестве оптимизируемого параметра на границе ячейки Зейтца — Вигнера следует выбрать концентрацию ионов

$$n_0 = n_i(r_d) > n_{e0}$$

при отрицательном заряде пылевых частиц и $n_0 < n_{e0}$ при их положительном заряде. При этом соблюдается квазинейтральность ячейки Зейтца — Вигнера.

Уравнения баланса частиц и энергии

Для определения заряда пылевых частиц с учетом процессов вторичной, ионно-электронной, фотоэлектронной и термоавтоэлектронной эмиссии совместно

решались уравнения баланса заряда и энергии на поверхности частиц [14]:

$$J_i = J_e - P_f [\bar{r} J_e \kappa_r + \bar{\delta} J_e \kappa_\delta + \gamma J_i \kappa_\gamma + Y J_{ph} \kappa_{pe} + J_{te} \kappa_W], \quad (10)$$

$$\begin{aligned} J_a \alpha_a 2(T_W - T_a) + J_{te} P_f \kappa_W 2T_W + a_0 \sigma_0 T_W^4 = \\ = J_i [E_a + \alpha_i (\epsilon_{iw} - 2T_W) - P_f \gamma \epsilon_\gamma \kappa_\gamma] + \\ + J_e [2T_e - P_f (\bar{r} 2T_e \kappa_r + \bar{\delta} \epsilon_\delta \kappa_\delta)] + \\ + J_{ph} (E_{ex} - P_f Y \epsilon_{pe} \kappa_{pe}), \end{aligned} \quad (11)$$

где J_i , J_e , J_{ph} , J_{th} , J_a — плотности потоков ионов, электронов, резонансных фотонов, термополевых электронов и атомов на поверхность частицы (индекс стенки W опущен с целью упрощения выражения); T_W — температура поверхности пылевой частицы; $\bar{r}$ и $\bar{\delta}$ — усредненные по функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) коэффициенты вторичной электронной эмиссии для упругоотраженных и истинно вторичных электронов [15]; γ — коэффициент ионно-электронной потенциальной эмиссии; Y — квантовый выход фотоэффекта; P_f — вероятность выхода электрона с шероховатой поверхности пылевой частицы без повторного столкновения [16]; α_a , α_i — коэффициенты аккомодации атомов и ионов [17]; σ_0 — постоянная Стефана — Больцмана; a_0 — интегральная поглощательная способность пылевой частицы (степень черноты); ϵ_{iw} , ϵ_γ , ϵ_δ , ϵ_{pe} — величины кинетической энергии ионов и вторичных электронов при ионно-электронной эмиссии, истинно вторичных электронов и фотоэлектронов; E_{ex} — энергия возбуждения резонансных уровней.

Фактор k равен единице при отрицательном заряде пылевой частицы и $\exp\{-e\phi_w/T\}$ — при положительном, так как электроны эмиссии испытывают дополнительное торможение. Температура T принимает значения T_e , T_δ , T_γ , T_{pe} [14] для соответствующих процессов и T_w — для электронов термополевой эмиссии.

В левой части уравнения баланса энергии стоят члены, учитывающие охлаждение пылевой частицы атомами, термоэлектронами и излучением, а в правой части — члены, учитывающие нагрев пылевой частицы ионами, электронами, резонансными фото-



нами и охлаждение соответствующими вторичными электронами.

В таблице приведены использованные в расчетах плотности потоков частиц и энергии, переносимых на поверхность пылевой частицы или с ее поверхности.

Результаты расчета

На рис. 1 показаны расчетные зависимости нормированного потенциала поверхности гладкой пылевой частицы от $\tau = T_e/T_a$ с учетом вышеперечисленных процессов эмиссии, включаемых в рас-

смотрение отдельно и вместе. Расчеты осуществлены по теории ограниченного орбитального движения (ООД) и по предложенной методике в режиме, который соответствует приближению ООД.

Были рассмотрены частицы из оксида алюминия Al_2O_3 в разряде неона Ne при следующих параметрах:

$$a = 1,5 \text{ мкм}, n_a = 10^{16} \text{ см}^{-3}, \quad n_{e0} = 10^{11} \text{ см}^{-3}, T_a = T_i = 300 \text{ К}. \quad (12)$$

С использованием данных параметров рассчитаны потенциалы без учета эмиссии

Таблица

Выражения и расчетные формулы для плотностей потоков и энергии частиц различного типа

Тип частиц	Плотность потоков частиц	Расчетная формула для J , $\text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$	Энергия частиц, эВ
Атомы	$J_a = n_a \sqrt{\frac{T_a}{2\pi m_a}}$	$2,69 \cdot 10^6 n_a \sqrt{\mu}$	$2T_a = 0,052$
Электроны	$J_e = n_{e0} \sqrt{\frac{T_e}{2\pi m_e}} \exp\left\{\frac{e\varphi_w}{T_e}\right\}$	$2,69 \cdot 10^6 n_{e0} \sqrt{\tau} e^{-\eta_w}$	$2T_e = 0,052\tau$
Ионы	$J_i = n_{e0} \sqrt{\frac{T_e}{m_a}} N_{iw} U_{iw}$	$6,76 \cdot 10^6 n_{e0} \sqrt{\mu\tau} N_{iw} U_{iw}$	$\varepsilon_{iw} = \begin{cases} 2T_a - e\varphi_w, & = \\ 2T_a; & \end{cases}$ $= \begin{cases} 0,026(2 - z\tau), & \eta_w > 0; \\ 0,052, & \eta_w < 0 \end{cases}$
Фотоны	$J_{ph} = J_i \frac{Q_{ex}}{\beta_i} [15]$	$6,76 \cdot 10^6 n_{e0} \sqrt{\mu\tau} N_{iw} U_{iw} \frac{Q_{ex}}{\beta_i}$	E_{ex}
Электроны термоавто-электронной эмиссии	$J_{te} = \frac{2\pi e^2}{h^2} \sqrt{\frac{m_e T_w}{2\pi}} E_w \times \exp\left(-\frac{W_0}{T_w} + \chi\right), \quad [19]$ $\chi = \frac{1}{6} \left(\frac{eh}{4\pi}\right)^2 \frac{ E_w }{m_e T_w^3}$	$8,74 \cdot 10^{21} \frac{\{T_a[\text{эВ}]\}^{3/2}}{a[\text{эВ}]} \times \sqrt{\tau_w \tau} Z_w \exp\left\{-\frac{38,5W_0}{\tau_w} + \chi\right\},$ $\chi = \frac{3,18 \cdot 10^{-13}}{T_a[\text{эВ}]\{a[\text{см}]\}^2} \frac{(Z_w \tau)^2}{\tau_w^3}$	$2T_w = 0,052\tau_w$

Обозначения: Q_{ex} — константа скорости возбуждения резонансных уровней, распадающихся спонтанно [18]; β_i — коэффициент ионизации; h — постоянная Планка. Остальные обозначения приведены в тексте.

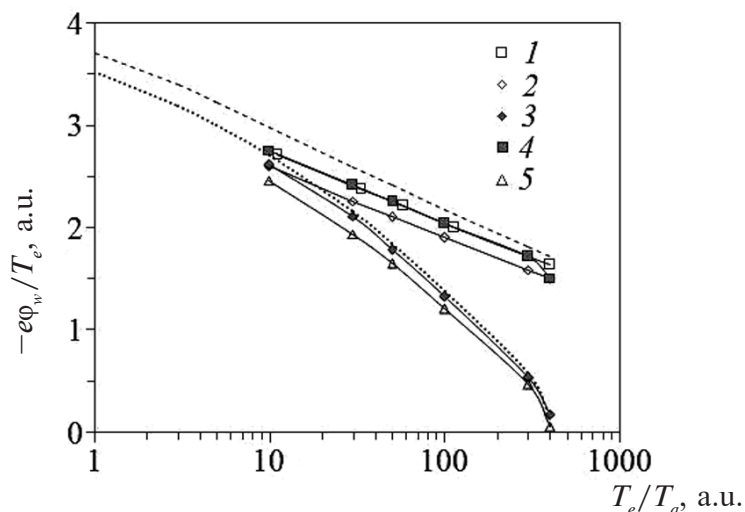


Рис. 1. Расчетные зависимости абсолютной величины потенциала поверхности гладкой пылевой частицы из Al_2O_3 в плазме неона от отношения величин температуры электронов и атомов при значениях параметров (12) без учета эмиссии (пунктирная линия) и с учетом всех ее видов (точечная линия) согласно теории ООД. Те же зависимости рассчитаны по предложенной нами методике в режиме $a \ll \lambda_d \ll \lambda_{ia}$ при следующих условиях: с учетом ионно-электронной и фотоэмиссии (2); вторичной (3) и термоавтоэлектронной (4) эмиссии; всех видов эмиссии (5), а также без эмиссии (1)

и с учетом всех типов эмиссии (см. рис. 1). По теории ООД были получены значения потенциала без учета эмиссии (пунктирная линия) и с учетом всех вышеперечисленных типов эмиссии (точечная линия). Сплошные линии относятся к результатам, полученным по предложенной методике, где каждый вид эмиссии рассматривался отдельно. Кроме того, получены результаты без учета эмиссии и с учетом совместного влияния всех видов эмиссии.

Сравнение полученных данных показывает, что результаты расчета по описанной методике близки к результатам, даваемым теорией ООД. Показано, что вторичная, ионно-электронная и фотоэмиссия с поверхности гладкой частицы снижают абсолютное значение потенциала поверхности пылевой частицы во всем рассмотренном диапазоне температур электронов. Влияние термоавтоэлектронной эмиссии на потенциал начинается с $T_e/T_a \approx 300$ и увеличивается с ростом температуры электронов. Термоавтоэлектронный эмиссионный поток становится существенным по достижении температуры поверхности определенной величины, а именно

$$T_w \geq (W_0 - e\Delta\phi)/(50 - \ln(n_{e0}, \text{см}^{-3})).$$

Расчеты показывают, что шероховатость поверхности снижает влияние эмиссии электронов, и при достаточно высокой степени шероховатости

$$(\sim 0,8)(P_f \leq 0,325, \alpha_a \geq 0,822, \alpha_i \geq 0,956 [14])$$

эмиссией можно пренебречь.

На рис. 2 приведены рассчитанные по предложенной методике пространственные распределения концентраций заряженных частиц (ионов и электронов) плазмы, абсолютных величин направленной скорости ионов и потенциала в области возмущения плазмы пылевой частицей. Вертикальные линии обозначают координаты границ областей возмущения для каждого конкретного случая. Расчеты были проведены для уединенной частицы в разряде неона без учета эмиссии, при $\lambda_d/a = 1$, для характерных при разрядных условиях значений $\delta_c = av_{ia}/2u_0$ от 0,1 до 10 и $\delta_i = az_e/u_0$ в диапазоне от 10^{-5} до 10^{-3} . С ростом частоты столкновений концентрация и направленная скорость ионов уменьшаются, что вызвано ростом влияния столкновительного члена в уравнении движения ионов.

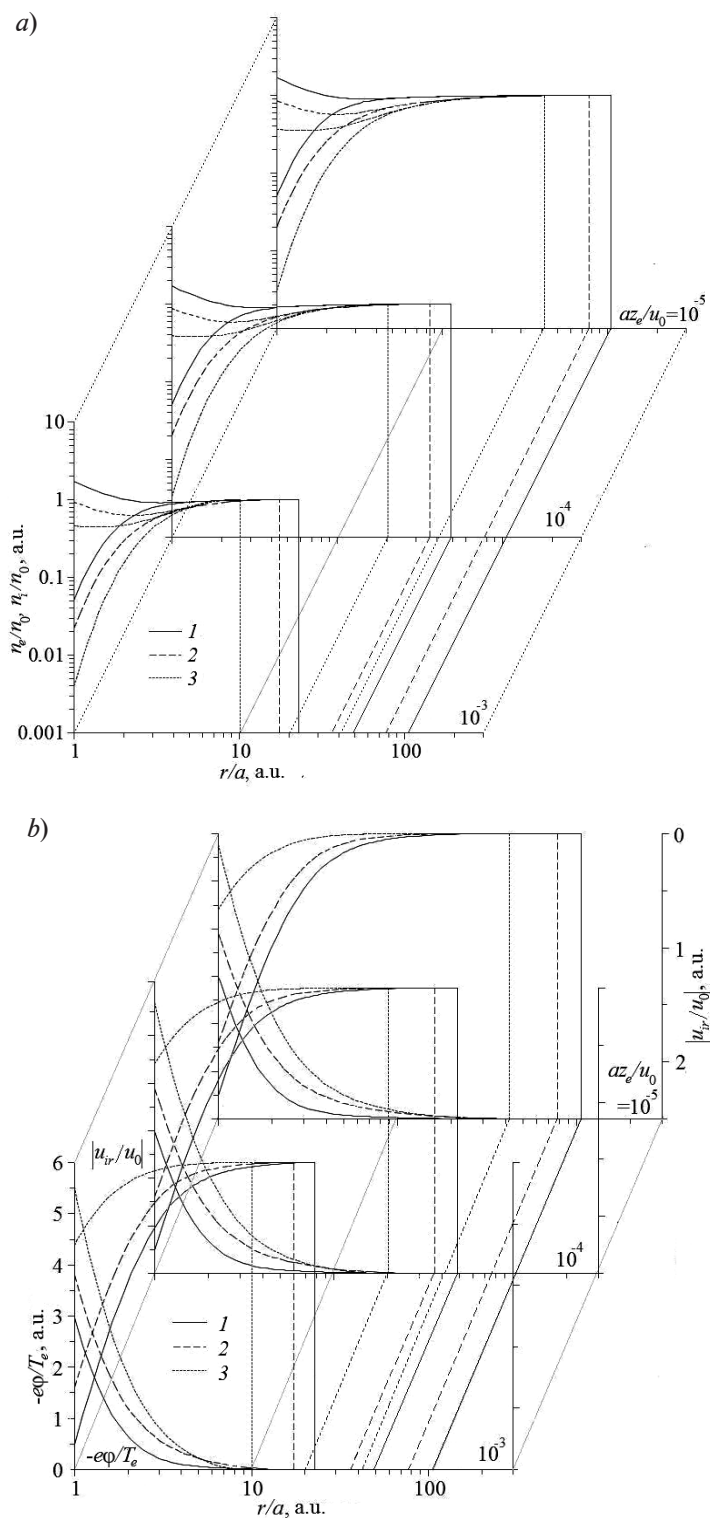


Рис. 2. Распределения концентраций заряженных частиц плазмы (а), а также абсолютного значения потенциала и направленной скорости ионов (б) в зависимости от радиальной координаты, полученные методом оптимизации при $\lambda_d/a = 1$ и в диапазоне значений az_e/u_0 от 10^{-5} до 10^{-3} для различных значений $av_{ia}/2u_0$: 0,1 (1); 1 (2); 10 (3); на рис. 2, а семейства кривых, лежащих выше, относятся к ионам, а ниже — к электронам

Уменьшение концентрации и скорости ионов означает снижение плотности ионного потока, что приводит к уменьшению плотности электронного потока (согласно уравнению баланса заряда) и, соответственно, к росту абсолютного нормированного значения потенциала на поверхности и в окрестности пылевой частицы.

Изменение частоты ионизации для уединенной частицы не сказывается на рассчитанных плазменных параметрах, так как в рассмотренном диапазоне значений $v_{ia} \gg z_e$ влияние объемного трения, вызванного столкновениями ионов и атомов, много больше влияния трения, вызванного ионизацией (на рисунках этот эффект не прослеживается). Однако уменьшение частоты ионизации приводит к увеличению толщины области возмущения.

На рис. 3 представлены графики распределения концентраций ионов и электронов, а также абсолютных значений потенциала и радиальной скорости ионов, которые показывают переход от уединенной частицы к плотной плазменно-пылевой структуре.

Приведенные графики получены при значениях параметров $\lambda_d/a = 1$, $av_{ia}/2u_0 = 1$. Кривые 1, соответствующие распределениям для уединенной частицы, получены при $az_e/u_0 = 0,001$. Кривые 2 ($az_e/u_0 = 0,01$) и 3 ($az_e/u_0 = 0,1$) соответствуют распределениям в ячейке Зейтца – Вигнера, с повышенной частотой z_e . При этом частота ионизации для значения $az_e/u_0 = 0,1$ (кривые 3) выше, чем для значения 0,01 (кривые 2); соответственно, во втором случае радиус ячейки r_{d2} будет меньше, чем в первом (r_{d1}). Величины соответствующих нормированных радиусов приведены в подписи к рис. 3.

Заключение

В настоящей работе для описания процесса зарядки пылевой частицы используются моментные уравнения и уравнение Пуассона. Предложена методика решения данной системы уравнений, позволяющая получить плотность потока ионов и потенциал на поверхности пылевой частицы, а также толщину области возмущения плаз-

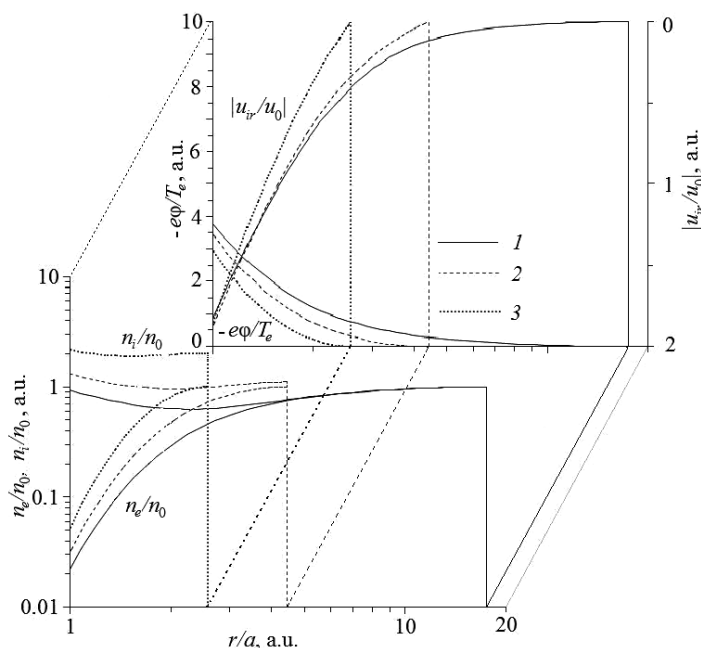


Рис. 3. Распределения концентраций заряженных частиц плазмы (n_e/n_0 и n_i/n_0), абсолютных величин потенциала ($-e\phi/T_e$) и радиальной скорости (u_r/u_0) при фиксированных значениях параметров $\lambda_d/a = 1$, $av_{ia}/2u_0 = 1$ и при разных значениях az_e/u_0 : 0,001 (1); 0,01 (2); 0,1 (3); им соответствуют нормированные радиусы $r_0/a = 17,457$ (1), $r_{d1}/a = 4,441$ (2), $r_{d2}/a = 2,574$ (3)



мы и распределения плазменных параметров в этой области с учетом столкновений, ионизации, а также эмиссии электронов и шероховатости поверхности.

Полученные результаты расчетов говорят о том, что столкновения ионов с атомами снижают плотность ионного потока на поверхность частицы и приводят к росту потенциала (заряда) по абсолютной величине. Уменьшение частоты ионизации

электронным ударом ведет к росту толщины области возмущения.

Показано, что эмиссия электронов и шероховатость поверхности оказывают значительное влияние на процесс зарядки пылевых частиц и снижают по абсолютной величине потенциал поверхности пылевой частицы. Данные процессы должны учитываться в экспериментах и теоретических моделях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Ваулина О.С., Петров О.Ф., Фортвов В.Е. Храпак А.Г., Храпак С.А. Пылевая плазма: эксперимент и теория. М.: Физматлит, 2009. 315 с.
- [2] Сысун В.И., Игнахин В.С. Радиальная теория ионного тока на зонд в плазме низкого давления с учетом объемной ионизации и столкновений с атомами // Физика плазмы. 2011. Т. 37. № 4. С. 377–386.
- [3] Crespo R.M. Complete parametrization of the plasma-sheath transition and I – V curves for a cylindrical or spherical Langmuir probe according to the features of the probe, simultaneously including geometry, ionization, and collisions // Plasma Sources Sci. Technol. 2015. Vol. 24. No. 4. P. 045012.
- [4] Филиппов А.В., Дятко Н.А., Костенко А.С. Исследование зарядки пылевых частиц в слабоионизованных инертных газах с учетом нелокальности функции распределения электронов по энергии // ЖЭТФ. 2014. Т. 146. № 5. С. 1122–1134.
- [5] Chung P.M., Talbot L., Touryan K.J. Electric probes in stationary and flowing plasmas: theory and application. New York: Springer, 1975.
- [6] Ваулина О.С., Репин А.Ю., Петров О.Ф. Эмпирическая аппроксимация для ионного тока на поверхность пылевой частицы в слабоионизованной газоразрядной плазме // Физика плазмы. 2006. Т. 32. № 6. С. 528–532.
- [7] Шелестов А.С., Сысун А.В. Моделирование процесса зарядки пылевой частицы в плазме низкого давления методом молекулярной динамики // Фундаментальные исследования. 2006. № 12. С. 74–76.
- [8] Сысун А.В., Сысун В.И., Хахаев А.Д., Шелестов А.С. Зависимость потенциала и заряда пылевой частицы от межчастичного расстояния и его установление в плазме низкого давления // Физика плазмы. 2008. Т. 34. № 6. С. 548–555.
- [9] Boeuf J.P. Characteristics of a dusty nonthermal plasma from a particle-in-cell Monte Carlo simulation // Phys. Rev. A. 1992. Vol. 46. No. 12. P. 7910.
- [10] Forrest J.P., Franklin R.N. The theory of the positive column including space-charge effects // J. Phys. D. Appl. Phys. 1968. Vol. 1. No. 10. Pp. 1357–1368.
- [11] Райзер Ю.П. Физика газового разряда. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, 2009. 736 с.
- [12] Смирнов Б.М. Физика слабоионизованного газа. М.: Наука, 1985. 424 с.
- [13] Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985. 509 с.
- [14] Мольков С.И., Савин В.Н. Влияние процессов электронной эмиссии на заряд пылевых частиц в упорядоченных плазменно-пылевых структурах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 1 (165). С. 80–85.
- [15] Мольков С.И. Влияние процессов на стенках капилляра на параметры плазмы положительного столба разряда низкого давления // Ученые записки Петрозаводского гос. ун-та. Естественные и технические науки. 2012. № 2 (123). С. 88–95.
- [16] Мольков С.И. Влияние шероховатости поверхности стенок газоразрядной камеры на работу газоразрядных лазеров // Лазеры, измерения, информация. Сб. научных трудов. Т. 1. СПб: Изд-во Политехнического ун-та, 2010. С. 14–15.
- [17] Мольков С.И., Степанов В.А. Расчет параметров плазмы разряда низкого давления с учетом элементарных процессов на поверхности стенок разрядной трубки // Электронная техника. 1986. Сер. 4, №. 4. С. 15–22.
- [18] Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982. 976 с.
- [19] Murphy E.L., Good (Jr.) R.H. Thermionic emission, field emission and transition region // Phys. Rev. 1956. Vol. 102. No. 6. Pp. 1464–1473.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

САВИН Василий Николаевич — аспирант кафедры электроники и электроэнергетики Петрозаводского государственного университета.

185910, Российская Федерация, г. Петрозаводск, пр. Ленина, 33
moped@onego.ru

МОЛЬКОВ Сергей Иванович — доктор физико-математических наук, доцент кафедры электроники и электроэнергетики Петрозаводского государственного университета.

185910, Российская Федерация, г. Петрозаводск, пр. Ленина, 33
tandem@onego.ru

Savin V.N., Mol'kov S.I. THE EFFECT OF ELECTRON EMISSION PROCESSES ON MICRO- AND NANOPARTICLE CHARGES IN THE DUSTY PLASMA: THE ACCOUNTING FOR ENGINEERING.

In this paper, the charge-balance, the energy-balance and the moment equations and Poisson's equation have been used to describe the charging process for a dust particle in the undisturbed plasma with taking into account an emission variety (secondary electron, electron-ion, thermal-field electron and photoelectron ones) in the intermediate regime of ion motion. Such an approach was associated with the fact that the dust-particle charge specified by the parameters of the above-mentioned plasma depends heavily on the electron emission from the particle surface. Collisions between ions and atoms as well as ionization also essentially affect the formation of the ion flux onto the surface of dust particles. The computational procedure put forward by us allowed solving the chosen set of equations for an arbitrary relationship between the ion mean free path, the particle radius and the Debye length. The electron emission was shown to decrease the absolute value of the dust-particle charge. Moreover, the collisions with atoms lead to the ion flux deceleration onto the particle surface whereas the depth of the disturbance space of plasma increased with decreasing the ionization frequency.

DUSTY PLASMA, ELECTRON EMISSION, ION-ATOM COLLISIONS, IONIZATION, NANOPARTICLE CHARGE.

REFERENCES

- [1] O.S. Vaulina, O.F. Petrov, V.E. Fortov, A.G. Khrapak, S.A. Khrapak, Pylevaya plazma: eksperiment i teoriya [Dusty plasma: experiments and theory]. M.: Fizmatlit, 2009.
- [2] V.I. Sysun, V.S. Ignakhin, Radialnaya teoriya ionnogo toka na zond v plazme nizkogo davleniya s uchetom ob'yemnoy ionizatsii i stolknoveniy s atomami [Radial theory of the probe ion current in the low-pressure plasma with accounting of the volume ionization and collisions with atoms], Fizika plazmy. 37 (4) (2011) 377–386.
- [3] R.M. Crespo, Complete parametrization of the plasma-sheath transition and I - V curves for a cylindrical or spherical Langmuir probe according to the features of the probe, simultaneously including geometry, ionization, and collisions, Plasma Sources Sci. Technol. 24 (4)(2015) 045012.
- [4] A.V. Filippov, N.A. Dyatko, A.S. Kostenko, Issledovaniye zaryadki pylevykh chastits v slaboionizovannykh inertnykh gazakh s uchetom nelokalnosti funktsii raspredeleniya elektronov po energii [Investigation of the dust-particle charging in the slightly ionized gases with accounting of the nonlocality of the electron energy distribution], ZhETF. 146 (5) (2014) 1122–1134.
- [5] P.M. Chung, L. Talbot, K.J. Touryan, Electric probes in stationary and flowing plasmas: theory and application, Springer, N.Y., 1975.
- [6] O.S. Vaulina, A.Yu. Repin., O.F. Petrov, Empiricheskaya approksimatsiya dlya ionnogo toka na poverkhnost pylevoy chastitsy v slaboionizovannoy gazorazryadnoy plazme [An empirical approximation for the ion current over the dusty-particle surface in the slightly ionized gas-discharged plasma], Fizika plazmy. 32 (6) (2006) 528–532.
- [7] A.S. Shelestov, A.V. Sysun, Modelirovaniye protsessov zaryadki pylevoy chastitsy v plazme nizkogo davleniya metodom molekulyarnoy dinamiki, Fundamentalnyye issledovaniya [The simulation of the process of the dusty-particle charging in the low-pressure plasma by the molecular dynamics method. Fundamental studies]. No. 12 (2006) 74–76.
- [8] A.V. Sysun, V.I. Sysun, A.D. Khakhayev, A.S. Shelestov, Zavisimost potentsiala i zaryada pylevoy chastitsy ot mezhchastichnogo rasstoyaniya i yego ustanovleniye v plazme nizkogo davleniya [The



relationship between the dusty-particle potential, its charge and an interparticle distance, and the distance determination in the low-pressure plasma], *Fizika plazmy*. 34 (6) (2008) 548–555.

[9] **J.P. Boeuf**, Characteristics of a dusty nonthermal plasma from a particle-in-cell Monte Carlo simulation, *Phys. Rev. A*. 46 (12) (1992) 7910.

[10] **J.R. Forrest, R.N. Franklin**, The theory of the positive column including space-charge effects, *J. Phys. D., Appl. Phys.* 1 (10) (1968) 1357–1368.

[11] **Yu.P. Rayzer**, *Fizika gazovogo razryada* [Physics of the gas discharge], 3d ed., Moscow, Nauka, 2009.

[12] **B.M. Smirnov**, *Fizika slaboionizovannogo gaza* [Physics of the light-ionized gas]. Moscow, Nauka, 1985.

[13] **F. Gill, U. Myurrey, M. Rayt**, *Prakticheskaya optimizatsiya* [Practical optimization], Moscow, Mir, 1985.

[14] **S.I. Molkov, V.N. Savin**, Influence of electron emission processes on the charge of dust particles in ordered plasma-dust structures, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. No. 1(165) (2013) 80–85.

[15] **S.I. Molkov**, Vliyanie protsessov na stenkakh kapillyara na parametry plazmy polozhitelnogo stolba razryada nizkogo davleniya

[An influence of the capillary-wall processes on the plasma parameters of the positive low-pressure discharge column], *Uchenyye Zapiski Petrozavodskogo Gosudarstvennogo Universiteta. Yestestvennyye i tekhnicheskiye nauki*. 2012. No. 2 (123) (2012) 88–95.

[16] **S.I. Molkov**, Vliyanie sherokhovatosti poverkhnosti stenok gazorazryadnoy kamery na rabotu gazorazryadnykh lazerov [An influence of the roughness of the gas-discharge chamber walls' surface on the gas-discharge laser operation], In: *Lazery, izmereniya, informatsiya: Sb. nauchnykh trudov*. Vol.1. St. Petersburg, Izd-vo SPbPU, 2010, 14–15.

[17] **S.I. Molkov, V.A. Stepanov**, Raschet parametrov plazmy razryada nizkogo davleniya s uchetom elementarnykh protsessov na poverkhnosti stenok razryadnoy trubki [The calculation of the parameters of the low-pressure discharge plasma with accounting of the elementary processes on the surface of the discharge tube's walls], *Elektronnaya tekhnika*. 1986. 4(4) (1986) 15–22.

[18] **L.M. Biberman, V.S. Vorobyev, I.T. Yakubov**, *Kinetika neravnovesnoy nizko-temperaturnoy plazmy* [The kinetics of the non-equilibrium low-temperature plasma], Moscow, Nauka, 1982.

[19] **E.L. Murphy, R.H. Good(Jr.)**, Thermionic emission, field emission, and transition region, *Phys. Rev.* 102 (6) (1956) 1464–1473.

THE AUTHORS

SAVIN Vasiliy N.

Petrozavodsk State University

33, Lenina Ave., 185910, Petrozavodsk, Russian Federation
moped@onego.ru

MOL'KOV Sergey I.

Petrozavodsk State University

33, Lenina Ave., 185910, Petrozavodsk, Russian Federation
tandem@onego.ru

DOI: 10.5862/JPM.248.10

УДК 599.537:534.75:534.28

В.А. Рябов

Карадагская научная станция им. Т.И. Вяземского –
природный заповедник РАН, г. Феодосия, Российская Федерация

ИЗУЧЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ И ПРЕДПОЛАГАЕМОГО РАЗГОВОРНОГО ЯЗЫКА ДЕЛЬФИНОВ

Данная статья продолжает изучение проблемы языка животных путем регистрации акустических сигналов двух квазистационарных черноморских дельфинов афалин (*Tursiops truncatus*) двухканальной системой в полосе частот до 220 кГц с динамическим диапазоном 81 дБ. Продуцируемые дельфинами пачки взаимно некогерентных импульсов (НИ) были сопоставлены с особями. Форма и спектры этих сигналов изменялись от импульса к импульсу в каждой пачке. В связи с этим было выдвинуто предположение, что набор спектральных составляющих каждого НИ представляет собой слово разговорного языка дельфина, а пачка НИ – предложение. В работе изучались особенности НИ в свете конструктивных особенностей разговорного языка человека.

ДЕЛЬФИН, РАЗГОВОРНЫЙ, ЯЗЫК, АКУСТИКА, СИГНАЛ, ПАЧКА, НЕКОГЕРЕНТНЫЙ ИМПУЛЬС.

Акустические сигналы зубатых китов разнообразны и являются их основным средством, необходимым для осуществления сложного согласованного социального поведения (добыча корма, защита от хищников, и т. п.), навигации, поддержания связи между рассеянными индивидами, получения информации об окружающей среде [1]. Следует специально отметить, что в условиях недостаточной видимости эти сигналы становятся для животных единственным сенсорным посредником.

До настоящего времени в научной литературе считается общепризнанным мнение, согласно которому у зубатых китов (*Odontoceti*) имеется сонар. Зондирующие сигналы сонара дельфинов – это щелчки длительностью около 50 мкс, с максимумом энергии на частотах около 120–130 кГц [2].

Большинство видов дельфинов продуцируют два типа звуков, которые, воз-

можно, играют роль коммуникационных сигналов в их социальных взаимоотношениях, – это пачки широкополосных импульсов и «свисты» [3]. Несколько видов дельфинов семейств *Kogiidae*, *Physeteridae*, *Phocoenidae* и подсемейства *Cephalorhynchinae* (дельфин Гектора) не продуцируют свисты и, возможно, общаются импульсными звуками [4–6].

Пачки импульсов состоят из последовательности широкополосных импульсов, сходных с эхолокационными щелчками, но в отличие от них имеют очень короткие (0,5–10 мс) межимпульсные интервалы [7] и существенно более низкие уровни звукового давления (УЗД) [2]. Наличие и функциональное назначение этих пачек остаются неясными до сих пор, несмотря на то, что предположение об их использовании дельфинами для коммуникации обсуждается еще с 1960-х гг. [6, 8, 9]. Такое предположение основано на том, что вышеопи-



санные сигналы регистрируются во время высокой социальной активности дельфинов и на малых расстояниях (2 – 14 м) от них [1], а межимпульсные интервалы у них короче времени обработки, характерного для эхолокации (15 – 45 мс). Следует отметить, что подавляющее большинство сигналов дельфинов было зарегистрировано в полосе частот лишь до 20 кГц (см., например, работы [8, 10]), за редким исключением [6, 7].

Многие виды дельфинов производят продолжительные частотно-модулированные (ЧМ) акустические сигналы, содержащие большое количество гармоник, n -кратных фундаментальной частоте (n – целое число). Человек воспринимает такие сигналы как свист, поэтому их стали называть свистами.

Практически сразу после первой регистрации свистов был изучен и описан репертуар контекстно-специфических свистов, которые изменяются в соответствии с ситуацией или активностью животных [11 – 13].

Большинство видов дельфинов, которые производят сигналы-свисты, являются стайными особями и живут большими группами, поэтому было выдвинуто предположение, что свисты играют важную роль для социальной коммуникации животных [14 – 16]. То, каким образом такие сигналы можно использовать для коммуникации – наиболее частый предмет дискуссии в научной литературе. В современных исследованиях было показано, что фундаментальная частота большинства свистов охватывает диапазон частот 2 – 35 кГц, а частоты гармоник – до 100 кГц [7, 17 – 19]. Однако до настоящего времени неясны как необходимость, так и функциональное назначение гармоник свиста, которые являются его неотъемлемой составной частью.

В последнее время обсуждается гипотеза о свистах «автографах», согласно которой дельфины пользуются ими, чтобы оповещать сообщество о своей личности и положении в пространстве других членов социальной группы [20, 21]. Эта гипотеза нашла поддержку среди многочисленных работ (см., например, [16, 22, 23]).

Было также выдвинуто предположение о коммуникативной функции свистов, т. е. что они служат для установления связи, координации действий и поддержания сплоченности в группе животных, рассеянных по акватории [16]. На основе данных о максимальном УЗД свиста, чувствительности слуха дельфина, уровне окружающих шумов и затухании звука с расстоянием была рассчитана максимальная дистанция, на которую дельфины могут устанавливать связь с использованием свистовых сигналов. Она составила около 10,5 км [24].

Материал вышеприведенного краткого обзора указывает на большой интерес исследователей к изучению акустических сигналов дельфинов. В то же время только эхолокационные щелчки исследованы наиболее полно, в полосе частот до 200 кГц, при известном положении дельфина относительно гидрофона. Подавляющее большинство других типов сигналов дельфинов зарегистрированы и описаны в полосе частот до 20 кГц. Кроме того, акустические сигналы записывались с использованием оборудования, имеющего недостаточный динамический диапазон; при регистрации сигналов не учитывался импульсный характер звуков и положение дельфинов относительно гидрофона (животные свободно плавали). Возможно, что именно поэтому авторам работ не удалось однозначно определить, какие акустические сигналы животных можно считать коммуникационными.

В то же время, для изучения функциональности акустических сигналов дельфинов весьма перспективной оказалась впервые использованная методика регистрации сигналов двух квазистационарных дельфинов с использованием двухканальной системы записи [25 – 27]. Эта методика впервые позволила определить принадлежность каждого сигнала конкретному животному, зафиксировать последовательность обмена разными типами сигналов между дельфинами, динамику изменения характеристики направленности излучения и формы сигналов, классифицировать и интерпретировать функциональность сигналов в свете теории сигналов и эхолокации. Сигналы дельфинов были разделены на следующие классы:

последовательность ультракоротких сверхширокополосных когерентных импульсов (щелчки);

пачки взаимно некогерентных импульсов (НИ);

пачки взаимно когерентных импульсов (КИ);

пачки универсальных импульсов (УИ);

ЧМ-симултоны с равномерно распределенными тонами (свисты).

Результаты исследований дают основания рассматривать все акустические сигналы дельфинов в качестве зондирующих сигналов не одного сонара (как это обсуждалось раньше), а по меньшей мере шести различных типов сонаров. В то же время в работах [25 – 27] было высказано предположение о том, что НИ представляют собой сигналы высокоразвитого разговорного языка дельфинов.

Цель настоящей работы – достоверное измерение и анализ некогерентных импульсов как наиболее вероятных акустических сигналов предполагаемого разговорного языка дельфинов.

Объекты и методы исследования

Эксперименты выполнялись на двух

взрослых черноморских бутылконосых дельфинах вида афалина (*Tursips truncatus*) с кличками Яша (самец) и Яна (самка), в закрытом бетонном бассейне размерами $27 \times 9,5 \times 4,5$ м Федерального государственного бюджетного учреждения науки (ФГБУН) «Карадагская научная станция им. Т.И. Вяземского – природный заповедник РАН» (г. Феодосия). Дельфины живут в бассейне около 20 лет и обладают нормальным слухом. Уровень воды в бассейне 4 м. Конфигурация эксперимента приведена на рис. 1, а.

Регистрация акустических сигналов, продуцируемых дельфинами Яной (1) и Яшей (2), выполнялась без специальной дрессировки и без пищевого подкрепления дельфинов. Были использованы промежутки времени, когда они сами по привычке подплывали к мосткам 5 (расположены на 0,1 м выше уровня воды) и держались у водной поверхности почти без движения (квазистационарно) (рис. 1, б). Сигналы регистрировались двухканальной системой записи, которая фиксировала момент времени прихода каждого сигнала на гидрофон своего канала. Принадлежность каждого сигнала конкретному дельфину и иден-

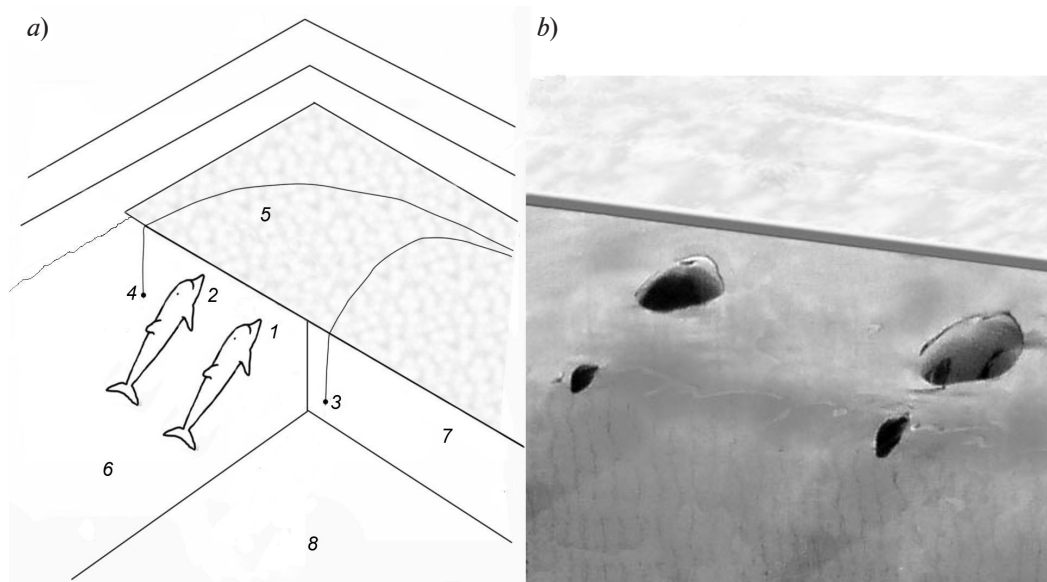


Рис. 1. Конфигурация эксперимента (а) и фотография квазистационарного положения дельфинов во время записи звуков (б).

Позиции 1, 2 – дельфины Яна и Яша, соответственно; 3, 4 – гидрофоны первого (I) и второго (II) каналов; 5 – мостки; 6, 7 – длинная и короткая стенки бассейна; 8 – его дно



тификация НИ устанавливалась во время анализа двухканальной записи, с учетом межканальных временных задержек каждого сигнала, межканальной разности амплитуд звукового давления данного сигнала, а также известных расстояний от гидрофонов до дельфинов и границ бассейна.

Расстояние между гидрофонами I и II каналов (база записи – 3,5 м) было выбрано таким, чтобы получить необходимую для последующего анализа межканальную разницу временных задержек и амплитуд УЗД каждого акустического сигнала на гидрофонах. Расстояние между дельфинами было около 1 м. В то же время гидрофоны были расположены в дальнем акустическом поле дельфина, на расстояние ~ 1,5 м. Гидрофоны были погружены на глубину 1 м, чтобы, по возможности, снизить вероятность экранирования сигналов, идущих в направлении гидрофонов, дальних от каждого дельфина, телом другого животного. Кроме того, для оценки влияния реверберации бассейна на записываемые сигналы, гидрофоны были расположены таким образом, чтобы один из них (4) находился близко у стенки бассейна, а другой (3) – посередине бассейна (см. рис. 1, а). Расстояние между гидрофоном 4 и стенкой 6 составляло 0,45 м, а от

гидрофонов 3 и 4 до стенки 7 было 3 м. Технические характеристики использованного оборудования представлены в табл. 1.

Использовались сферические гидрофоны, изготовленные из пьезокерамики. Каждый канал записи сигналов состоял из гидрофона, усилителя напряжения и одного из каналов многоканального аналого-цифрового преобразователя (АЦП). Оцифрованные сигналы дельфинов с АЦП непрерывно записывались на жесткий диск ноутбука. Запись и обработка сигналов осуществлялись пакетами программ PowerGraph 3.3.8 и Adobe Audition 3.0. Спектры сигналов были рассчитаны с использованием быстрого преобразования Фурье на 4096 точек с весовой функцией Хэмминга. Во время записи сигналов никаких других животных в бассейне не было.

Экспериментальные результаты

Одна из характерных записей, отображающих последовательность взаимно некогерентных импульсов, продуцированных Яной и Яшей, показана на рис. 2. Дельфины излучали импульсные звуки пачками с временными интервалами между пачками, превышающими во много раз межимпульсные интервалы в пачке. Длительность импуль-

Таблица 1

Технические характеристики использованного оборудования

Параметр	Единица измерения	Значение
<i>Гидрофоны</i>		
Диаметр	мм	14
Калиброванная чувствительность гидрофона I канала гидрофона II канала	дБ относительно 1 В/мкПа (мкВ/Па)	–203,5(66,5) –206,0 (50,0)
Неравномерность частотной характеристики до 160 кГц до 220 кГц	дБ	±3 ±10
<i>Каналы записи</i>		
Фильтр верхних частот	кГц	0,1
Усилитель напряжения	дБ	40
Разрядность АЦП (USB-3000)	–	14
Динамический диапазон АЦП	дБ	81
Частота дискретизации каждого канала	МГц	1

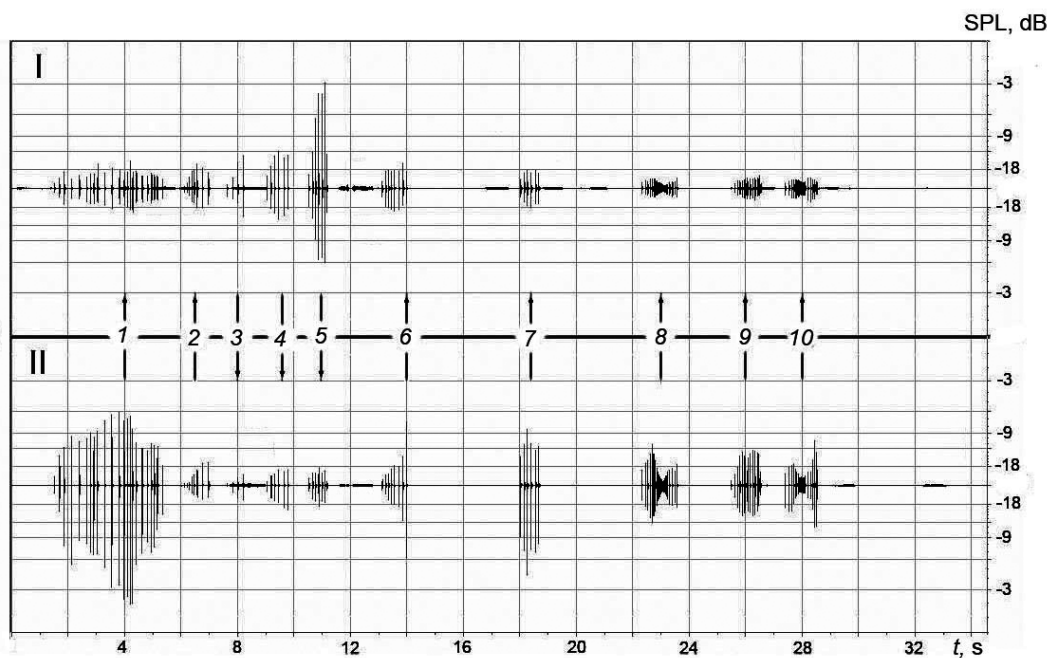


Рис. 2. Пример записей, отображающих последовательность пачек НИ, продуцированных Яной (стрелки вниз) и Яшей (стрелки вверх).

Нумерация пачек соответствует их последовательности; I, II – номера каналов записи. Уровень звукового давления (SPL) акустических импульсов нормирован на 350 Па

сов в пачках изменялась от 0,08 до 0,60 мс, причем ее средняя величина составляла около 0,25 мс. Незначительное различие межканальных УЗД каждого сигнала (менее 16 дБ) указывает на отсутствие высокой направленности излучения НИ. Для каждого импульса в пачке характерна сложная форма, которая изменяется от одного импульса к другому в каждой пачке НИ. В связи с этим спектр каждого импульса также изменялся от одного импульса к другому.

В качестве примера на рис. 3 показаны форма и спектр первых четырех НИ пачки 5 (см. рис. 2), продуцированных Яной. Эти сигналы были мной классифицированы в соответствии с теорией сигналов и эхолокации как взаимно некогерентные импульсы (НИ) [25 – 27]. Амплитудный спектр этих импульсов имел много максимумов и минимумов и покрывал весь диапазон частот слуха дельфина, от 6 – 15 до 160 – 200 кГц. Однако амплитудные спектры сигналов (см. рис. 3) показаны только до 160 кГц, так как слуховые пороги афалины начинают существенно возрастать на

частотах выше 135 кГц. Уровень звукового давления импульсов (см. рис. 2) изменялся от 15 до 330 Па; пачки НИ содержали от 4 до 27 импульсов; межимпульсные интервалы находились в диапазоне от 19 до 300 мс.

Обсуждение результатов

Анализ многочисленных НИ, зарегистрированных в наших экспериментах, показал, что дельфины продуцировали пачки импульсов по очереди, не перебивая друг друга, следовательно, резонно полагать, что каждый из дельфинов выслушивал НИ другого, прежде чем продуцировать свои НИ. В этом случае направления стрелок возле цифр на рис. 2, обозначающих номер каждой пачки НИ, указывают направления передачи сообщения (от Яши к Яне или обратно), т. е. обмен НИ. По существу, такой обмен напоминает разговор между двумя людьми. В этом случае принципиальное отличие обмена информацией дельфинов от разговора людей состоит в характеристиках акустических сигналов их разговорного

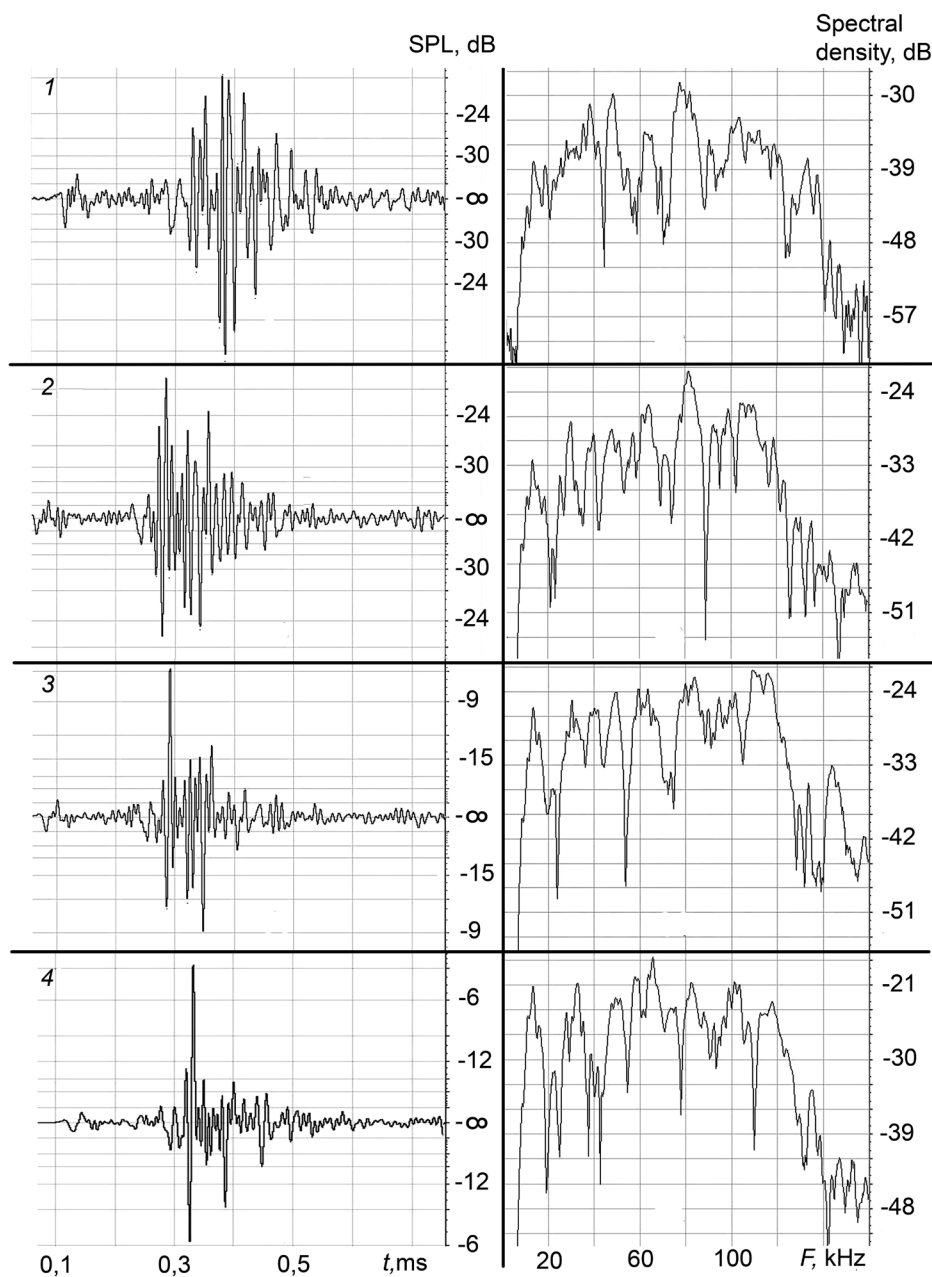


Рис. 3. Форма первых четырех НИ (1 – 4) пачки 5 (см. рис. 2), продуцированных дельфином Яной, и соответствующие им амплитудные спектры (справа).
Уровень звукового давления (SPL) импульсов приведен относительно 350 Па

языка. Каждый импульс в пачках НИ, продуцируемый дельфинами, отличается друг от друга своим видом во временной области и набором спектральных составляющих в частотной. В связи с этим можно предположить, что каждый такой импульс представляет фонему либо слово разговорного языка дельфина.

Для выяснения роли НИ были проанализированы форма и спектр 50 импульсов. Количество экстремумов в спектрах импульсов, которые отличались по уровню более чем на 3 дБ, составляло 20 – 30. Однако одинаковых импульсов среди них не выявлено. Это наводит на мысль, что, скорее всего, каждый импульс в пачках

НИ представляет собой слово разговорного языка дельфина, а пачка импульсов — это сентенция, т. е. некое изречение.

Взаимно некогерентные импульсы охватывают частоты до 200 — 250 кГц, но энергия импульсов, составляющих спектры, начинает быстро падать на частотах ниже 10 и выше 140 кГц (см. рис. 3). Характеристики НИ аналогичны тем, которые описаны в работах [25 — 27].

Если предположить, что эти импульсы — не что иное, как речь дельфина, то представляет интерес сравнить ее с человеческой речью. У дельфина спектр каждого импульса занимает почти всю область частот его слуха, от 6 — 15 до 160 кГц. Интересно, что отсутствие составляющих спектра ниже 6 — 15 кГц улучшает помехозащищенность речи, так как на частотах приблизительно ниже 10 кГц абсолютные слуховые пороги дельфина и уровень окружающего шума начинают быстро возрастать.

Спектр речи человека также охватывает почти всю область частот его слуха, но для нормальной разборчивости человеческой речи достаточно области частот 0,3 — 3 кГц. Известно, что каждое слово в языке человека создано различным размещением (с повторением) нескольких разных и произносимых последовательно и слитно фонем. Фонемы образованы спектральными составляющими соответствующих звуков. Из конечного числа фонем (например, около 40 в русском языке) может быть создано практически бесконечное количество слов.

Можно полагать, что в отличие от человека, дельфин создает каждое слово сочетанием (с повторением) соответствующих спектральных экстремумов (см. рис. 3), т. е. сочетанием нескольких экстремумов спектра, разных по частоте и уровню, которые он надежно различает, в более широкой (почти в 40 раз) полосе частот. Следовательно, спектральные экстремумы «слова» в разговорном языке дельфина играют роль фонем речи человека. Но в отличие от человека дельфин произносит все фонемы одного слова одновременно. Поэтому длительность некогерентного импульса составляет всего 0,08 — 0,60 мс, а его средняя длительность, т. е. слова дельфина, — около

0,25 мс, что на два-три порядка меньше длительности фонемы речи человека. В то же время столь малая длительность слова определяет высокую разрешающую способность речи дельфина по времени и в пространстве (около 37 см). С другой стороны, этот результат указывает на определенное преимущество слуха дельфина над слухом человека, поскольку дельфин может анализировать сложные акустические импульсы меньшей длительности (по крайней мере, на 2 — 3 порядка), чем человек. При этом межимпульсные интервалы НИ существенно длиннее его слов (19 — 300 мс) и изменяются в широких пределах, что, по-видимому, улучшает защищенность речи дельфина от реверберации. Другими словами, дельфин «произносит» каждое следующее слово после затухания отражений от предыдущего. Однако речь дельфина, к сожалению, лежит за границами временных и частотных характеристик слуха человека, а значит, ему недоступна. В отличие от человеческого восприятия, дельфины слышат речь человека, так как она попадает на низкочастотную границу их слуха, но она оказывается ослабленной в связи с существенным отражением энергии звука на границе сред воздух — вода.

Представляет интерес оценить, в какой степени предполагаемый разговорный язык дельфина обладает основными конструктивными особенностями языка человека, описанными Хоккетом [28]. Обсудим их в том же порядке, как их рассмотрел Хоккет в своей работе (табл. 2).

Первые шесть особенностей, отмеченные автором, очевидно, присущи языку дельфина и, по-видимому, не требуют специального обсуждения. Представляет интерес обсудить оставшиеся особенности, которые в большей степени определяются интеллектом и уровнем сознания животного [26, 29, 30].

Семантичность. Эксперименты показали [31, 32], что дельфин понимает новые команды, поданные внутри искусственной жестовой или звуковой языковой систем, которые используют сентенции длительностью в пять слов и интерпретация которых требует обработки как семантических, так и



Таблица 2

Наличие (либо отсутствие) конструктивных особенностей разговорного языка человека
в языках других животных

Конструктивная особенность (по Хоккету)	Язык животного			
	Танец пчелы	Песня жаворонка	Крик гиббона	Звукоподражание серого попугая
Вокально-слуховой канал	—	+	+	+
Широковещательное излучение и направленный прием	+	+	+	+
Быстрое затухание	?	+	+	+
Чередуемость	ограничена	?	+	+
Обратная связь	?	+	+	+
Специализированность	?	+	+	+
Семантичность	+	частично	+	+
Произвольность	—	если семантика, +	+	+
Дискретность	—	?	+	+
Перемещаемость	всегда +	?	—	—
Продуктивность	+	?	—	ограничена
Культурная преемственность	—	?	?	ограничена
Двойственность	—	?	—	+

Для разговорного языка дельфина (как и человека) характерны все указанные конструктивные особенности (все +), что обосновано далее.

синтаксических правил языка. Эти результаты, на наш взгляд, косвенно подтверждают предположение, что в естественном разговорном языке дельфина каждый НИ есть слово с определенным значением.

Произвольность. Концептуальное обучение внутри искусственных жестовой или звуковой языковых систем, внутри нескольких парадигм, включающих обучение распознаванию набора образов и сопоставления с образом, было продемонстрировано экспериментально [33]. Это косвенно подтверждает, что и в предполагаемом естественном разговорном языке дельфина нет прямой связи между количеством спектральных экстремумов слова и тем, что они обозначают.

Дискретность. В рассматриваемом языке дельфина дискретность слов, по-видимому, определяется их различным расположением по частоте и по уровню максимумов и минимумов спектральных составляющих акустических импульсов (см. рис. 3). Эти

различия дельфин, по-видимому, легко распознает, так как они превышают дифференциальные пороги его слуха по частоте (0,2 – 0,8 %) в частотном диапазоне 10 – 130 кГц [34 – 36] и по интенсивности (10 %) [37, 38].

Перемещаемость. Было показано, что дельфин правильно понимал команды искусственной жестовой языковой системы при передаче их через телевизионную картинку тренера так же надежно, как и при непосредственной их передаче тренером. Слова этого языка были им поняты референциально, включая способность показывать присутствие или отсутствие референциального объекта в бассейне дельфина [33, 39]. Эти факты косвенно доказывают, что и в своем естественном речевом общении дельфины могут отсылать к вещам в пространстве и во времени и «разговаривать» о вещах, которые отсутствуют в данный момент. Это косвенно свидетельствует о наличии у дельфина высокого уровня со-

знания и наличия высокоразвитого языка.

Продуктивность. Путем анализа различных сочетаний отдельных спектральных экстремумов в языке дельфина можно приблизительно оценить, какое количество слов дельфин способен создать. Если при анализе спектра слова дельфин использует механизм критических полос шириной около 10 % от центральной частоты слухового фильтра [40 – 43], то в полосе частот 10 – 120 кГц помещается около 26 частотных полос. В этом случае максимальное количество разных слов, которые могут отличаться хотя бы одним экстремумом спектра, равно сумме числа сочетаний с повторениями из 26 элементов по 1 + по 2 + ... + по 26, что составляет в сумме около $5 \cdot 10^{14}$. Это значение очень высокое и явно избыточное, хотя при учете различий в уровнях экстремумов спектра оно может быть еще выше. Несомненно, что указанная величина характеризует потенциальную возможность данного способа кодирования слов. Реально используемое дельфинами количество слов, по-видимому, существенно меньше и может быть сопоставимо с человеческим языком. Это количество достигается уже при семи экстремумах спектра, когда число сочетаний с повторениями из 26 по 7 достигает $3,4 \cdot 10^6$ слов, т. е. числа, сопоставимого с количеством известных слов человеческого языка, которое не превышает $(1 - 2) \cdot 10^6$. В связи с этим можно предположить, что разговорный язык дельфина является открытым.

Культурная преемственность. Негенетическая передача общественного поведения от генерации к генерации наблюдалась у китообразных (Cetaceans) [44, 45]. Это указывает на то, что данные виды медленно развивающихся, социально сложных животных с большим мозгом [46] имеют развитые мощные механизмы социального обучения. Несколько потенциальных сценариев и механизмов, наблюдаемых у группы пятнистых дельфинов (*Stenella frontalis*), свободно плавающих в Атлантических водах, включали вертикальные, горизонтальные и наклонные направления передачи социальной информации в процессе различных поведенческих контекстов [47]. Обучение в

этом случае может быть важным средством передачи социальных знаний и, возможно, «культуры» китообразных от одного поколения к другому [48]. Эти результаты указывают на то, что наряду с некоторыми врожденными аспектами разговорного языка, дельфин, по-видимому, получает слова и природный язык у своих сородичей.

Двойственность. Исходя из того, что разговорный язык дельфина состоит из спектральных экстремумов, которые играют роль фонем, можно предположить, что он обладает как фонологической, так и грамматической организацией, поэтому дельфины могут создавать бесконечное количество слов из конечного числа спектральных экстремумов, которые в свою очередь могут создавать бесконечное число предложений.

Анализ разговорного языка дельфинов в настоящей работе показал, что в отличие от известных коммуникационных систем животных, он прямо либо косвенно обладает всеми конструктивными особенностями разговорного языка человека. Для сравнения и наглядности полученных результатов снова рассмотрим таблицу из работы Хоккета [28] (см. табл. 2). В первой колонке таблицы перечислены конструктивные особенности разговорного языка человека, впервые показанные Хоккетом [28], в других колонках — наличие этих особенностей в коммуникационных системах разных животных. Подчеркнем, что для разговорного языка дельфина (как и человека) характерны все указанные конструктивные особенности.

Заключение

В работе проведено достоверное измерение взаимно некогерентных импульсов и выполнен их последующий анализ как наиболее вероятных акустических сигналов предполагаемого разговорного языка дельфинов.

Наличие в рассматриваемом языке всех конструктивных особенностей разговорного языка человека указывает на высокий уровень интеллекта и сознания дельфинов, а их язык, по-видимому, можно признать высокоразвитым разговорным языком, родственным языку человека. В пользу это-



го утверждения свидетельствует факт, что дельфины обладают несколько большим, чем у человека, и более сложным мозгом уже более 25 млн. лет [49]. В связи с этим, для дальнейших исследований в этом направлении и установления взаимоотношений с первыми разумными обитателями планеты Земля, человек должен сделать первый шаг — создать устройства, способные преодолеть барьеры, стоящие на пути использования языков, на пути общения

дельфинов с людьми.

Результаты, полученные в работе, позволяют предположить наличие подобного высокоразвитого разговорного языка у зубатых китов (*Odontoceti*), исходя из подобия их акустических сигналов и морфологии. Вместе с тем, рассмотренные в работе проблемы изучения акустических сигналов дельфинов и зубатых китов представляют несомненный интерес для дальнейших исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Lammers M.O., Schotten M., Au W.W.L.** The spatial context of free-ranging Hawaiian spinner dolphins (*Stenella longirostris*) producing acoustic signals // *J. Acoust. Soc. Am.* 2006. Vol. 119. No. 2. Pp. 1244–1250.
- [2] **Au W.W.L.** The Sonar of Dolphins. New York: Springer-Verlag, 1993. 277 p.
- [3] **Herman L.M., Tavolga W.N.** The communication systems of Cetaceans // L.M. Herman. Cetacean behavior: Mechanisms and functions. New York: Wiley Interscience, 1980. Pp. 149–209.
- [4] **Watkins W.A., Wartzok D.** Sensory biophysics of marine mammals // *Mar. Mamm. Sci.* 1985. Vol. 1. No. 3. Pp. 219–260.
- [5] **Tyack P.L.** Population biology, social behaviour and communication in whales and dolphins // *Trends*. 1986. Vol. 1. No. 6. Pp. 144–150.
- [6] **Dawson S.M.** Clicks and communication: the behavioural and social contexts of Hector's dolphin vocalizations // *Ethology*. 1991. Vol. 88. No. 4. Pp. 265–276.
- [7] **Lammers M.O., Au W.W.L., Herzing D.L.** The broadband social acoustic signaling behavior of spinner and spotted dolphins // *J. Acoust. Soc. Am.* 2003. Vol. 114. No. 3. Pp. 1629–1639.
- [8] **Caldwell M.C., Caldwell D.K.** Intraspecific transfer of information via the pulsed sound in captive Odontocete Cetaceans // *Animal Sonar Systems: Biology and Bionics*; ed. by R.G. Busnel, Laboratoire de Physiologie Acoustique, Jouy-en-Josas, France, 1967. Pp. 879–936.
- [9] **Norris K., Wursig B.** The Hawaiian Spinner Dolphin. Eds. Wells R. S., Wursig, M. Berkeley, CA: Univ. of California Press, 1994. 408 p.
- [10] **Busnel R.G., Dziedziec A.** Acoustic signal of the pilot whale *Globicephala melaena* and of the porpoises *Delphinus delphis* and *Phocoena phocoena* // *Whales, Dolphins, and Porpoises*. Ed. Norris K.S. Berkeley: Univ. of Calif. Press, 1966. Pp. 607–646.
- [11] **Lilly J.C.** Distress call of the bottlenose dolphin: Stimuli and evoked behavioral responses // *Science*. 1963. Vol. 139. No. 3550. Pp. 116–118.
- [12] **Dreher J.J., Evans W.E.** Cetacean communication // W.N. Tavolga. *Marine Bioacoustics*. 1. Oxford: Pergamon Press, 1964. Pp. 373–399.
- [13] **Evans W.E.** Vocalizations among marine mammals // W.N. Tavolga. *Marine Bioacoustics*. 2. New York: Pergamon Press, 1967. Pp. 159–186.
- [14] **Janik V., Slater P.** Context-specific use suggests that bottlenose dolphin signature whistles are cohesion calls // *Animal Behaviour*. 1998. Vol. 56. No. 4. Pp. 829–838.
- [15] **Herzing D.L.** Acoustics and social behavior of wild dolphins: Implications for a sound society // *Hearing in Whales*. Springer-Verlag. *Handbook of Auditory Research*. 2000. Pp. 225–272.
- [16] **Janik V.M.** Whistle matching in wild bottlenose dolphins *Tursiops truncatus* // *Science*. 2000. Vol. 289. No. 5483. Pp. 1355–1357.
- [17] **Lammers M.O., Au W.W.L.** Directionality in the whistles of Hawaiian Spinner dolphins *Stenella Longirostris*: A signal feature to cue direction of movement // *Marine Mammal Sci.* 2003. Vol. 19. No. 2. Pp. 249–264.
- [18] **Rasmussen M.H., Miller L.A.** Whistles and clicks from white-beaked dolphins. *Lagenorhynchus albirostris*, recorded in Faxaflori Bay, Iceland // *Aqua. Mamm.* 2002. Vol. 28. No. 1. Pp. 78–89.
- [19] **Rasmussen M.H., Miller L.A.** Echolocation in Bats and Dolphins // Eds. Thomas J., Moss C., Vater M. Chicago: Univ. of Chicago, 2004. Pp. 50–53.
- [20] **Caldwell M.C., Caldwell D.K., Tyack P.L.** Review of the signature-whistle hypothesis for the Atlantic bottlenose dolphin // S. Leatherwood, R.R. Reeves. *The Bottlenose Dolphin*. Academic Press, San Diego, 1990. Pp. 199–234.
- [21] **Tyack P.L.** Dolphins whistle a signature tune // *Science*. 2000. Vol. 289. No. 5483. Pp. 1310–1311.
- [22] **Sayigh L.S., Tyack P.L., Wells R.S., Scott M.D.** Signature whistles of free-ranging bottlenose

dolphins *Tursiops truncatus*: Stability and mother-off spring comparisons // Behavioral Ecology and Sociobiology. 1990. Vol. 26. No. 4. Pp. 247–260.

[23] **Herzing D.L.** Vocalizations and associated underwater behavior of free-ranging Atlantic spotted dolphins. *Stenella frontalis* and bottlenose dolphin, *Tursiops truncatus* // Aqua. Mamm. 1996. Vol. 22. No. 2. Pp. 61–69.

[24] **Rasmussen M.H., Lammers M., Beedholm K., Miller L.A.** Source levels and harmonic content of whistles in white-beaked dolphins (*Langenorhinchus albirostris*) // J. Acoust. Soc. Am. 2006. Vol. 120. No. 1. Pp. 510–517.

[25] **Рябов В.А.** Акустические сигналы и эхолокационная система дельфина // Биофизика. 2014. Т. 59. Вып. 1. С. 169–184.

[26] **Ryabov V.A.** Some aspects of analysis of dolphins' acoustical signals // Open J. of Acoustics. 2011. Vol. 1. No. 2. Pp. 41–54.

[27] **Ryabov V.A.** Acoustic signals and echolocation system of the dolphin // Biophysics. 2014. Vol. 59. No. 1. Pp. 135–147.

[28] **Hockett C.D.** The origin of speech // Scientific American. 1960. Vol. 203. No. 3. Pp. 99–196.

[29] **Ryabov V.A.** Dolphin's spoken language // Collection of scientific papers after 7th International Conference MMH, Suzdal, Russia, 2012. 2. Pp. 198–204.

[30] **Ryabov V.A.** The dolphin spoken language// Abstracts book of 27th conference of the European Cetacean Society. Interdisciplinary approaches in the study of marine mammals (8th –10th April, 2013) Setubal, Portugal. 2013. P. 213.

[31] **Herman L.M., Richards D.G., Wolz J.P.** Comprehension of sentences by bottlenosed dolphins // Cognition. 1984. Vol. 16. No. 2. Pp. 129–219.

[32] **Herman L.M.** Cognition and language competencies of bottlenosed dolphins // R.J. Schusterman, J. Thomas, F.G. Wood. Dolphin Cognition and Behavior: A Comparative Approach, Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum Associates. 1986. Pp. 221–251.

[33] **Herman L.M.** What laboratory research has told us about dolphin cognition // Int. J. Comp. Psychol. 2010. Vol. 23. No. 3. Pp. 310–330.

[34] **Herman L.M., Arbeit W.R.** Frequency difference limens in the bottlenose dolphin: 1 – 70 kHz // J. Aud. Res. 1972. Vol. 12. No.2. Pp. 109–120.

[35] **Jacobs D.W.** Auditory frequency discrimination in the Atlantic bottlenose dolphin. *Tursiops Truncatus* Montague. A Preliminary Report // J. Acoust. Soc. Am. 1972. Vol. 52. No. 2B. Pp. 696–698.

[36] **Thompson R.K.R., Herman L.M.** Underwater

frequency discrimination in the bottlenosed dolphin (1 –140 kHz) and human (1 – 8 kHz) // J. Acoust. Soc. Am. 1975. Vol. 57. No. 4. Pp. 943–948.

[37] **Bullock T.H., Grinell A.D., Ikezono E., et al.** Electrophysiological studies of central auditory mechanisms in cetaceans // Z. Vergl. Physiol. 1968. Vol. 59. No. 2. Pp. 117–156.

[38] **Johnson C.S.** Auditory masking of one pure tone by another in the bottlenosed porpoise // J. Acoust. Soc. Am. 1970. Vol. 49. No. 4B. Pp. 1317–1318.

[39] **Herman L.M., Morrel-Samuels P., Pack A.A.** Bottlenosed dolphin and human recognition of veridical and degraded video displays of an artificial gestural language// J. Exp. Psych.: General. 1990. Vol. 119. No. 2. Pp. 215–230.

[40] **Johnson C.S., McManus M.W., Skaar D.** Masked tonal hearing thresholds in the beluga whale // J. Acoust. Soc. Am. 1989. Vol. 85. No. 6. Pp. 2651–2654.

[41] **Johnson C.S.** Masked tonal threshold in the bottlenose porpoise // J. Acoust. Soc. Am. 1968. Vol. 44. No. 4. Pp. 965–967.

[42] **Au W.W.L., Moore P.W.B.** Critical ratio and critical bandwidth for the Atlantic bottlenose dolphin // J. Acoust. Soc. Am. 1990. Vol. 88. No. 3. Pp. 1635–1638.

[43] **Popov V.V., Supin A.Y., Klishin V.O.** Frequency tuning of the dolphin's hearing as revealed by auditory brain-stem response with notch-noise masking // J. Acoust. Soc. Am. 1997. Vol. 102. No. 6. Pp. 3795–3801.

[44] **Kruetzen M., Mann J., Heithaus M., et al.** Cultural transmission of tool use in bottlenose dolphins // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2005. Vol. 102. No. 25. Pp. 8939–8943.

[45] **Rendell L., Whitehead H.** Culture in whales and dolphins // Behavior and Brain Science. 2001. Vol. 24. No. 2. Pp. 309–382.

[46] **Bjorklund D.F., Bering J.M.** Big brains, slow development, and social complexity: the developmental and evolutionary origins of social cognition // Brüne M., Ribbert H., Schiefenhövel W. The social brain: evolutionary aspects of development and pathology. New York: Wiley, 2003. Pp. 133–151.

[47] **Herzing D.L.** Transmission mechanisms of social learning in dolphins: Underwater observations of free-ranging dolphins in the Bahamas// F. Delfour, M.J. Dubois. Autour de l'ethologie et de la Cognition Animale, Lyon: Presses Universitaires de Lyon, 2005. Pp. 185–194.

[48] **Bender C.E., Herzing D.L., Bjorklund D.F.** Evidence of teaching in Atlantic spotted dolphins (*Stenella frontalis*) by mother dolphins foraging in the presence of their calves // Animal Cognition.



2009. Vol. 12. No. 1. Pp. 43–53.

[49] **Ridgway S.H.** Physiological observations on the dolphin brains // R.J. Schusterman, J. Thomas,

F.G. Wood. Dolphin cognition and behavior. A comparative approach. Hillsdale: Erlbaum. 1986. Pp. 31–59.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

РЯБОВ Вячеслав Александрович — кандидат биологических наук, старший научный сотрудник ФГБУН «Карадагская научная станция им. Т.И. Вяземского — природный заповедник РАН», г. Феодосия. 298188, Российская Федерация, г. Феодосия, ПГТ Курортное, ул. Науки, 24
ryaboffff@inbox.ru

Ryabov V.A. THE STUDY OF ACOUSTIC SIGNALS AND THE SUPPOSED DOLPHINS' SPOKEN LANGUAGE.

This paper continues studies in the problem of animal's language by registration of acoustic signals from the two quasi-stationary Black Sea bottlenose dolphins (*Tursiops truncatus*) using two-channel system in the frequency band up to 220 kHz with a dynamic range of 81dB. The packs of mutually noncoherent impulses (NI) of dolphins were matched to the animals. The waveforms and the spectra of these impulses changed from one impulse to another one in each pack. In this connection, the suggestion was made that the set of spectral components of each impulse is a «word» of the dolphin's spoken language and a pack of NI is a sentence. The paper studied the NI peculiarities in the context of characteristics of a human spoken language.

DOLPHIN, SPOKEN LANGUAGE, ACOUSTICS, SIGNAL, PACK, NONCOHERENT IMPULSE.

REFERENCES

- [1] **M.O. Lammers, M. Schotten, W.W.L. Au**, The spatial context of free-ranging Hawaiian spinner dolphins (*Stenella longirostris*) producing acoustic signals, *J. Acoust. Soc. Am.* 119 (2) (2006) 1244–1250.
- [2] **W.W.L. Au**, The sonar of dolphins, New York, Springer-Verlag, 1993. P. 277.
- [3] **L.M. Herman, W.N. Tavalga**, The communication systems of cetaceans, L.M. Herman, Cetacean behavior: Mechanisms and functions, New York, Wiley Interscience, 1980, Pp. 149–209.
- [4] **W.A. Watkins, D. Wartzok**, Sensory biophysics of marine mammals, *Mar. Mamm. Sci.* 1(3) (1985) 219–260.
- [5] **P.L. Tyack**, Population biology, social behaviour and communication in whales and dolphins, *Trends* 1(6) (1986) 144–150.
- [6] **S.M. Dawson**, Clicks and communication: the behavioural and social contexts of Hector's dolphin vocalizations, *Ethology* 88(4) (1991) 265–276.
- [7] **M.O. Lammers, W.W.L. Au, D.L. Herzing**, The broadband social acoustic signaling behavior of spinner and spotted dolphins, *J. Acoust. Soc. Am.* 2003. 114 (3) (2003) 1629–1639.
- [8] **M.C. Caldwell, D.K. Caldwell**, Intraspecific transfer of information via the pulsed sound in captive Odontocete Cetaceans /Animal Sonar Systems: Biology and Bionics, edited by R. G. Busnel, Laboratoire de Physiologie Acoustique, Jouy-en-Josas, France, 1967. Pp. 879–936.
- [9] **K. Norris, B. Wursig**, The Hawaiian Spinner Dolphin, Eds. Wells, R. S., Wursig, M. Univ. of California Press, Berkeley, CA, 1994.
- [10] **R.G. Busnel, A. Dziedzic**, Acoustic signal of the pilot whale *Globicephala melaena* and of the porpoises *Delphinus delphis* and *Phocoena phocoena*, Whales, Dolphins, and Porpoises, Ed. Norris K. S. Univ. of Calif. Press, Berkeley, 1966. Pp. 607–646.
- [11] **J.C. Lilly**, Distress call of the bottlenose dolphin: Stimuli and evoked behavioral responses, *Science* 139 (3550) (1963) 116–118.
- [12] **J.J. Dreher, W.E. Evans**, Cetacean communication, W.N. Tavalga, Marine Bioacoustics, 1 Pergamon Press, Oxford, 1964. Pp. 373–399.
- [13] **W.E. Evans**, Vocalizations among marine mammals, W.N. Tavalga, Marine Bioacoustics 2 Pergamon Press, New York, 1967. Pp. 159–186.
- [14] **V. Janik, P. Slater**, Context-specific use suggests that bottlenose dolphin signature whistles are cohesion calls, *Animal Behaviour* 56 (4) (1998) 829–838.
- [15] **D.L. Herzing**, Acoustics and Social Behavior of Wild Dolphins: Implications for a Sound Society, Hearing in Whales, Springer-Verlag, Handbook of Auditory Research, 2000. Pp. 225–272.
- [16] **V.M. Janik**, Whistle matching in wild bottlenose dolphins *Tursiops truncatus*, *Science* 289 (5483) (2000) 1355–1357.
- [17] **M.O. Lammers, W.W.L. Au**, Directionality

in the whistles of Hawaiian Spinner dolphins *Stenella Longirostris*: A signal feature to cue direction of movement, *Marine Mammal Sci.* 19(2) (2003) 249–264.

[18] **M.H. Rasmussen, L.A. Miller**, Whistles and clicks from white-beaked dolphins, *Lagenorhynchus albirostris*, recorded in Faxaflori Bay, Iceland, *Aqua. Mamm.* 28 (1) (2002) 78–89.

[19] **M.H. Rasmussen, L.A. Miller**, Echolocation in Bats and Dolphins, Eds. Thomas J., Moss C., Vater M., Univ. of Chicago, Chicago, 2004. Pp. 50–53.

[20] **M.C. Caldwell, D.K. Caldwell, P.L. Tyack**, Review of the signature-whistle hypothesis for the Atlantic Bottlenose dolphin, S. Leatherwood, R.R. Reeves, *The Bottlenose Dolphin*. Academic Press, San Diego, 1990. Pp. 199–234.

[21] **P.L. Tyack**, Dolphins whistle a signature tune, *Science*. 289 (5483) (2000) 1310–1311.

[22] **L.S. Sayigh, P.L. Tyack, R.S. Wells, M.D. Scott**, Signature whistles of free-ranging bottlenose dolphins, *Tursiops truncatus*: Stability and mother-off spring comparisons, *Behavioral Ecology and Sociobiology*. 26 (4) (1990) 247–260.

[23] **D.L. Herzing**, Vocalizations and associated underwater behavior of free-ranging Atlantic spotted dolphins, *Stenella frontalis* and bottlenose dolphin, *Tursiops truncatus*, *Aqua. Mamm.* 22 (2) (1996) 61–69.

[24] **M.H. Rasmussen, M. Lammers, K. Beedholm, L.A. Miller**, Source levels and harmonic content of whistles in white-beaked dolphins (*Lagenorhynchus albirostris*), *J. Acoust. Soc. Am.* 120 (1) (2006) 510–517.

[25] **V.A. Ryabov**, Akusticheskiye signaly i ekholokatsionnaya sistema delfina [Acoustic signals and echolocation system of the dolphin], *Biofizika*. 59 (1) (2014) 169–184.

[26] **V.A. Ryabov**, Some aspects of analysis of dolphins' acoustical signals, *Open J. of Acoustics*. 1 (2) (2011) 41–54.

[27] **V.A. Ryabov**, Acoustic signals and echolocation system of the dolphin, *Biophysics*. 59(1) (2014) 135–147.

[28] **C.D. Hockett**, The origin of speech, *Scientific American*. 203 (3) (1960) 99–196.

[29] **V.A. Ryabov**, Dolphin's spoken language. Collection of scientific papers after 7th International Conference MMH, Suzdal, Russia, 2012. 2. Pp. 198–204.

[30] **V.A. Ryabov**, The dolphin spoken language, Abstracts book of 27th conference of the European Cetacean Society, Interdisciplinary approaches in the study of marine mammals (8th–10th April, 2013) Setubal, Portugal, 2013. P. 213.

[31] **L.M. Herman, D.G. Richards, J.P.**

Wolz, Comprehension of sentences by bottlenosed dolphins, *Cognition*. 16(2) (1984) 129–219.

[32] **L.M. Herman**, Cognition and language competencies of bottlenosed dolphins, R.J. Schusterman, J. Thomas, F.G. Wood, *Dolphin Cognition and Behavior: A Comparative Approach*, Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum Associates, 1986. Pp. 221–251.

[33] **L.M. Herman**, What laboratory research has told us about dolphin cognition, *Int. J. Comp. Psycho.* 23 (3) (2010) 310–330.

[34] **L.M. Herman, W.R. Arbeit**, Frequency difference limens in the bottlenose dolphin: 1 – 70 kHz, *J. Aud. Res.* 12 (2) (1972) 109–120.

[35] **D.W. Jacobs**, Auditory frequency discrimination in the Atlantic bottlenose dolphin, *Tursiops truncatus Montague*, A Preliminary Report, *J. Acoust. Soc. Am.* 52 (2B) (1972) 696–698.

[36] **R.K.R. Thompson, L.M. Herman**, Underwater frequency discrimination in the bottlenosed dolphin (1 – 140 kHz) and human (1 – 8 kHz), *J. Acoust. Soc. Am.* 57 (4) (1975) 943–948.

[37] **T.H. Bullock, A.D. Grinell, E. Ikezono, et al.**, Electrophysiological studies of central auditory mechanisms in cetaceans, *Z. Vergl. Physiol.* 59(2) (1968) 117–156.

[38] **C.S. Johnson**, Auditory masking of one pure tone by another in the bottlenosed porpoise, *J. Acoust. Soc. Am.* 49 (4B) (1970) 1317–1318.

[39] **L.M. Herman, P. Morrel-Samuels, A.A. Pack**, Bottlenosed dolphin and human recognition of veridical and degraded video displays of an artificial gestural language, *J. Exp. Psych.: General*. 119(2) (1990) 215–230.

[40] **C.S. Johnson, M.W. McManus, D. Skaar**, Masked tonal hearing thresholds in the beluga whale, *J. Acoust. Soc. Am.* 85 (6) (1989) 2651–2654.

[41] **C.S. Johnson**, Masked tonal threshold in the bottlenose porpoise, *J. Acoust. Soc. Am.* 44 (4) (1968) 965–967.

[42] **W.W.L. Au, P.W.B. Moore**, Critical ratio and critical bandwidth for the Atlantic bottlenose dolphin, *J. Acoust. Soc. Am.* 88 (3) (1990) 1635–1638.

[43] **V.V. Popov, A.Y. Supin, V.O. Klishin**, Frequency tuning of the dolphin's hearing as revealed by auditory brain-stem response with notch-noise masking, *J. Acoust. Soc. Am.* 102 (6) (1997) 3795–3801.

[44] **M. Krutzen, J. Mann, M. Heithaus, et al.**, Cultural transmission of tool use in bottlenose dolphins, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 102 (25) (2005) 8939–8943.

[45] **L. Rendell, H. Whitehead**, Culture in whales and dolphins, *Behavior and Brain Science*. 24(2)



(2001) 309–382.

[46] **D.F. Bjorklund, J.M. Bering**, Big brains, slow development, and social complexity: the developmental and evolutionary origins of social cognition, Brüne M., Ribbert H., Schiefenhövel W. The social brain: evolutionary aspects of development and pathology, Wiley, New York, 2003. Pp. 133–151.

[47] **D.L. Herzing**, Transmission mechanisms of social learning in dolphins: Underwater observations of free-ranging dolphins in the Bahamas, F. Delfour, M.J. Dubois. Autour de l'éthologie et de la

Cognition Animale, Presses Universitaires de Lyon, Lyon, 2005. Pp. 185–194.

[48] **C.E. Bender, D.L. Herzing, D.F. Bjorklund**, Evidence of teaching in Atlantic spotted dolphins (*Stenella frontalis*) by mother dolphins foraging in the presence of their calves, Animal Cognition. 12 (1) (2009) 43–53.

[49] **S.H. Ridgway**, Physiological observations on the dolphin brains, R.J. Schusterman, J. Thomas, F.G. Wood, Dolphin cognition and behavior, A comparative approach, Hillsdale: Erlbaum, 1986. Pp. 31 –59.

THE AUTHOR

RYABOV Vyacheslav A.

T.I. Vyazemsky Karadag Scientific Station – Nature Reserve of RAS
24 Nauki St., Kurortnoye, Feodosiya, 298188, Russian Federation
ryabovfff@inbox.ru

DOI: 10.5862/JPM.248.11

УДК 599.537:534.75:534.28

В.А. Рябов

Карадагская научная станция им. Т.И. Вяземского –
природный заповедник РАН, г. Феодосия, Российская Федерация

ВЛИЯНИЕ АКУСТИЧЕСКОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ ОБЛАСТИ ПОДБОРОДОЧНЫХ КАНАЛОВ ДЕЛЬФИНА НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ЕГО СЛУХА

Проведено экспериментальное исследование влияния акустического экранирования подбородочных каналов дельфина афалины (*Tursiops truncatus*) на его слуховые пороги. Применялась методика инструментальных условных рефлексов с пищевым подкреплением. Слуховые пороги обнаружения дельфином коротких широкополосных акустических импульсов существенно ухудшаются (на 30 – 50 дБ) в условиях акустического экранирования области подбородочных каналов во всей области частот его слуха. Следовательно, подбородочные каналы нижней челюсти принимают участие в приеме и проведении звуков в жировой тяж мандибулярного канала во всей частотной области слуха дельфина. Полученные результаты дают экспериментальное доказательство предположения о том, что морфологические структуры нижней челюсти играют роль нового периферического отдела слуха дельфина. Результаты работы дают основания предполагать, что подобный новый периферический отдел слуха имеется у зубатых китов (*Odontoceti*), ввиду подобия их морфологии.

ДЕЛЬФИН, СЛУХОВОЙ ПОРОГ, ПОДБОРОДОЧНЫЙ КАНАЛ, АКУСТИЧЕСКИЙ ИМПУЛЬС, ЭКРАНИРОВАНИЕ, НИЖНЯЯ ЧЕЛЮСТЬ.

Введение

Изучение механизмов звукопроводения на среднее ухо зубатых китов отражено в многочисленных научных работах. Ряд исследователей этой проблемы полагают, что звук проходит на улитку через наружные слуховые проходы и среднее ухо, хотя существует также мнение, что слуховые проходы вообще не могут участвовать в проведении звука к среднему уху [1] или служат для проведения сигналов с частотами ниже 30 кГц [2]. Другие исследователи предполагают, что звук может передаваться по жировому тяжу мандибулярного канала непосредственно на барабанную кость, минуя наружные слуховые проходы и барабанную связку [1 – 4].

К.С. Норрис [3] предположил, что звук может передаваться в жировой тяж мандибулярного канала через подбородочные отверстия. Хотя несколько позже он выдвигает другую гипотезу о пути передачи

звука в жировой тяж — непосредственно через заднелатеральную стенку кости нижней челюсти, в определенном месте, которое он назвал «акустическим окном» [4]. По жировому тяжу звук передается на латеральную стенку барабанной кости, где ее толщина минимальна, и стенка играет роль барабанной перепонки, передавая звуковые колебания на молоточек среднего уха [3 – 6]. Было также показано, что акустическое стимулирование нижней челюсти возбуждает значительные вызванные потенциалы в центральной слуховой системе дельфина [1, 4]. Однако области максимальной чувствительности поверхности нижней челюсти животного к звукам, излучаемым контактно точечным источником, расположены по разному в работах [1, 4, 7, 8], а полученные результаты не объясняют механизма звукопроводения.

Есть также ряд работ, в которых авторы полагают, что зубатые киты принимают эхосигналы зубами [9]. В этих работах каж-



дый зуб считается пассивным резонатором, возбуждаемым отраженным эхосигналом, а зубные нервы — сенсорами звукового давления эха. Каждый ряд зубов рассматривается как эквидистантная антенная решетка приемников с узкой характеристикой направленности, сигналы которой подаются по зубным нервам прямо в центральную нервную систему (минуя улитку).

Таким образом, рассмотренные результаты научных работ неоднозначны и противоречивы, а основной вопрос о механизмах приема и проведения звука на среднее ухо зубатых китов остается на сегодняшний день невыясненным. Вместе с тем, результаты работ [10, 12, 13] дают основания полагать, что звук проходит в жировой тяж мандибулярного канала дельфина через подбородочные каналы (ПК) нижней челюсти.

Результаты изучения морфологии нижней челюсти дельфина и последующего моделирования механизмов приема и проведения звука по каналам нижней челюсти на среднее ухо подтверждают это предположение. Более того, с точки зрения акустики и

теории групповых антенн, каждый ряд ПК играет роль акустической антенны бегущей волны, которая расположена в горле акустического катеноидального рупора (роль которого играет соответствующий мандибулярный канал). Представление о нижней челюсти как о системе из двух антенн бегущей волны объясняет механизмы приема и проведения звука на среднее ухо. Исходя из этого, морфологические структуры каждой из половин нижней челюсти (подбородочные каналы, мандибулярный канал и жировой тяж) рассматриваются как компоненты предполагаемого нового периферического отдела слуха дельфина.

Цель работы — экспериментальное выяснение роли подбородочных каналов в слухе дельфина. Конкретные задачи работы состояли в определении влияния акустического экранирования подбородочных каналов на слуховые пороги обнаружения акустических импульсов с максимумами энергии на разных частотах.

Объект исследования, материалы и экспериментальные методы

Эксперименты проводились на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки (ФГБУН) «Карадагская научная станция им. Т.И. Вяземского — природный заповедник РАН» (г. Феодосия) в закрытом бетонном бассейне размером $27 \times 9 \times 4,5$ м. В качестве подопытного животного использовался взрослый черноморский дельфин вида афалина (*Tursiops truncatus*), ранее не участвовавший в акустических экспериментах. Применялась методика инструментальных условных рефлексов с пищевым подкреплением, с использованием парадигмы «go/no-go» [14].

Дельфин был обучен по сигналу подплывать к мосткам (поз. 5 на рис. 1), где тренер надевал (не надевал) акустический экран на рострум животного в области ПК. После этого дельфин по сигналу тренера подплывал к стартовому манипулятору 2, подвешенному на глубине 1 м, и держался на этой глубине почти без движения (квазистационарно), касаясь кончиком рострума стартового манипулятора. Через несколько секунд исследователь включал слуховой

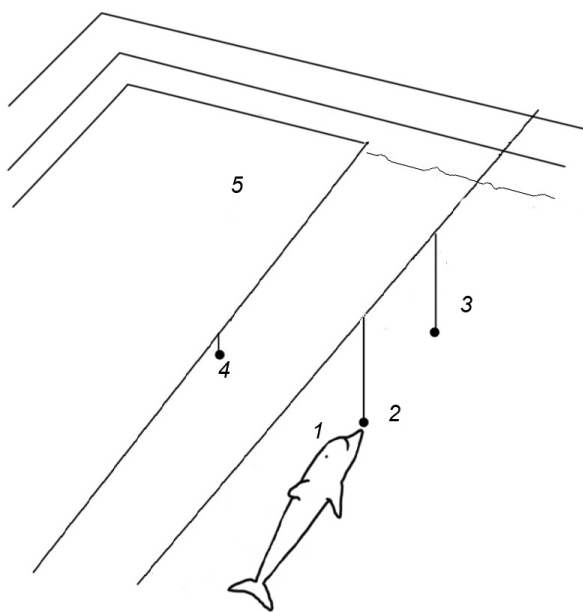


Рис. 1. Конфигурация эксперимента:
1 — дельфин в стартовом положении, 2 — стартовый манипулятор, 3 — излучатель акустических стимулов, 4 — сигнальный манипулятор, 5 — мостки экспериментатора

стимул (показан на рис. 2), который дельфин обнаруживал (не обнаруживал). Если стимул предъявлялся и дельфин его обнаруживал, то он оставлял стартовую позицию (go) и нажимал рострумом на сигнальный манипулятор 4 (расположен возле поверхности воды), показывая тем самым, что он обнаружил предлагаемый стимул. Если стимул не предъявлялся, то дельфин оставался на стартовой позиции до сигнала тренера (no-go). В этих случаях дельфин получал пищевое подкрепление за правильное

решение задачи. При необходимости тренер для этого каждый раз снимал с дельфина акустический экран. Ошибками считались случаи, когда дельфин не подходил к сигнальному манипулятору при наличии сигнала или подходил к сигнальному манипулятору при отсутствии сигнала (ложная тревога). Ошибки дельфина не подкреплялись.

В каждом испытании предъявление положительного или отрицательного стимулов (он либо предъявлялся, либо нет) опре-

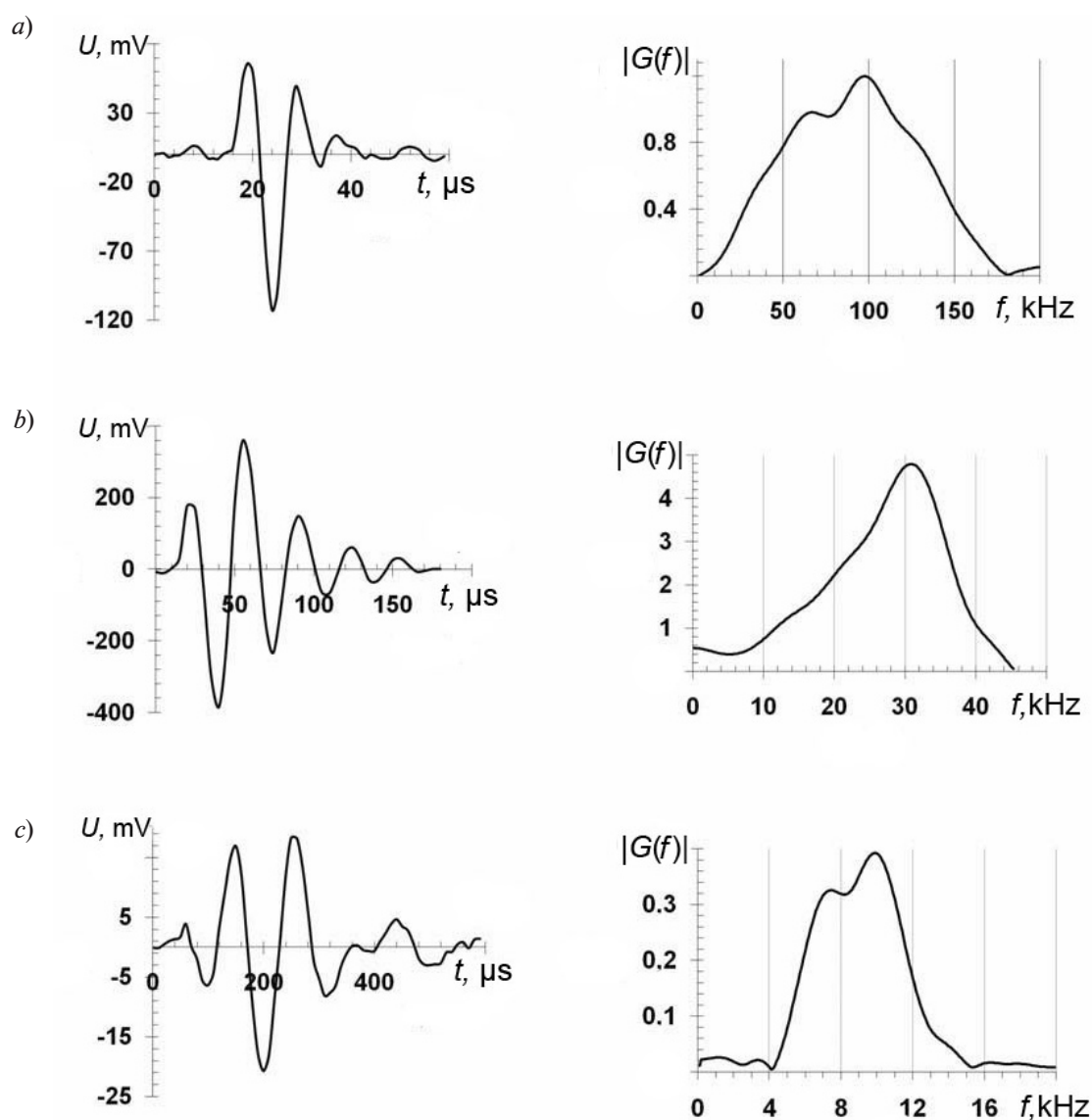


Рис. 2. Примеры осциллограмм $U(t)$ и соответствующих им частотных спектров $|G(f)|$ акустических импульсных сигналов с максимумами на частотах около 100 кГц (a), 30 кГц (b) и 8 кГц (c). Сигналы использовались в качестве акустических стимулов



делялось случайным порядком (но не более трех одинаковых стимулов подряд).

Каждое пороговое значение уровня звукового давления (УЗД) стимула определялось не менее чем по трем сессиям. Каждая сессия состояла приблизительно из 60 испытаний. Как правило, в каждой сессии на первых испытаниях предъявлялись стимулы с УЗД, существенно превосходящими пороговый. На протяжении сессии УЗД стимулов постепенно уменьшался (с шагом 3 дБ) до пороговых значений (уровень правильных реакций — 50 %). После этого УЗД стимула поднимался на 4 — 6 дБ, вплоть до правильных реакций животного, и приближение к порогу (уменьшение УЗД стимула) опять выполнялось с шагом 3 дБ. Пороговое значение УЗД стимулов, соответствующее уровню 75 % правильных ответов, вычислялось путем усреднения между максимальным подпороговым и минимальным надпороговым значениями их УЗД. Последние были получены при многократном пересечении порога.

Чтобы снизить влияние интерференции прямого и отраженных в бассейне сигналов на результаты экспериментов, в качестве стимулов использовались короткие широкополосные акустические импульсные сигналы от специального излучателя (поз. 3 на рис. 1), расположенного на расстоянии 2 м от стартового манипулятора и на глубине 1 м. Расстояние между излучателем 3 и стенкой бассейна составляло 3 м.

Стимулы с максимумами энергии на частотах 30, 60 и 100 кГц были сформированы в результате реакции сферических акустических преобразователей из пьезокерамики диаметрами 50, 30 и 20 мм на прямоугольные импульсы длительностью 17, 9 и 5 мкс, соответственно. Для получения импульсов с максимумами энергии на частотах 8 или 16 кГц использовался излучатель диаметром 50 мм, который возбуждался прямоугольным импульсом длительностью 56 или 36 мкс через октавный полосовой фильтр с центральной частотой 8 или 16 кГц, соответственно. Примеры применяемых стимулов представлены на рис. 2. Регистрация осциллограмм выполнена при глу-

бине погружения излучателя и приемника, равной 1 м, при расстоянии между ними в 1 м. Амплитуда возбуждающего излучателя прямоугольного импульса составляла 20 В. В качестве приемника использовался калиброванный гидрофон 8103 с прецизионным усилителем 2650 (усиление 40 дБ) фирмы V&K. Длительность стимулов не превышала трех периодов соответствующей частоты максимума энергии акустического импульса. В этом случае, отражения стимула от стен бассейна и поверхности воды не накладывались на прямой стимул, так как приходили с достаточной временной задержкой и были существенно ослабленными по сравнению с ним. При пороговых значениях УЗД стимула, уровни отражения были ниже слухового порога обнаружения импульсов дельфинами, что позволяло выполнять измерения без специальных звукопоглощающих покрытий.

Акустически непрозрачный экран ПК (рис. 3) был изготовлен по форме роостра дельфина и плотно надевался на него. Длина этого экрана составляла около 15 см. Он был изготовлен из листа (толщина — 5 мм) вспененного неопрена с замкнутыми порами. Этот материал имеет высокую прочность, обладает водонепроницаемостью и маслостойкостью. В связи с этими свойствами он может долго сохранять звукоэкранирующие свойства, которые обеспечиваются пузырьками газа, находящимися в его порах. Эффективность звукового экранирования этим материалом была измерена перед проведением экспериментов. Ослабление пикового звукового давления коротких широкополосных импульсов с максимумами энергии на частотах 10, 55 и 170 кГц при их экранировании одним слоем этого материала для нормально падающего звука достигало 28, 32 и 36 дБ, соответственно.

Следует отметить, что длины волн, соответствующие частотам максимумов энергии стимулов, использованных в эксперименте, лежат в области от 1,5 до 20 см, поэтому линейные размеры акустического экрана на низких частотах становятся меньше длин волн стимулов. В связи с этим, для повыше-



Рис. 3. Фотография дельфина с акустически непрозрачным экраном, закрывающим область его подбородочных каналов; сделана возле мостков экспериментатора

ния эффективности экранирования экран имел соответствующую форму, закрывая как верхнюю, так и нижнюю челюсти (см. рис. 3). Если бы экран был изготовлен по форме внешней поверхности только нижней челюсти, то даже на частоте 100 кГц (длина волны 1,5 см) эффективность такого экрана была бы низкой (вследствие дифракции). На частотах же ниже 8 кГц (длина волны более 19 см) экранирования таким приспособлением вообще бы не было, так как расстояние от края экрана до ПК составляло менее 2 см.

Экспериментальные результаты

В работе были измерены слуховые пороги обнаружения дельфином коротких широкополосных акустических импульсов с максимумами энергии на частотах 8, 16, 30, 60 и 100 кГц, а также пороги обнаружения этих же импульсов в условиях акустического экранирования ПК нижней челюсти. Результаты измерений (рис. 4) представлены в виде зависимости, демонстрирующей относительное ухудшение слуховых порогов обнаружения стимулов, вызванное акустическим экранированием ПК. Во всей исследованной области частот (6 – 160 кГц), с учетом широкополосности стимулов

(см. рис. 2), эффективность экранирования высокая и возрастает с частотой от 30 до 50 дБ.

Для более наглядного представления полученных результатов на этом же рисунке представлена рассчитанная зависимость длины волны звука в воде от частоты. Обращает на себя внимание тот факт, что зависимость эффективности экранирования ПК от частоты представляет собой зеркальное отражение частотной зависимости звуковой длины волны в воде. Этот результат свидетельствует о том, что эффективность экранирования обратно пропорциональна длине волны, и следовательно, определяется длиной волны звука.

Результаты измерений абсолютных значений порогов обнаружения стимулов в этом эксперименте согласуются с аудиограммой бутылконосного дельфина [15], с учетом явления энергетической суммации [16 – 18]. Это дополнительно свидетельствует о том, что дельфин, которого изучали в нашем эксперименте, имел нормальный слух.

Особенности каналов нижней челюсти дельфинов, а именно их размеры, форма и архитектура подчинены акустической

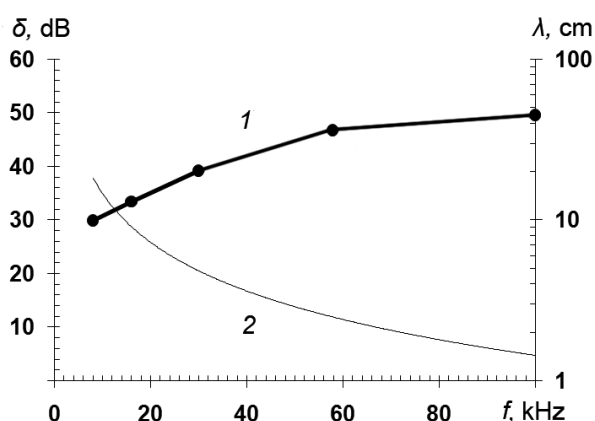


Рис. 4. Частотные зависимости степени ослабления слуховых порогов дельфина специальным экраном (1) и длины волны λ звука в воде (2).

Величина δ – отношение среднего значения слуховых порогов обнаружения дельфином акустических импульсов при экранировании области ПК к соответствующему значению без экранирования; f – частота максимума энергии акустических импульсов $|G(f)|$ и частота звука в воде



целесообразности [10, 12, 13]. Этот естественный вывод, основанный на результатах изучения морфологии и результатах моделирования механизмов приема и проведения звука по каналам нижней челюсти на среднее ухо дельфинов, в значительной степени подтверждается полученными экспериментальными результатами (см. рис. 4). При экранировании ПК средние значения слуховых порогов обнаружения импульсов с максимумами энергии на частотах 8, 16, 30, 60 и 100 кГц возрастают на 30, 34, 40, 46 и 50 дБ, соответственно. Это означает, что такое экранирование существенно ухудшает чувствительность слуха дельфина в области частот 6 – 160 кГц (с учетом широкополосности стимулов), т. е. во всей частотной полосе слуха дельфина. Следовательно, подбородочные каналы принимают участие в приеме и проведении звуков в жировой тяж мандибулярного канала, а также представляют собой единственный звукопроводящий путь для звуков всех частот, использованных в эксперименте.

В то же время, уменьшение эффективности экранирования ПК с уменьшением частоты стимулов, достигающее 20 дБ, можно объяснить возрастающим прониканием звука за экран с ростом длины волны стимулов в результате дифракции. Длина волны звука с понижением частоты существенно возрастает (см. кривую 2 на рис. 4). Причем, если на частотах около 100 кГц размеры акустического экрана в 10 раз превышают длину волны звука стимула, то для частот около 16 кГц линейный размер экрана становится соизмеримым с длиной волны, а в области частот около 8 кГц размеры экрана становятся даже меньше длины волны звука. В то же время, как это следует из теории и полученных результатов, эффективность экранирования максимальна при наибольшем отношении размеров экрана к длине волны (значение при 100 кГц на рис. 4). Более того, для экрана с такими размерами эффективность экранирования звука становится даже выше, чем эффективность экранирования самого материала, из которого изготовлен экран. Это связано с тем, что звуки падают на нижнюю челюсть (и значит на экран)

почти по касательной и проходят в материале экрана существенно больший путь, чем его толщина.

Если учесть влияние дифракции, то становится ясно, что эффективность экранирования ПК на измеряемых частотах была бы одинаковой при постоянном отношении размеров экрана к длине волны. Об этом же говорит и тот факт, что величина порогов изменяется обратно пропорционально длине волны (см. рис. 4). К сожалению, на низких частотах трудно обеспечить такое же соотношение между размерами экрана и длиной волны стимулов, как для частоты 100 кГц, поскольку размеры экрана должны быть слишком большими (например, 1,9 м для частоты 8 кГц), и ввиду этого эффективность используемого экрана падает с понижением частоты.

Полученные в работе новые оригинальные результаты указывают на то, что ПК участвуют в приеме и проведении звуков в жировой тяж мандибулярного канала и дальше на стенку тимпаника, т. е. на среднее ухо, представляя собой уникальный звукопроводящий путь. Этот факт исключает возможность звукопроводения по другим предполагаемым путям [4, 7, 8, 19 – 23].

Эффективность экранировки ПК на частотах ниже 6 кГц в настоящей работе не измерялась, однако можно полагать, что и на низких частотах прием и проведение звуков осуществляется по тому же уникальному пути, — через ПК. В пользу этого свидетельствует постоянный наклон (9 – 10 дБ/окт) низкочастотного склона аудиограммы дельфина [15], который начинается приблизительно от 0,1 кГц и простирается вплоть до 20 – 30 кГц.

Заключение

В настоящей работе изучено влияние акустического экранирования подбородочных каналов дельфина на слуховые пороги обнаружения акустических импульсов с максимумами энергии на разных частотах.

Полученные результаты измерения указанных слуховых порогов при экранировании области подбородочных каналов и без экранирования дают дополнительное экспериментальное подтверждение вы-

двинутой гипотезе об определяющей роли морфологических структур нижней челюсти дельфина как нового периферического отдела его слуховой системы [11 – 13, 24 – 26]. Выдвинутое предположение было основано на результатах изучения морфологии и моделирования рассматриваемой системы.

Таким образом, подбородочные каналы играют роль новых наружных слуховых проходов. Они участвуют в приеме и про-

ведении звуков в жировой тяж мандибулярного канала во всем диапазоне частот слуха дельфина (0,1 – 160 кГц). По жировому тяжу звуки передаются на латеральную стенку барабанной кости, т. е. на среднее ухо и на улитку, что согласуется с работами [3 – 6]. Результаты данного исследования дают основания предположить, что подобный новый периферический отдел слуха имеется у зубатых китов (*Odontoceti*), ввиду подобия их морфологии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **McCormick J.G., Wever E.G., Palin J., Ridgway S.H.** Sound conduction in the dolphin ear // *J. Acoust. Soc. Amer.* 1970. Vol. 48. No. 6-2. Pp. 1418–1428.
- [2] **Bullock T.H., Grinell A.D., Ikezono E., et. al.** Electrophysiological studies of central auditory mechanisms in cetaceans // *Z. Vergl. Physiol.* 1968. Vol. 59. No. 2. Pp. 117–156.
- [3] **Norris K.S.** Some problems of echolocation in Cetaceans // *W. Tavolga. Marine bio-Acoustics.* New York: Pergamon Press, 1964. Pp. 316–336.
- [4] **Norris K.S.** The evolution of acoustic mechanisms in Odontocete Cetaceans // *E. Drake. Evolution and Environment.* New Haven-Lond: Yale Univ. Press, 1968. Pp. 297–324.
- [5] **Hemila S., Nummela S., Reuter T.** A model of the odontocete middle ear // *Her. Res.* 1999. Vol. 133. No.1-2. Pp. 82–97.
- [6] **Koopman H.N., Budge S.M., Ketten D.R., Iverson S.J.** Topographical distribution of lipids inside the mandibular fat bodies of Odontocetes: Remarkable complexity and consistency // *J. Ocean. Engin.* 2006. Vol. 31. No. 1. Pp. 95 –106.
- [7] **Muhl B., Au W.W.L., Pawloski J., Nachtigall P.E.** Dolphin hearing: Relative sensitivity as a function of point of application of a contact sound source in the jaw and head region // *J. Acoust. Soc. Amer.* 1999. Vol. 105. No. 6. Pp. 3421–3424.
- [8] **Brill R.L., Moore P.W.B., Helweg D.A., Dankiewicz L.A.** Investigating the dolphin's peripheral hearing system: acoustic sensitivity about the head and lower jaw // *Technical Report.* 1865. 2001. Pp. 1–14.
- [9] **Dobbins P.F.** Dolphin sonar – modelling a new receiver concept // *Bioinspiration & Biomimetics.* Inst. Phys. Publ. UK. 2007. 2. Pp. 19–29.
- [10] **Рябов В.А.** Особенности акустического поля мешающих отражений и эхолокационный слух дельфина // *Биофизика.* 2008. Т. 53. № 3. С. 504–512.
- [11] **Ryabov V.A.** A dolphin lower jaw is a hydroacoustic antenna of the traveling wave. Abstracts of 146 meeting of ASA // *J. Acoust. Soc. Amer.* 2003. Vol. 114. No. 4. Pp. 2414–2415.
- [12] **Ryabov V.A.** Lower jaw – peripheric part of the dolphin echolocation hearing // *Belkovich V.M. Marine Mammals of the Holarctic. Collection of scientific papers.* Moscow: KMK, 2004. Pp. 483–489.
- [13] **Ryabov V.A.** Mechanisms of a dolphin's echolocation hearing; Dible, S., Dobbins P., Flint, J. Harland E. Lepper P. *Bio-Acoustics* 2007. (Fourth Int. Conf. on Bio-Acoustics, Loughborough University, UK) // *Proceedings of the Institute of Acoustics.* 2007. Vol. 29. No. 3. Pp. 283–293.
- [14] **Schusterman R.J.** Behavioral methodology in echolocation by marine mammals // *R.-G. Busnel, J.F. Fish. Animal sonar systems.* New York: Plenum Publishing Corp., 1980. Pp. 11–41.
- [15] **Johnson C.S.** Sound detection thresholds in marine mammals // *Tavolga, W.N. Marine Bio-Acoustics II.* Oxford: Pergamon Press, 1967. Pp. 247–260.
- [16] **Johnson C.S.** Masked tonal threshold in the bottlenose porpoise // *J. Acoust. Soc. Am.* 1968. Vol. 44. No. 4. Pp. 965–967.
- [17] **Бабушина Е.С.** Звуковая рецепция морских млекопитающих в зависимости от параметров и путей проведения звука // *Биофизика.* 1999. Т. 44. № 6. С. 1101–1108.
- [18] **Бабушина Е.С.** Звуковая рецепция морских млекопитающих в зависимости от параметров и путей проведения звука // *Биофизика.* 2000. Т. 45. № 5. С. 927–934.
- [19] **Reysenbach de Haan F.W.** Hearing in whales // *Acta Otolaryngol. Suppl.* 1957. Vol. 134. Pp. 1–114.
- [20] **Fraser F.C., Purves P.E.** Hearing in the Cetaceans: Evolution of the accessory air sacs and the structure and function of the outer and middle ear in recent cetaceans // *Bull. Brit. Museum Nat.*



History. Zool. 1960. Vol. 7. No. 1. Pp. 1–140.

[21] **Dudok van Heel W.H.** Sound and Cetacean // *Neth. J. Sea. Res.* 1962. Vol. 1. No. 4. Pp. 407–507.

[22] **Римская-Корсакова Л.К., Дубровский Н.А.** Участие двух путей проведения звуков к улитке в формировании пространственного слухового образа у дельфинов // *Сенсорные системы.* 1998. Т. 12. № 4. С. 497–506.

[23] **Popov V.V., Supin A.Y., Klishin V.O., et al.** Evidence for double acoustic windows in the dolphin. *Tursiops truncatus* // *J. Acoust. Soc. Am.*

2008. Vol. 123. No. 1. Pp. 552–560.

[24] **Ryabov V.A.** Properties of the dolphin's mandible horn // *Marine Mammals of the Holarctic/ Ed. Boltunov A.N. Collection of Scientific Papers.* Odessa: Astroprint Publishing House, 2008. Pp. 468–473.

[25] **Ryabov V.A.** Role of the mental foramens in dolphin hearing // *Natural Science.* 2010. Vol. 2. No. 6. Pp. 646–653.

[26] **Рябов В.А.** Механизмы приема и проведения звука у дельфина // *Биофизика.* 2014. Т. 59. № 3. С. 579–590.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

РЯБОВ Вячеслав Александрович — кандидат биологических наук, старший научный сотрудник ФГБУН «Карадагская научная станция им. Т.И. Вяземского — природный заповедник РАН», г. Феодосия. 298188, Российская Федерация, г. Феодосия, ПГТ Курортное, ул. Науки, 24
ryabovfff@inbox.ru

Ryabov V.A. THE EFFECT OF ACOUSTIC SHIELDING THE REGION OF A DOLPHIN'S MENTAL FORAMENS ON ITS HEARING SENSITIVITY.

The effect of acoustic shielding the mental foramens of a bottlenose dolphin (*Tursiops truncatus*) on its auditory thresholds has experimentally been studied using the method of instrumental conditioned reflexes with food reinforcement. The detection thresholds of short broadband acoustic pulses deteriorated significantly (by 30–50 dB), under conditions of acoustic shielding the region of the mental foramens over the whole frequency band of a dolphin's hearing. Therefore, the mental foramens of its lower jaw take part in reception and conducting the sounds into the mandibular fat body in the entire frequency range of a dolphin's hearing. The obtained results give an experimental proof for the assumption that the morphological structures of the lower jaw play a role of the peripheral part of a dolphin's hearing. Now there are grounds to assume that Odontoceti have the similar peripheral part of their hearing. This assumption is based on similarity of their morphology.

DOLPHIN, HEARING THRESHOLD, MENTAL FORAMENS, SHIELDING, ACOUSTICS, LOWER JAW.

REFERENCES

[1] **J.G. McCormick, E.G. Wever, J. Palin, S.H. Ridgway,** Sound conduction in the dolphin ear, *J. Acoust. Soc. Amer.* 48 (6-2) (1970) 1418–1428.

[2] **T.H. Bullock, A.D. Grinell, E. Ikezono, et al.,** Electrophysiological studies of central auditory mechanisms in cetaceans, *Z. Vergl. Physiol.* 59 (2) (1968) 117–156.

[3] **K.S. Norris,** Some problems of echolocation in cetaceans, *W. Tavolga, Marine bio-Acoustics,* New York, Pergamon Press, 1964, 316–336.

[4] **K.S. Norris,** The evolution of acoustic mechanisms in Odontocete Cetaceans, *E. Drake. Evolution and Environment,* New Haven-Lond: Yale Univ. Press, 1968, 297–324.

[5] **S. Hemila, S. Nummela, T. Reuter,** A model of the odontocete middle ear, *Her. Res.* 133 (1-2) (1999) 82–97.

[6] **H.N. Koopman, S.M. Budge, D.R. Ketten, S.J. Iverson,** Topographical distribution of lipids inside the mandibular fat bodies of Odontocetes:

Remarkable complexity and consistency, *J. Ocean. Engin.* 31(1) (2006) 95–106.

[7] **B. Muuhl, W.W.L. Au, J. Pawloski, P.E. Nachtigall,** Dolphin hearing: Relative sensitivity as a function of point of application of a contact sound source in the jaw and head region, *J. Acoust. Soc. Amer.* 105 (6) (1999) 3421–3424.

[8] **R.L. Brill, P.W.B. Moore, D.A. Helweg, L.A. Dankiewicz,** Investigating the dolphin's peripheral hearing system: acoustic sensitivity about the head and lower jaw, *Tehnickal Report 1865.* (2001) 1–14.

[9] **P.F. Dobbins,** Dolphin sonar – modelling a new receiver concept, *Bioinspiration & Biomimetics, Inst. Phys. Publ., UK.* 2 (2007) 19–29.

[10] **V.A. Ryabov,** Osobennosti akusticheskogo polya meshayushchikh otrazheniy i ekholokatsionnyy slukh delfina, *Biofizika.* 53(3) (2008) 504–512.

[11] **V.A. Ryabov,** A dolphin lower jaw is a hydroacoustic antenna of the traveling wave, Abstracts of 146 meeting of ASA, *J. Acoust. Soc.*

Amer. 114(4) (2003) 2414–2415.

[12] **V.A. Ryabov**, Lower jaw – peripheric part of the dolphin echolocation hearing / Belkovich V.M. Marine Mammals of the Holarctic. Collection of scientific papers. Moscow: KMK, 2004. P. 483–489.

[13] **V.A. Ryabov**, Mechanisms of a dolphin's echolocation hearing, Dible, S., Dobbins P., Flint, J. Harland E. Lepper P. Bio-Acoustics 2007, (Fourth Int. Conf. on Bio-Acoustics, Loughborough University, UK), Proceedings of the Institute of Acoustics. 29(3) (2007) 283–293.

[14] **R.J. Schusterman**, Behavioral methodology in echolocation by marine mammals, R.-G. Busnel, J.F. Fish, Animal sonar systems, New York, Plenum Publishing Corp., 1980, 11–41.

[15] **C.S. Johnson**, Sound detection thresholds in marine mammals, Tavolga W.N. Marine Bio-Acoustics II. Oxford, Pergamon Press, 1967, 247–260.

[16] **C.S. Johnson**, Masked tonal threshold in the bottlenose porpoise, J. Acoust. Soc. Am. 44(4) (1968) 965–967.

[17] **E.S. Babushina**, Zvukovaya retseptsiya morskikh mlekopitayushchikh v zavisimosti ot parametrov i putey provedeniya zvuka [The sound reception of marine mammals as a function of parameters and the ways of sound conduction], Biofizika. 44(6) (1999) 1101–1108.

[18] **E.S. Babushina**, Zvukovaya retseptsiya morskikh mlekopitayushchikh v zavisimosti ot parametrov i putey provedeniya zvuka [The sound reception of marine mammals as a function of parameters and the ways of sound conduction],

Biofizika. 45(5) (2000) 927–934.

[19] **F.W. Reysenbach de Haan**, Hearing in whales, Acta Otolaryngol. Suppl. 134 (1957) 1–114.

[20] **F.C. Fraser, P.E. Purves**, Hearing in the cetaceans: Evolution of the accessory air sacs and the structure and function of the outer and middle ear in recent cetaceans, Bull. Brit. Museum Nat. History, Zool. 7(1) (1960) 1–140.

[21] **W.H. Dudok van Heel**, Sound and cetacean, Neth. J. Sea. Res. 1(4) (1962) 407–507.

[22] **L.K. Rinskaya-Korsakova, N.A. Dubrovskiy**, Uchastiye dvukh putey provedeniya zvukov k ulitke v formirovaniye prostranstvennogo slukhovogo obraza u delfinov [Sharing of the two ways of the sound conduction to the coclea when spatial hearing image forms in dolphins], Sensornyye sistemy. 12(4) (1998) 497–506.

[23] **V.V. Popov, A.Y. Supin, V.O. Klishin, et al.**, Evidence for double acoustic windows in the dolphin, Tursiops truncatus, J. Acoust. Soc. Am. 123(1) (2008) 552–560.

[24] **V.A. Ryabov**, Properties of the dolphin's mandible horn, Marine Mammals of the Holarctic, Ed. Boltunov, A.N. Collection of Scientific Papers, Odessa, Astroprint Publishing House (2008) 468–473.

[25] **V.A. Ryabov**, Role of the mental foramina in dolphin hearing, Natural Science. 2(6) (2010) 646–653.

[26] **V.A. Ryabov**, Mexanizmy priyema i provedeniya zvuka u delfina [Mechanisms of sound reception and conducting in a dolphin], Biofizika, 59(3) (2014) 579–590.

THE AUTHOR

RYABOV Vyacheslav A.

T.I. Vyzemsky Karadag Scientific Station – Nature Reserve of RAS

24 Nauki St., Kurortnoye, Feodosiya, 298188, Russian Federation

ryabovff@inbox.ru

DOI: 10.5862/JPM.248.12

УДК: 539.3: 519.6

М.В. Сухотерин, С.О. Барышников, К.О. Ломтева

Государственный университет морского и речного флота
имени адмирала С.О. Макарова, г. Санкт-Петербург

ОБ ОДНОРОДНЫХ РЕШЕНИЯХ ЗАДАЧИ ИЗГИБА ПРЯМОУГОЛЬНОЙ КОНСОЛЬНОЙ ПЛАСТИНЫ

В статье рассматривается метод, предложенный П.Ф. Папковичем для прямоугольных пластин, и его приложение для консольной пластины при изгибе равномерной нагрузкой. Искомая функция прогибов выбирается в виде суммы соответствующей балочной функции и бигармонической функции; последняя представляет собой бесконечный ряд по неортогональным собственным функциям задачи. Собственные функции удовлетворяют однородным граничным условиям на продольных кромках (заделка и противоположный край). Предлагается находить коэффициенты ряда из условия минимума работы невязок на соответствующих перемещениях поперечных кромок. Это приводит к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений относительно искомых коэффициентов в комплексной форме. Коэффициенты однородных решений находились для случаев, когда аппроксимирующий ряд содержал последовательно 2, 3, ..., 7 слагаемых. Вычислялись собственные числа, прогибы края, противоположного заделке, и изгибающие моменты в заделанном сечении. Анализируется сходимость метода редукции и устойчивость вычислительного процесса.

ПРЯМОУГОЛЬНАЯ КОНСОЛЬНАЯ ПЛАСТИНА, ИЗГИБ, ОДНОРОДНОЕ РЕШЕНИЕ, ЧИСЛЕННЫЙ РЕЗУЛЬТАТ, НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ВЫЧИСЛЕНИЙ.

Введение

Прямоугольная консольная пластина является расчетной схемой для многих элементов инженерных конструкций. В частности, режущий инструмент ряда технологических операций выполняется в виде прямоугольных пластин, жестко защемленных по одному краю. С анализом напряженного и деформированного состояний консольных пластин связаны также расчеты прочности и жесткости отдельных элементов в конструкциях гидротурбин, кораблей, самолетов и ракет. Задача изгиба прямоугольной консольной пластины не имеет точного замкнутого решения, а известные приближенные решения требуют

анализа точности полученных результатов. Разброс численных результатов у различных авторов достигает 20 %.

Целью настоящей работы является получение достоверных численных результатов о напряженно-деформированном состоянии этих пластин методом однородных решений.

Первая работа по расчету консольных пластин принадлежит Д.Л. Холлу [1], который использовал метод конечных разностей (МКР, или метод сеток) для широкой пластины с отношением сторон 4 : 1. Нагрузкой служила сосредоточенная сила, приложенная в середине свободного края, противоположного защемленному. Этот ме-

тод использовали также многие авторы для различных видов нагрузки, отношения сторон пластины и шага сетки. Метод конечных элементов (МКЭ) впервые применили О. Zienkiewicz и Y. Cheung [2]; они разбили квадратную пластину на девять квадратных элементов и рассмотрели случай равномерной нагрузки. Для решения указанной задачи применялись и другие приближенные методы: Рэлея – Ритца, Бубнова – Галёркина, Канторовича – Власова и пр. В работе [3] функцию прогибов находили методом бесконечной суперпозиции исправляющих функций в виде гиперболических рядов; в ходе применения метода все невязки в граничных условиях стремились к нулю, обеспечивая в пределе точное решение задачи.

Однородные решения и соотношения обобщенной ортогональности упругих прямоугольных пластин

Решение бигармонического уравнения

$$\nabla^2 \nabla^2 w = 0 \quad (1)$$

П.Ф. Папкович [4] разыскивал в виде

$$w(x, y) = \sum_k c_k e^{-\beta_k x} F_k(y). \quad (2)$$

где ∇^2 – двумерный оператор Лапласа, w – прогиб пластины, c_k – коэффициенты ряда, β_k – собственные числа, $F_k(y)$ – собственные функции задачи.

Для плоской задачи теории упругости w – функция Эйри, а в случае изгиба тонкой пластины – это прогиб. Для функций $F_k(y)$ после подстановки суммы (2) в уравнение (1) получается обыкновенное дифференциальное уравнение

$$F_k^{IV} + 2\beta_k^2 F_k'' + \beta_k^4 F_k = 0, \quad (3)$$

общее решение которого имеет вид

$$F_k(y) = A_k \sin \beta_k y + B_k \cos \beta_k y + C_k y \cos \beta_k y + D_k y \sin \beta_k y. \quad (4)$$

Рассмотрим прямоугольную пластину с относительными размерами

$$-\gamma/2 \leq x \leq \gamma/2, \quad 0 \leq y \leq 1,$$

где $\gamma = a/b$ – отношение сторон пластины.

Если потребовать, чтобы функция прогибов (2) пластины удовлетворяла однородным граничным условиям на краях $y = 0$, $y = 1$, то для каждого вида этих условий получается трансцендентное уравнение, решением которого являются собственные числа β_k . Например, когда пластина закреплена на обоих краях, трансцендентное уравнение выглядит следующим образом:

$$\sin 2\beta_k \pm 2\beta_k = 0$$

(здесь знак плюс относится к четным функциям в выражении (4), минус – к нечетным).

Подобные уравнения имеют бесчисленное множество комплексных корней, группирующихся по квартетам (отдельные корни могут быть и действительными).

Если собственные числа найдены, то функции $e^{-\beta_k x} F_k(y)$ называют однородными решениями.

Для неортогональной системы комплексных функций – собственных функций задачи $F_k(y)$ авторы работ [5, 6] установили соотношение

$$\int_0^1 [F_k''(y) F_s'(y) - \beta_k^2 \beta_s^2 F_k(y) F_s(y)] dy = 0 \quad (5)$$

(при $k \neq s$), которое называется соотношением обобщенной ортогональности.

Коэффициенты c_k ряда (2) должны определяться из граничных условий на поперечных краях $x = \pm \gamma/2$. Поскольку обычно таких условий два, а последовательность коэффициентов c_k одна, в общем случае не удастся строго удовлетворить сразу двум граничным условиям. Здесь следует отметить, что хотя коэффициенты c_k имеют действительные и мнимые части, однако требование вещественности результатов связывает их между собой. Однако в частном случае, если граничные условия задачи таковы, что для отыскания коэффициентов c_k необходимо совместное разложение на краях $x = \pm \gamma/2$ двух различных заданных функций от y в ряды вида

$$\begin{aligned} f_1(y) &= \sum_k a_k L_1[F_k(y)], \\ f_2(y) &= \sum_k a_k L_2[F_k(y)] \end{aligned} \quad (6)$$

(a_k — некоторые неизвестные комплексные постоянные, пропорциональные c_k), а функции L_1 и L_2 выражаются формулами

$$L_1[F_k(y)] = F_k(y), L_2[F_k(y)] = \beta_k^2 F_k(y) \quad (7)$$

или формулами

$$L_1[F_k(y)] = \beta_k F_k(y), L_2[F_k(y)] = \beta_k^3 F_k(y), \quad (8)$$

то удастся удовлетворить сразу двум условиям (см., например, работу [4]); при этом используется соотношение обобщенной ортогональности (5), и с помощью приема Фурье находят коэффициенты a_k .

Соотношение (5) было доказано для случая, когда края $y = 0$, $y = 1$ зашпелены. В работе [7] было показано, что указанное соотношение имеет место и для свободных краев, а также когда один из них зашпелен, а другой свободен.

Таким образом, соотношение обобщенной ортогональности справедливо и для консольной пластины, однако точно удовлетворить двум условиям на свободных поперечных краях $x = \pm \gamma / 2$ с его помощью не удастся, так как выражения функций L_1 и L_2 в этом случае отличаются от соответствующих выражений (7) и (8).

Таким образом, при решении задачи об изгибе консольной пластины следует использовать какой-либо приближенный метод, чтобы определить коэффициенты разложения (2). Например, можно строго выполнить только одно граничное условие или минимизировать некоторый функционал, например функционал потенциальной энергии, квадратичных погрешностей выполнения граничных условий, работы невязок на соответствующих перемещениях и т. п.

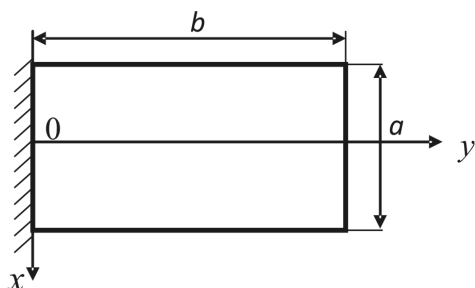


Рис. 1. Прямоугольная консольная пластина: $a = \gamma$, $b = 1$ ($\gamma = a/b$ — отношение сторон пластины)

Однородные решения и трансцендентное уравнение задачи для консольной пластины

Рассмотрим теперь задачу изгиба консольной пластины (рис. 1) [8] под действием равномерной поперечной нагрузки q_0 :

$$\nabla^2 \nabla^2 w = -1 \quad (9)$$

с граничными условиями

$$w = 0; \quad w'_y = 0 \quad (\text{при } y = 0); \quad (10)$$

$$M_y = -(w''_{yy} + \nu w''_{xx}) = 0,$$

$$V_y = -[w'''_{yyy} + (2 - \nu)w'''_{xyy}] = 0 \quad (\text{при } y = 1); \quad (11)$$

$$M_x = -(w''_{xx} + \nu w''_{yy}) = 0,$$

$$Q_x = -[w'''_{xxx} + (2 - \nu)w'''_{xyy}] = 0 \quad (\text{при } x = \pm \gamma / 2); \quad (12)$$

$$H_{xy}(\pm \gamma / 2; 1) = -(1 - \nu)w''_{xy}(\pm \gamma / 2; 1) = 0, \quad (13)$$

где ν — коэффициент Пуассона; M_x, M_y — изгибающие моменты; Q_x, Q_y — поперечные силы; H_{xy} — крутящий момент.

Здесь прогиб отнесен к величине

$$q_0 b^4 / D,$$

где $D = Eh^3 / [12(1 - \nu^2)]$ — цилиндрическая жесткость пластины (E — модуль Юнга, h — толщина пластины).

Заметим, что условие (13) выражает отсутствие сосредоточенных сил в угловых точках свободной части контура.

Частное решение уравнения (9) выберем в виде балочной функции

$$w_8(y) = -(y^4 - 4y^3 + 6y^2) / 24, \quad (14)$$

которая удовлетворяет граничным условиям заделки ($y = 0$) и противоположного края ($y = 1$), а также условию (13).

Функция (14) порождает на краях $x = \pm \gamma / 2$ невязки

$$g(y) = M_x(\pm \gamma / 2, y) = \nu(y - 1)^2 / 2 \quad (15)$$

(в виде изгибающего момента).

Однородные бигармонические решения, в силу симметрии нагрузки, будут содержать четную функцию координаты x :

$$w_{hs}(x, y) = \text{ch } \beta x (A \sin \beta y + B \cos \beta y + C y \cos \beta y + D y \sin \beta y), \quad (16)$$

где β – некоторый параметр (собственное число); A, B, C, D – неизвестные коэффициенты.

Общее решение задачи представляется суммой

$$w(x, y) = w_\delta(y) + w_{hs}(x, y). \quad (17)$$

Коэффициенты A, B, C, D в формуле (16) найдутся из граничных условий на продольных краях: $y = 0$ и $y = 1$.

Удовлетворяя условиям при $y = 0$, получим $A\beta + C; B = 0$, и тогда решение (16) можно записать в следующем виде:

$$w_{hs}(x, y) = \operatorname{ch} \beta x [A(\sin \beta y - \beta y \cos \beta y) + Dy \sin \beta y]. \quad (18)$$

Запишем выражения изгибающего момента и перерезывающей силы на краю $y = 1$:

$$\begin{aligned} [M_y]_{y=1} &= -\beta \operatorname{ch} \beta x \{A\beta[(1 + \nu) \sin \beta + \\ &\quad + (1 - \nu)\beta \cos \beta] + \\ &\quad + D[2 \cos \beta - (1 - \nu)\beta \sin \beta]\}, \\ [V_y]_{y=1} &= -\beta^2 \operatorname{ch} \beta x \{A\beta[2 \cos \beta + \\ &\quad + (1 - \nu)\beta \sin \beta] + \\ &\quad + D[(1 - \nu)\beta \cos \beta - (1 + \nu) \sin \beta]\}. \end{aligned} \quad (19)$$

Далее, если потребовать обращение в нуль этих величин при любых значениях x , то получим систему двух уравнений для определения коэффициентов A и D :

$$\begin{aligned} A\beta[(1 + \nu) \sin \beta + (1 - \nu)\beta \cos \beta] + \\ + D[2 \cos \beta - (1 - \nu)\beta \sin \beta] &= 0, \\ A\beta[2 \cos \beta + (1 - \nu)\beta \sin \beta] + \\ + D[(1 - \nu)\beta \cos \beta - (1 + \nu) \sin \beta] &= 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Для того чтобы система имела нетривиальное решение, ее определитель должен обращаться в нуль; это приводит к трансцендентному уравнению относительно параметра β :

$$\cos 2\beta = \alpha_1 \beta^2 + \alpha_2, \quad (21)$$

где

$$\alpha_1 = 2 \frac{1 - \nu}{3 + \nu}, \quad \alpha_2 = -\frac{5 + 2\nu + \nu^2}{(3 + \nu)(1 - \nu)}. \quad (22)$$

Трансцендентное уравнение (21) получено аналогичными рассуждениями в той

или иной форме в работах ряда авторов [9 – 11]. Подробное исследование этого уравнения проведено в работе [11], где показано, что оно имеет бесчисленное множество комплексных корней. Причем, как легко видеть, если

$$\beta_k = p_k + iq_k \quad (23)$$

есть корень уравнения (21), то корнем будет и любая комбинация вида

$$\beta_k = \pm p_k \pm iq_k.$$

Подставляя выражение (23) в уравнение (21) и разделяя действительную и мнимую части, приходим к двум уравнениям, связывающим p_k и q_k :

$$\begin{aligned} \cos(2p_k) \operatorname{ch}(2q_k) &= \alpha_1(p_k^2 - q_k^2) + \alpha_2, \\ \sin(2p_k) \operatorname{sh}(2q_k) &= -2\alpha_1 p_k q_k. \end{aligned} \quad (24)$$

Корни этой системы таковы [11], что положительные числа p_k лежат в следующих пределах:

$$(2k - 1)\pi / 2 < p_k < k\pi \quad (k = 1, 2, 3, \dots). \quad (25)$$

При отыскании p_k и q_k для первого приближения можно принять, что

$$p_1 = 3\pi / 4, p_k = k\pi \quad (k = 2, 3, 4, \dots). \quad (26)$$

Мнимая часть найдется из трансцендентного уравнения

$$\operatorname{sh} 2q_1 = \frac{3}{2} \pi \alpha_1 q_1 \quad (k = 1); \quad (27)$$

$$\operatorname{ch} 2q_k + \alpha_1 q_k^2 = \alpha_1 \pi^2 k^2 + \alpha_2 \quad (k = 2, 3, 4, \dots).$$

Последующие приближения находятся по способу Ньютона:

$$\beta_{j+1} = \beta_j - f(\beta_j) / f'(\beta_j), \quad (28)$$

$$\text{где } f(\beta) = \cos 2\beta - \alpha_1 \beta^2 - \alpha_2. \quad (29)$$

В статье [11] приведены значения первых пяти кварталов комплексных корней для $\nu = 0,25$, однако в этом случае уравнение (21) имеет и два вещественных корня, которые различаются только знаками. Вещественные корни пропущены также в работе [9] для $\nu = 0,3$.

Подставляя выражение (23) в уравнение (28) и разделяя действительную и мнимую части, получим:

$$\begin{aligned} p_{j+1} &= p_j + \frac{\tau\rho - \eta\psi}{2(\rho^2 + \psi^2)}, \\ q_{j+1} &= q_j - \frac{\tau\psi + \eta\rho}{2(\rho^2 + \psi^2)}. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} \tau &= \cos(2p_j) \operatorname{ch}(2q_j) - \alpha_1(p_j^2 - q_j^2) - \alpha_2, \\ \eta &= \sin(2p_j) \operatorname{sh}(2q_j) + 2\alpha_1 p_j q_j, \\ \rho &= \sin(2p_j) \operatorname{ch}(2q_j) + \alpha_1 p_j, \\ \psi &= \cos(2p_j) \operatorname{sh}(2q_j) + \alpha_1 q_j. \end{aligned} \quad (31)$$

Первые девять комплексных корней трансцендентного уравнения (21), рассчитанные нами на компьютере для $\nu = 0,3$ по формулам (30), представлены в табл. 1.

Возвращаясь к системе (20), из ее первого уравнения получаем:

$$D = -\beta \frac{(1+\nu)\sin\beta + (1-\nu)\beta\cos\beta}{2\cos\beta - (1-\nu)\beta\sin\beta} A. \quad (32)$$

Заметим, что с помощью второго уравнения системы (20) также можно выразить D через A , но такая форма решения в конечном счете даст тот же результат, что и первая, так как они связаны уравнением (21).

Теперь однородные решения (18) запишутся в виде бесконечного ряда

Таблица 1

Рассчитанные значения корней $\beta_k = p_k + iq_k$

k	p_k	q_k
0	2,7068258	0
1	2,0272256	0,3565346
2	5,9638225	1,6741655
3	9,1813235	2,1312056
4	12,364771	2,4345402
5	15,534117	2,6642475
6	18,695830	2,8498262
7	21,852829	3,0057721
8	25,006673	3,1403666
9	28,158283	3,2588123

Примечание. Ошибка в последнем восьмом знаке каждого числа не превышает двух единиц.

$$w_{hs}(x, y) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k \operatorname{ch} \beta_k x F_k(y), \quad (33)$$

где собственные функции имеют вид

$$\begin{aligned} F_k(y) &= d_k (\sin \beta_k y - \beta_k y \cos \beta_k y) - \\ &- e_k \beta_k y \sin \beta_k y, \end{aligned} \quad (34)$$

а в свою очередь

$$\begin{aligned} d_k &= 2 \cos \beta_k - (1-\nu) \beta_k \sin \beta_k, \\ e_k &= (1+\nu) \sin \beta_k + (1-\nu) \beta_k \cos \beta_k. \end{aligned} \quad (35)$$

В решении (33), которое удовлетворяет бигармоническому уравнению и граничным условиям на продольных кромках $y = 0, y = 1$, коэффициенты A_k должны определяться из граничных условий (12), (13) на поперечных кромках $x = \pm \gamma/2$; эти граничные условия с учетом формулы (15) примут вид

$$\begin{aligned} [M_x]_{x=\pm\frac{\gamma}{2}} &= g(y) - \sum_k a_k [\beta_k^2 F_k(y) + \\ &+ \nu F_k''(y)] = 0, \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} [Q_x]_{x=\pm\frac{\gamma}{2}} &= -\sum_k a_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k [\beta_k^3 F_k(y) + \\ &+ (2-\nu) \beta_k F_k''(y)] = 0, \end{aligned} \quad (37)$$

$$[R_{xy}]_{x=\pm\frac{\gamma}{2}, y=1} = 2(1-\nu) \sum_k a_k \beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k F_k'(1) = 0, \quad (38)$$

где сосредоточенная сила в угловой точке $R_{xy} = -2H_{xy}$;

$$\tilde{\beta}_k = \beta_k \gamma/2, \quad a_k = A_k \operatorname{ch} \tilde{\beta}_k. \quad (39)$$

Таким образом, для того чтобы найти коэффициенты A_k (или a_k) ряда (33), нужно функцию $g(y)$ (см. формулу (15)) разложить в ряд по неортогональным функциям вида (36) и, кроме того, выполнить условия (37) и (38). Строго удовлетворить указанным требованиям не представляется возможным, поэтому обратимся к приближенному способу, основанному на минимизации некоторого функционала.

В работах [12, 13] доказывается, что элементарные однородные решения бигармонического уравнения образуют полную систему функций (о полноте системы функций см., например, работу [14]). Из этого, в частности, следует существование и единственность решения бесконечной

системы, получаемой путем минимизации функционала

$$\Phi = \Phi_2(a_0, a_1, \dots) + \Phi_1(a_0, a_1, \dots) + \Phi_0,$$

который является положительно-определенной функцией и представлен в виде суммы квадратичной (Φ_2) и линейной (Φ_1) форм коэффициентов a_k однородных решений и постоянного слагаемого. Из этого же следует сходимость метода редукции для определения a_k и сходимость приближенных решений при $k \rightarrow \infty$.

В качестве функционала Φ могут быть выбраны потенциальная энергия пластины, квадратичные отклонения от граничных условий задачи, работа этих невязок (силовых факторов) на соответствующих перемещениях и т. п.

Решение исходной задачи (17) с учетом формулы балочной функции (14) и бесконечного ряда (33) запишется в виде

$$w(x, y) = -(y^4 - 4y^3 + 6y^2) / 24 + \sum_k A_k \operatorname{ch} \beta_k x F_k(y), \quad (40)$$

где $A_k = a_k / \operatorname{ch} \tilde{\beta}_k$, а $F_k(y)$ определяется формулой (34).

Поскольку при замене комплексного параметра β_k ($k = 1, 2, \dots$) на сопряженное значение $\tilde{\beta}_k = p_k - iq_k$ (оно также является корнем уравнения (21)) выражение под знаком суммы в решении (40) тоже заменится на сопряженное, то результат, как и следовало ожидать, получается вещественным.

Если теперь заметить, что функции $F_k(y)$ и коэффициенты A_k нечетны по отношению к β_x , то решение задачи можно записать в виде

$$w(x, y) = -(y^4 - 4y^3 + 6y^2) / 24 + 2A_0 \operatorname{ch} \beta_0 x F_0(y) + 4 \operatorname{Re} \sum_{k=1,2,\dots} A_k \operatorname{ch} \beta_k x F_k(y), \quad (41)$$

где учитываются лишь те собственные числа $\beta_k = p_k + iq_k$, которые имеют положительные действительные и мнимые части $p_k, q_k > 0$ (в случае двух вещественных корней учитывается корень $\beta_0 > 0$).

Определение коэффициентов в однородных решениях минимизацией работы краевых невязок

Для того чтобы найти указанные коэффициенты, используем левые части граничных условий на поперечных кромках $x = \pm \gamma / 2$ и в углах свободного контура (36) – (38). Эти выражения будем называть невязками граничных условий, так как в общем случае они отличны от нуля.

Минимизируем работу указанных невязок на соответствующих перемещениях.

Эта работа следует выражению

$$P = \int_0^1 (-M_x w'_x + Q_x w)_{x=\gamma/2} dy + (R_{xy} w)_{x=\gamma/2} \Big|_{y=1} \quad (42)$$

Подставляя в это выражение формулы (17), (33), (36) – (38), получим:

$$P = - \int_0^1 \left\{ g(y) - \sum_k a_k [\beta_k^2 F_k(y) + \nu F_k''(y)] \right\} \times \\ \times \sum_k a_k \beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k F_k(y) + \left[w_\delta(y) + \sum_k a_k F_k(y) \right] \times \\ \times \sum_k a_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k [\beta_k^3 F_k(y) + (2 - \nu) \beta_k F_k''(y)] \Big\} dy + \\ + 2(1 - \nu) \left[w_\delta(1) + \sum_k a_k F_k(1) \right] \times \\ \times \sum_k a_k \beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k F_k'(1). \quad (43)$$

Условие минимума функционала выражается как

$$\partial P / \partial a_j = 0 \quad (44)$$

и приводит к бесконечной системе линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов a_k :

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k J_{kj} = T_j, \quad (45)$$

где

$$J_{kj} = \int_0^1 [L_k^{(M)}(y) L_j^{(9)}(y) + L_j^{(M)}(y) L_k^{(9)}(y) - \\ - L_k^{(Q)}(y) F_j(y) - L_j^{(Q)}(y) F_k(y)] dy + \\ + 2(1 - \nu) [L_k^{(R)} F_j(1) + L_j^{(R)} F_k(1)], \quad (46)$$

$$T_j = \int_0^1 [g(y) L_j^{(9)}(y) + w_\delta(y) L_j^{(Q)}(y)] dy - \\ - 2(1 - \nu) w_\delta(1) L_j^{(R)}; \quad (47)$$



функции, обозначенные буквой L , имеют вид

$$\begin{aligned} L_k^{(9)}(y) &= \beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k F_k(y), \quad L_k^{(R)} = \beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k F_k'(1), \\ L_k^{(M)}(y) &= \beta_k^2 F_k(y) + \nu F_k''(y), \\ L_k^{(O)}(y) &= [\beta_k^3 F_k(y) + (2 - \nu) \beta_k F_k''(y)] \operatorname{th} \tilde{\beta}_k. \end{aligned} \quad (48)$$

Аналогичные функции с индексом j получаются из соответствующих выражений заменой индексов.

Выполняя интегрирование в выражениях (46), (47) и обычные преобразования, получим:

$$\begin{aligned} T_j &= \frac{1}{24\beta_j^2} \operatorname{th} \tilde{\beta}_j \{ d_j [3(1 - \nu)\beta_j^4 - \\ &- 4(1 + \nu)\beta_j^2 - 24(1 - 2\nu)] \beta_j \sin \beta_j + \\ &+ 2[(1 + 2\nu)\beta_j^4 - 24(1 - 4\nu)] \cos \beta_j + 48\nu\beta_j^2 + \\ &+ 48(1 - 4\nu) \} - e_j \{ [(1 - 7\nu)\beta_j^4 + \\ &+ 24(1 - 6\nu)] \sin \beta_j + [3(1 - \nu)\beta_j^4 - 8\beta_j^2 - \\ &- 24(1 - 2\nu)] \beta_j \cos \beta_j + 96\nu\beta_j \}; \\ J_{kj} &= -\frac{1}{2} \{ (h_\varepsilon - h_\omega) d_k d_j t_1 - (m_\omega - m_\varepsilon) e_k d_j t_2 - \\ &- (m_\omega + m_\varepsilon) d_k e_j \tilde{t}_2 + (s_\varepsilon - s_\omega) (e_k d_j t_3 + d_k e_j \tilde{t}_3) + \\ &+ (s_\omega + s_\varepsilon) (e_k d_j \beta_j t_2 + d_k e_j \beta_k \tilde{t}_2) + \\ &+ (u_\omega - u_\varepsilon) (d_k d_j t_3 + e_k e_j \beta_j t_2) + \\ &+ (u_\omega - u_\varepsilon) (d_k d_j \tilde{t}_3 + e_k e_j \beta_k \tilde{t}_2) - \\ &- t_4 [(d_k d_j - e_k e_j) l_\omega + (d_k d_j + e_k e_j) l_\varepsilon + \\ &+ (d_k e_j + e_k d_j) n_\omega + (e_k d_j - d_k e_j) n_\varepsilon] - \\ &- 4(1 - \nu)(t_5 + \tilde{t}_5) \} \quad (k \neq j), \end{aligned} \quad (49)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} t_1 &= \beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k [(3 - \nu)\beta_k^2 - (1 + \nu)\beta_j^2] + \\ &+ \beta_j \operatorname{th} \tilde{\beta}_j [(3 - \nu)\beta_j^2 - (1 + \nu)\beta_k^2], \\ t_2 &= 2\beta_k^2 [(2 - \nu)\beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k - \nu\beta_j \operatorname{th} \tilde{\beta}_j], \\ t_3 &= \beta_k \{ \beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k [(1 - \nu)\beta_k^2 + (1 + \nu)\beta_j^2] - \\ &- \beta_j \operatorname{th} \tilde{\beta}_j [(3 - \nu)\beta_j^2 - (1 - \nu)\beta_k^2] \}, \\ t_4 &= (1 - \nu)\beta_k \beta_j (\beta_k^2 + \beta_j^2) (\beta_k \operatorname{th} \tilde{\beta}_k + \beta_j \operatorname{th} \tilde{\beta}_j), \\ t_5 &= \beta_k^2 \operatorname{th} \tilde{\beta}_k [d_k \beta_k \sin \beta_k - \\ &- e_k (\sin \beta_k + \beta_k \cos \beta_k)] \times \\ &\times [d_j (\sin \beta_j - \beta_j \cos \beta_j) - e_j \beta_j \sin \beta_j]. \end{aligned} \quad (51)$$

Коэффициенты $\tilde{t}_2, \tilde{t}_3, \tilde{t}_5$ получаются из соответствующих выражений путем перестановки индексов k и j . Величины d_k, e_k определяются по формуле (35); значения коэффициентов h, l, m, n, s, u с индексом ω определяются следующими выражениями (значения с индексом ε получаются заменой индексов):

$$\begin{aligned} h_\omega &= \frac{1}{\omega} \sin \omega, \quad l_\omega = \frac{1}{\omega^3} [2\omega \cos \omega + (\omega^2 - 2) \sin \omega], \\ m_\omega &= \frac{1}{\omega} (1 - \cos \omega), \\ n_\omega &= \frac{1}{\omega^3} [2\omega \sin \omega - (\omega^2 - 2) \cos \omega - 2], \\ s_\omega &= \frac{1}{\omega^2} (\cos \omega + \omega \sin \omega - 1), \\ u_\omega &= \frac{1}{\omega^2} [\sin \omega - \omega \cos \omega], \end{aligned} \quad (52)$$

где $\omega = \beta_k + \beta_j, \quad \varepsilon = \beta_k - \beta_j$.

При $k = j$ в формуле (50) следует заменить индекс k на j у коэффициентов d, e, t и параметра β . Кроме того, в этом случае

$$\begin{aligned} m_\varepsilon &= n_\varepsilon = u_\varepsilon = 0, \quad l_\varepsilon = \frac{1}{3}, \quad s_\varepsilon = \frac{1}{2}, \\ h_\varepsilon - h_\omega &= 1 - \frac{1}{2\beta_j} \sin 2\beta_j, \quad m_\omega = \frac{1 - \cos 2\beta_j}{2\beta_j}, \\ n_\omega &= \frac{1}{8\beta_j^3} [4\beta_j \sin 2\beta_j - (4\beta_j^2 - 2) \cos 2\beta_j - 2], \\ l_\omega &= \frac{1}{8\beta_j^3} [4\beta_j \cos 2\beta_j + (4\beta_j^2 - 2) \sin 2\beta_j], \\ s_\omega &= \frac{1}{4\beta_j^2} (\cos 2\beta_j - 1 + 2\beta_j \sin 2\beta_j), \\ u_\omega &= \frac{1}{4\beta_j^2} (\sin 2\beta_j - 2\beta_j \cos 2\beta_j). \end{aligned} \quad (53)$$

Выделим из комплексной системы (45) действительную и мнимую части, положив, как и ранее, $a_k = \lambda_k + i\mu_k$; тогда получим систему $2 \times \infty$ линейных уравнений типа относительно вещественных неизвестных λ_k, μ_k . Выражение этой системы — весьма громоздкое и поэтому здесь не приводится.

Решив указанную систему относительно λ_k, μ_k , мы тем самым найдем комплексные

коэффициенты a_k , дающие минимум функционалу (43). Составленная компьютерная программа позволяет находить указанные вещественные части комплексных коэффициентов

$$a_k = \lambda_k + i\mu_k.$$

Программой предусмотрено вычисление прогибов свободного края ($y = 1$) и изгибающих моментов защемленного края ($y = 0$):

$$[w]_{y=1} = -\frac{1}{8} - 4a_0 \left(\beta_0 - \frac{1}{2} \sin 2\beta_0 \right) \frac{\operatorname{ch} \beta_0 x}{\operatorname{ch}(\beta_0 \gamma/2)} - 8 \operatorname{Re} \sum_{k=1,2,\dots} a_k \left(\beta_k - \frac{1}{2} \sin 2\beta_k \right) \frac{\operatorname{ch} \beta_k x}{\operatorname{ch}(\beta_k \gamma/2)}, \quad (54)$$

$$[M_y]_{y=0} = \frac{1}{2} + 4a_0 \beta_0^2 e_0 \frac{\operatorname{ch} \beta_0 x}{\operatorname{ch}(\beta_0 \gamma/2)} + 8 \operatorname{Re} \sum_{k=1,2,\dots} a_k \beta_k^2 e_k \frac{\operatorname{ch} \beta_k x}{\operatorname{ch}(\beta_k \gamma/2)}. \quad (55)$$

При вычислениях использовалась укороченная система (45), соответствующая количеству n собственных чисел β_k , которое принималось последовательно равным $n = 2, 3, \dots, 8$. Программа была составлена для традиционной системы программирования Фортран, которая использует вычисления с обычной точностью (восемь десятичных цифр в мантиссе).

Коэффициенты a_k однородных решений, прогибы и изгибающие моменты вычислялись для пластин с отношением сторон $\gamma = 0, 5; 1; 2$. В данной статье приведены численные результаты лишь для пластины с отношением сторон $\gamma = 2$. Табл. 2 содержит значения действительных и мнимых частей коэффициентов a_k для различных приближений. На рис. 2 приведены соответственно графики прогибов кромки $y = 1$ и изгибающие моменты M_y в заделке.

Таблица 2

Значения коэффициентов a_k однородных решений для консольной пластины с отношением сторон $\gamma = 2$ в различных приближениях

$n \backslash a_k$	2	3	4	5	6	7
a_0	$3,5460 \cdot 10^{-4}$ 0	$-1,6904 \cdot 10^{-4}$ 0	$-2,8560 \cdot 10^{-4}$ 0	$-2,3812 \cdot 10^{-4}$ 0	$-3,0673 \cdot 10^{-4}$ 0	$-2,8112 \cdot 10^{-4}$ 0
a_1	$-4,8938 \cdot 10^{-4}$ $1,9224 \cdot 10^{-3}$	$1,1152 \cdot 10^{-4}$ $7,0776 \cdot 10^{-4}$	$3,0931 \cdot 10^{-4}$ $3,9588 \cdot 10^{-4}$	$2,7873 \cdot 10^{-4}$ $1,3223 \cdot 10^{-4}$	$2,4019 \cdot 10^{-4}$ $3,0081 \cdot 10^{-4}$	$2,1043 \cdot 10^{-4}$ $1,5977 \cdot 10^{-4}$
a_2	—	$-5,0662 \cdot 10^{-6}$ $1,6410 \cdot 10^{-5}$	$3,8333 \cdot 10^{-6}$ $8,6984 \cdot 10^{-6}$	$2,2329 \cdot 10^{-6}$ $7,2097 \cdot 10^{-6}$	$4,1138 \cdot 10^{-6}$ $3,8810 \cdot 10^{-6}$	$3,7921 \cdot 10^{-6}$ $3,7000 \cdot 10^{-6}$
a_3	—	—	$8,2457 \cdot 10^{-7}$ $1,4970 \cdot 10^{-6}$	$8,2633 \cdot 10^{-7}$ $2,8363 \cdot 10^{-7}$	$7,5411 \cdot 10^{-7}$ $7,2660 \cdot 10^{-7}$	$7,5629 \cdot 10^{-7}$ $6,2377 \cdot 10^{-7}$
a_4	—	—	—	$-3,8964 \cdot 10^{-8}$ $1,5435 \cdot 10^{-7}$	$1,7640 \cdot 10^{-7}$ $1,0928 \cdot 10^{-7}$	$5,3895 \cdot 10^{-8}$ $1,0721 \cdot 10^{-7}$
a_5	—	—	—	—	$7,2555 \cdot 10^{-8}$ $6,3986 \cdot 10^{-9}$	$9,0276 \cdot 10^{-8}$ $2,0807 \cdot 10^{-8}$
a_6	—	—	—	—	—	$1,9447 \cdot 10^{-8}$ $5,4913 \cdot 10^{-9}$

Примечания. $a_k = \lambda_k + i\mu_k$; верхние числа относятся к значениям λ_k , нижние — к значениям μ_k ; n — количество собственных чисел β_k .



Кривая 1 соответствует решению, полученному методом суперпозиции исправляющих функций [3]. Номера кривых на каждом графике, начиная со второго и до предпоследнего, соответствуют количеству $n = 2, 3, \dots$ удерживаемых однородных решений в выражении (40). При этом последняя прямая линия соответствует цилиндрическому изгибу. Для сравнения на рисунках приведены кривые с нулевыми номерами, полученные в работе [10] при учете собственных чисел β_0 и β_1 .

Приведенные результаты (табл. 2 и рис. 2) показывают, что с увеличением числа членов в выражении (40) имеет место сходимость полученного решения. Однако сравнение графиков прогибов и моментов с аналогичными кривыми, полученными методом суперпозиции исправляющих функций [3] указывает на то, что применение данного способа для отыскания коэффициентов однородных решений дает заниженные значения изгибающих моментов M_y в заданном сечении, хотя поведение кривых аналогичное. Полученные абсолютные значения прогибов оказались также ниже, чем соответствующие значения, для определения которых использовался метод суперпозиции.

Авторы работ [10, 15] отмечают, что с увеличением числа членов в выражении функции прогибов (более двух-трех), представляющем собой некоторый ряд по начальным [10] или однородным [15] функциям, численные результаты дают расходящееся решение (так это и получено в указанных публикациях). Снижение точности связывается авторами с ростом модулей собственных чисел β_k , что приводит к сближению гиперболических функций синуса и косинуса, содержащих эти величины. В работе [10] указывается, что увеличение количества удерживаемых членов в решении необходимо сопровождать увеличением и числа значащих цифр в корнях β_k , а также во всех вычислениях.

В настоящей работе все расчеты, включая вычисление собственных чисел β_k , производились более точно, чем в работах [10, 15]. Поэтому построение решения, дающего минимум функционалу (43), имело

характер сходящегося процесса, как это и должно быть. Однако сравнение с результатами, полученными методом суперпозиции исправляющих функций, приводит к заключению, что проведенные нами расчеты методом однородных решений также трудно признать полностью удовлетвори-

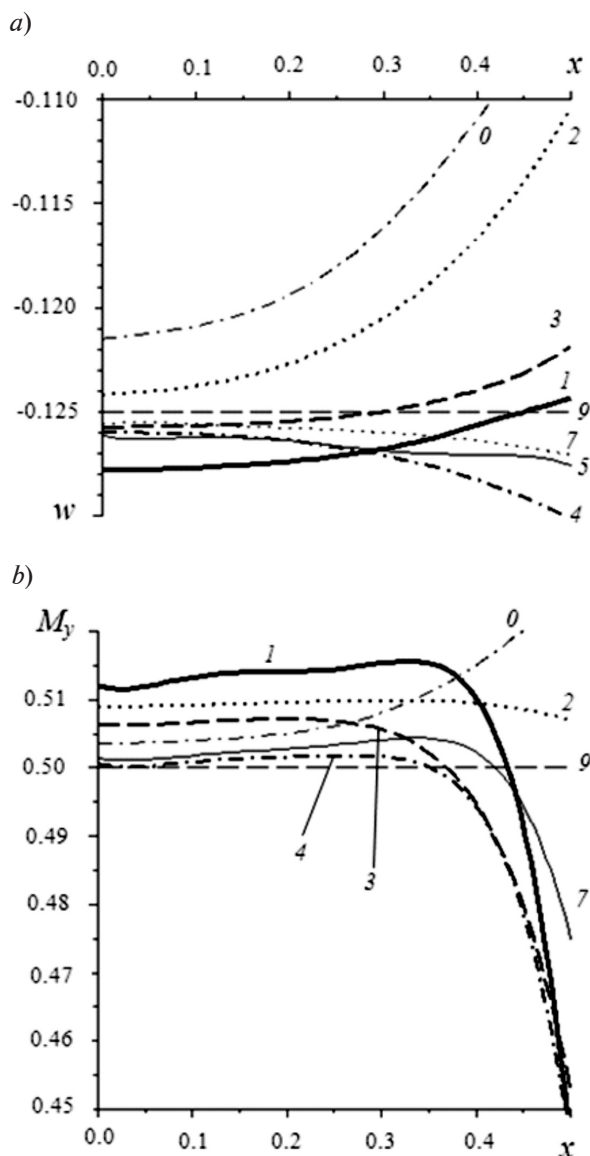


Рис. 2. Линии прогибов грани $y = 1$ (a) и эпюры изгибающих моментов M_y в корневом сечении (b) консольной пластины с $\gamma = 2$.

Номера кривых 2 – 5, 7 соответствуют значению n (см. табл. 2), прямые 9 – цилиндрическому изгибу; кривые 0 и 1 относятся к решениям [10] и [3] соответственно

тельными. Например, численные результаты для пластин с отношением сторон 0,5 и 1,0 еще хуже согласуются с известными и более достоверными данными [3, 16, 17], полученными другими методами. По всей вероятности, лучших результатов можно достичь, если проводить все вычисления с увеличенной мантиссой (например, в системе Maple).

В работе [18] отмечается вычислительная неустойчивость алгоритма начальных функций (аналог метода однородных решений) для плоских задач теории упругости в прямоугольной области при использовании тригонометрических рядов для высоких гармоник. Автор статьи [18] связывает это как с накоплением ошибок при расчете числовых коэффициентов в рядах, так и с характером сходимости самих рядов, приводящим к большой потере верных цифр в получаемой сумме этих рядов. Указанные суммы используются, в свою очередь, в качестве коэффициентов разрешающей системы, которая становится плохо обусловленной с увеличением номера гармоники. Решение проблемы автор работы [18] видит в наращивании мантиссы при вычислениях в системе аналитических вычислений Maple и проводит соответствующие вычислительные эксперименты. Однако в указанной работе не объясняется, почему другие приближенные методы не обладают этим недостатком.

Заключение

В статье проанализирован метод, предложенный П.Ф. Папковичем, и его приложение для консольной прямоугольной пластины при изгибе равномерной нагрузкой. При рассмотрении задачи установлено, что процесс последовательных приближений при увеличении числа однородных решений является сходящимся. Характер графиков прогибов свободного края напротив заделки и изгибающих моментов в заделке дает правильную качественную картину напряженно-деформированного состояния пластины, однако численные результаты оказываются заниженными по сравнению с таковыми, полученными методом суперпозиции исправляющих функций. Решение комплексной системы вызывает как значительные трудности, так и препятствия, относящиеся к неустойчивости вычислительного процесса.

В дальнейшем предполагается провести по разработанному алгоритму численные эксперименты в аналитической системе программирования Maple, которая позволяет производить вычисления с мантиссой произвольной длины. Путем увеличения мантиссы и контроля выполнения граничных условий на боковых кромках планируется исследовать причины неустойчивости метода и найти как оптимальный размер мантиссы, так и оптимальное число однородных решений, которые бы обеспечивали приемлемую точность решения задачи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Holl D.L. Cantilever plate with concentrated edge load // Journal of Applied Mechanics. 1937. Vol. 4. No. 1. Pp. 8–10.
- [2] Zienkiewicz O.C., Cheung Y.K. The finite element method for analysis of elastic isotropic and ortotropic slabs // Proceedings of the Institution of Civil Engineers. 1964. Vol. 28. Aug., Pp. 471–488.
- [3] Сухотерин М.В. Прямоугольная консольная пластина под действием поперечной нагрузки // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика, телекоммуникации, управление. 2009. № 4 (82). С. 101–106.
- [4] Папкович П.Ф. Строительная механика корабля. Ч. 2. Л.: Судпромгиз, 1941. 960 с.
- [5] Schiff P.A. Sur l'équilibre d'une cylinder élastique // Journal de Mathématiques Pures et Appliquées. 1883. Vol. 9. Ser. 3. Pp. 407–421.
- [6] Папкович П.Ф. Об одной форме решения плоской задачи теории упругости для прямоугольной полосы // Доклады АН СССР. 1940. Т. 27. № 4 С. 335–339.
- [7] Прокопов В.К. О соотношении обобщенной ортогональности Папковича для прямоугольной пластинки // Прикладная математика и механика. 1964. Т. 28. № 2. С. 351–355.
- [8] Тимошенко С.П., Войновский-Кригер С. Пластинки и оболочки. М.: Физматгиз, 1963. 635 с.
- [9] Груздев Ю.А., Прокопов В.К. Применение однородных решений к задаче изгиба консольной плиты // Труды Ленинградского политех-



нического института. 1966. № 266. С. 54–63.

[10] **Агарев В.А.** Метод начальных функций для двумерных краевых задач теории упругости. Киев: Изд-во АН УССР, 1963. 203 с.

[11] **Китовер К.А.** Об использовании специальных систем бигармонических функций для решения некоторых задач теории упругости // Прикладная математика и механика. 1952. Т. 16. № 6. С. 739–748.

[12] **Устинов Ю.А., Юдович В.И.** О полноте системы элементарных решений бигармонического уравнения в полуполосе // Прикладная математика и механика. 1973. Т. 37. № 4. С. 707–714.

[13] **Устинов Ю.А.** О полноте системы однородных решений теории плит // Прикладная математика и механика. 1976. Т. 40. № 3. С. 236–243.

[14] **Канторович Л.В., Крылов В.И.** Приближенные методы высшего анализа. Л.-М.: ГИТТЛ, 1949. 695 с.

[15] **Журавская О.А., Дьяченко Д.Я.** К расчету консольных пластин // Труды Магнитогорского горно-металлургического института. 1971. № 77. С. 74–80.

[16] **Даль Ю.М.** Об изгибе упругой консольной пластины переменной толщины // Расчет пространственных конструкций. № 16. М.: Стройиздат, 1974. С. 169–178.

[17] **Bauer F., Reiss E.L.** Stresses in cantilever plates // Computers and Structures. 1972. Vol. 2. No. 4. Pp. 675–691.

[18] **Матросов А.В.** Вычислительная неустойчивость алгоритма метода начальных функций // Вестник Санкт-Петербургского университета. 2010. Сер. 10. № 4. С. 30–39.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СУХОТЕРИН Михаил Васильевич — доктор технических наук, заведующий кафедрой математики Государственного университета морского и речного флота имени адмирала С.О. Макарова.

198035, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7
mv@sukhoterin.com

БАРЫШНИКОВ Сергей Олегович — доктор технических наук, ректор Государственного университета морского и речного флота имени адмирала С.О. Макарова.

198035, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7
rector@gumrf.ru

ЛОМТЕВА Ксения Олеговна — аспирантка кафедры прикладной математики Государственного университета морского и речного флота имени адмирала С.О. Макарова.

198035, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7
lomteva_ksu@mail.ru

Sukhoterin M.V., Baryshnikov S.O., Lomteva K.O. ON HOMOGENEOUS SOLUTIONS OF THE PROBLEM OF A RECTANGULAR CANTILEVER PLATE BENDING.

The paper considers the method, suggested by P.F. Papkovich for rectangular plates and its application for a cantilever plate with a bending under a uniform load. The required function of bendings is chosen in the form of a sum of the corresponding beam function and a biharmonic function, which is a series in terms of unorthogonal eigenfunctions of the problem. The eigenfunctions satisfy the homogeneous boundary conditions on the longitudinal edges (the clamped and the opposite ones). It is suggested to find series coefficients from the condition of the minimum discrepancies work on the corresponding displacements of the transverse edges. It leads to an infinite system of linear algebraic equations for the required coefficients in the complex form. The coefficients of homogeneous solutions were found for the cases in which the approximating series contained sequentially 2, 3, ..., 7 terms. The eigenvalues, the bendings of the edge opposite to the clamped edge, and the bending moments in the clamped section were calculated. Convergence of the reduction method and stability of the computational process were analyzed.

RECTANGULAR CANTILEVER PLATE, BENDING, HOMOGENEOUS SOLUTION, NUMERICAL RESULT, INSTABILITY OF CALCULATIONS.

REFERENCES

- [1] **D.L. Holl**, Cantilever plate with concentrated edge load, *Journal of Applied Mechanics*. 4(1) (1937) 8–10.
- [2] **O.C. Zienkiewicz, Y.K. Cheung**, The finite element method for analysis of elastic isotropic and ortotropic slabs, *Proceedings of the Institution of Civil Engineers*. 28 (8) (1964) 471–488.
- [3] **M.V. Sukhoterlin**, Rectangular cantilever plate under transverse load, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Computer Science. Telecommunications and Control Systems*. 4 (82) (2009) 101–106.
- [4] **P.F. Papkovich**, *Stroitel'naya mekhanika korablya*, Ch. 2. [Structural mechanics of a ship], Part 2, Leningrad, Sudpromgiz, 1941.
- [5] **P.A. Schiff**, Sur l'équilibre d'une cylinder élastique. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*. 9(3) (1883) 407–421.
- [6] **P.F. Papkovich**, Ob odnoy forme resheniya ploskoy zadachi teorii uprugosti dlya pryamougolnoy polosy [About one form of solution of plane problem of elasticity theory for a rectangular strip], *Doklady AN SSSR*. 27(4) (1940) 335–339.
- [7] **V.K. Prokopov**, Osootnosheniibobshchennoy ortogonalnosti Papkovicha dlya pryamougolnoy plastinki [On the ratio of generalized orthogonality of Papkovich for the rectangular plate], *Prikladnaya matematika i mekhanika*. 28(2) (1964) 351–355.
- [8] **S.P. Timoshenko, S. Voynovskiy-Kruger**, *Plastinki i obolochki* [Plates and shells], Moscow, Fizmatgiz, 1963.
- [9] **Yu.A. Gruzdev, V.K. Prokopov**, Primeneniye odnorodnykh resheniy k zadache izgiba konsolnoy plity [An application of homogeneous solutions to the problem of bending of a cantilever plate] *Trudy Leningradskogo politekhnicheskogo instituta*. No. 266 (1966) 54–63.
- [10] **V.A. Agarev**, Metod nachalnykh funktsiy dlya dvumernykh krayevykh zadach teorii uprugosti [Method of initial functions for two-dimensional boundary value problems of elasticity theory], Kiev, izd-vo Akad. Nauk USSR, 1963.
- [11] **K.A. Kitover**, Ob ispolzovanii spetsialnykh sistem bigarmonicheskikh funktsiy dlya resheniya nekotorykh zadach teorii uprugosti. [On the use of special systems of biharmonic functions for the solution of some problems of elasticity theory], *Prikladnaya matematika i mekhanika*. 16(6) (1952) 739–748.
- [12] **Yu.A. Ustinov, V.I. Yudovich**, O polnote sistemy elementarnykh resheniy bigarmonicheskogo uravneniya v polupolose. [On completeness of the system of elementary solutions of biharmonic equation in a strip], *Prikladnaya matematika i mekhanika*. 37(4) (1973) 707–714.
- [13] **Yu.A. Ustinov**, O polnote sistemy odnorodnykh resheniy teorii plit. [On the completeness of the system of homogeneous solutions of the theory of plates], *Prikladnaya matematika i mekhanika*. 40(3) (1976) 236–243.
- [14] **L.V. Kantorovich, V.I. Krylov**, *Priblizhennyye metody vysshego analiza* [Approximate methods of higher analysis], Leningrad, Moscow, GITTL, 1949.
- [15] **O.A. Zhuravskaya, D.Ya. Dyachenko**, K raschetu konsolnykh plastin. [To the calculation of cantilever plates]. *Trudy Magnitogorskogo gornometallurgicheskogo instituta*. No. 77 (1971) 74–80.
- [16] **Yu.M. Dal**, Ob izgibe uprugoy konsolnoy plastiny peremennoy tolshchiny [About the bending of an elastic cantilever plate of variable thickness], *Raschet prostranstv. Konstruktsiy*, No. 16, Moscow, Stroyizdat. (1974) 169–178.
- [17] **F. Bauer, E.L. Reiss**, Stresses in cantilever plates, *Computes and Structures*. 2(4) (1972) 675–691.
- [18] **A.V. Matrosov**, Vychislitelnaya neustoychivost algoritma metoda nachalnykh funktsiy [Computational instability of the algorithm of the method of initial functions], *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universiteta*. 10(4) (2010) 30–39.

THE AUTHORS

SUKHOTERIN Mikhail V.

Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping
5/7 Dvinskaya St., Saint-Petersburg, 198035, Russian Federation
mv@sukhoterlin.com

BARYSHNIKOV Sergey O.

Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping
5/7 Dvinskaya St., Saint-Petersburg, 198035, Russian Federation
rector@gumrf.ru

LOMTEVA Kseniya O.

Admiral Makarov State University of Maritime and Inland Shipping
5/7 Dvinskaya St., Saint-Petersburg, 198035, Russian Federation
lomteva_ksu@mail.ru

DOI: 10.5862/JPM.248.13

УДК: 53.09

А.Н. Вейс, О.А. Ящуржинская

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ПРОФЕССОР МИХАИЛ МИХАЙЛОВИЧ БРЕДОВ
(к столетию со дня рождения)

Статья-персоналия посвящена памяти Михаила Михайловича Бредова (1916 – 1976), выдающегося ученого-физика, ближайшего сотрудника А.Ф. Иоффе и Б.П. Константинова, работавшего в Ленинградском физико-техническом институте АН СССР (ЛФТИ) с 1938 по 1976 гг. (с перерывами), в Институте полупроводников АН СССР (1954–1961), преподавателя Ленинградского политехнического института (1952 – 1973). В биографии ученого сделан акцент на его научной деятельности. Приведены сведения об участии М.М. Бредова в Великой Отечественной войне.

МИХАИЛ МИХАЙЛОВИЧ БРЕДОВ, ФТИ имени Иоффе, ленинградский политехнический институт, ИПАН.

**1916 – 1976**

Имя Михаила Михайловича Бредова бесконечно дорого многим бывшим студентам-политехникам, которые с неизменным восторгом вспоминают его блестящие содержательные лекции по электродинамике, статистической физике, квантовой механике, специальной теории относительности, астрофизике; его редкую манеру общения с людьми, деликатное и по-отечески доброе отношение к студентам на экзаменах. К числу этих бывших студентов относятся и авторы настоящей статьи.

Студенты, конечно, понимали, что М.М. Бредов – незаурядная личность. Но они не могли знать, что лекции им читал выдающийся ученый, оставивший глубокий след во многих областях современной физики. Это был яркий представитель российской интеллигенции, корни которой уходили в далекое прошлое.

Михаил Михайлович Бредов родился 10 (23) сентября 1916 года в Смеле Черкасского уезда Киевской губернии. Его отец Михаил Константинович Дитерихс был потомком старинного германского

рыцарского рода. Он геройски проявил себя в 1-й мировой войне, был генерал-квартирмейстером Ставки Верховного Командования в Могилеве.

Не приняв власти большевиков в 1917 году, он примкнул к белому движению, став начальником штаба Чешско-Словацкого корпуса, а затем командиром Сибирской Армии и начальником штаба у адмирала А.В. Колчака. Его супруга Софья Эмильевна, мать М.М. Бредова, не расставалась с мужем. Осенью 1922 года супруги эмигрировали в Китай. В Россию они больше никогда не возвращались, и все связи с ними были утрачены.

Своего маленького сына чета Дитерихсов оставила в Киеве еще в 1917 году на попечение родственников. Впоследствии родственники перевезли его в Ленинград. Благодаря стараниям его тети Марии Эмильевны, блестяще образованной женщины, выпускницы Смольного института, которая заменила мальчику мать, был заложен прочный фундамент Мишиных знаний, позволивший впоследствии Михаилу Михайловичу стать разносторонне образованным человеком, истинным интеллигентом, свободно владеющим тремя европейскими языками (французским, немецким и английским), знатоком и ценителем литературы, музыки и живописи.

Окончив с отличием в 1934 году среднюю школу и будучи победителем многочисленных олимпиад, Михаил поступил на инженерно-физический факультет Ленинградского индустриального института (ЛИИ); в 1940 году вуз переименовали в Ленинградский политехнический институт (ЛПИ им. М.И. Калинина). Деканом инженерно-физического факультета был А.Ф. Иоффе, бессменный директор Ленинградского физико-технического института (ЛФТИ). Факультет славился высоким уровнем общей физико-математической подготовки и тесной связью науки с инженерной практикой. Несмотря на стесненное материальное положение, Михаил Бредов был отличником учебы, занимаясь при этом и обязательной тогда общественной работой.

К научным исследованиям на факультете Михаил Михайлович приступил

в 1937 году, будучи студентом четвертого курса. Его успехи в научных исследованиях были замечены, и его пригласил работать в ЛФТИ сам Абрам Федорович Иоффе. Михаила Михайловича приняли в лабораторию профессора Льва Андреевича Арцимовича, занимавшегося актуальными проблемами ядерной физики.

Первым и вполне успешным шагом М.М. Бредова в большую науку можно считать опубликование в 1939 году статьи Л.А. Арцимовича и М.М. Бредова «Радиационное торможение быстрых электронов в тонких слоях вещества» в журнале «Доклады Академии наук» (по представлению А.Ф. Иоффе). Приведенные в статье результаты ликвидировали все сомнения в справедливости основных положений квантовой механики и открывали пути для дальнейших экспериментов в области ядерной физики.

После успешного окончания ЛИИ перед молодым ученым раскрылись двери ЛФТИ, он стал аспирантом (октябрь 1939 года) у Л.А. Арцимовича по специальности «Физика атомного ядра».

Но новая интересная и серьезная научная работа М.М. Бредова-аспиранта так и осталась незавершенной, в 1941 году ее прервала война. 16 июля было принято решение правительства об эвакуации Академии наук в Казань. В должности младшего научного сотрудника М.М. Бредов вошел в группу № 10, которая в то время занималась размагничиванием кораблей Военно-Морского Флота СССР (ВМФ СССР). Эту группу возглавлял А.П. Александров (будущий президент АН СССР), который решал назревшие проблемы совместно с И.В. Курчатовым (будущий академик АН СССР). В апреле 1942 года М.М. Бредов был откомандирован в распоряжение Наркомата ВМФ и призван на действительную военную службу (1942–1945), где руководил службой по размагничиванию судов военных речных флотилий ВМФ сначала на Амуре, затем на Волге. В ноябре 1943 года М.М. Бредов был переведен в Краснознаменную Днепровскую военную флотилию. В составе этой флотилии Михаил Михайлович дошел до самого Берлина.



Его наградили медалями «За боевые заслуги» (1943), «За взятие Берлина» (1945) и «За победу над Германией» (1945).

После демобилизации Михаила Михайловича снова приняли в ЛФТИ (24 сентября 1945 года) на должность младшего научного сотрудника в лабораторию профессора Л.А. Арцимовича. Систематизация проведенных им исследований в области электронной оптики и математической физики завершилась написанием кандидатской диссертации «Формирование ленточных ионных пучков» и ее успешной защитой (7 мая 1947 года).

Присвоение ученой степени было утверждено 26 января 1949 года, и 2 февраля 1949 года М.М. Бредов стал старшим научным сотрудником.

В это время он фактически завершил работу по усовершенствованию масс-спектрометра. Результаты выполненных им теоретических и экспериментальных исследований получили практическое применение благодаря профессору Л.А. Арцимовичу, который превратил скромный лабораторный прибор в мощную промышленную установку, оказавшуюся особенно полезной при разделении изотопов лития. Именно благодаря этому шагу, Советскому Союзу удалось опередить США в создании «сухой» термоядерной бомбы!

Однако всего через четыре года работы в должности старшего научного сотрудника М.М. Бредова внезапно отстраняют от работы и увольняют из ЛФТИ за его дворянское происхождение и участие отца в белом движении.

После смерти И.В. Сталина А.Ф. Иоффе зачисляет М.М. Бредова на должность старшего научного сотрудника ЛФТИ в лабораторию полупроводников, преобразованную 5 ноября 1954 года в Институт полупроводников АН СССР (ИПАН). В 1959 году Михаил Михайлович стал там заведующим лабораторией облучения.

На новом месте Михаил Михайлович был вынужден в очередной раз радикально изменить область своих научных исследований, хотя он уже сформировался как крупный специалист в области электронной оптики и математической физики.

В ИПАНе М.М. Бредов стал организатором научной работы, направленной на выяснение способов создания в полупроводниках планарных $p-n$ -переходов, помимо хорошо известного к тому времени диффузионного метода. И здесь обнаружился талант М.М. Бредова как незаурядного экспериментатора, способного правильно поставить сложный физический эксперимент и истолковать полученные при его выполнении результаты (до этого ученого считали квалифицированным теоретиком).

В процессе проводимых исследований М.М. Бредов получил блестящий научный и практически важный результат (работа закончена в 1961 году): при облучении кремния ионами лития впервые был получен планарный $p-n$ -переход. Недаром 1961 год считается годом рождения в СССР ионной имплантации. Однако истинное осознание значимости результата, полученного М.М. Бредовым, пришло к его коллегам значительно позднее, после того, как В.М. и М.И. Гусевы, а также К.Д. Демаков стали лауреатами Государственной премии СССР в области техники за работу по созданию оборудования и технологии ионной имплантации (1978). М.М. Бредова в это время уже не было в живых.

В конце 1950-х годов параллельно с изучением особенностей свойств полупроводников, облученных различными ионами, М.М. Бредов начал большой цикл исследований возбужденных состояний в твердых телах.

Среди работ этого цикла следует выделить наиболее важную: М.М. Бредов с сотрудниками провел детальное изучение спектра характеристических потерь энергии электронов в алюминии и сформулировал условия, при которых в этих спектрах можно выявить проявление плазменных волн. При этом Михаил Михайлович пришел к очень важному выводу о возможности применения нейтронной спектроскопии для изучения динамики и структуры вещества на атомном уровне.

В конце 1961 года Михаил Михайлович, по приглашению академика Б.П. Константинова, перешел в Физико-технический институт для постановки астрофизических

исследований. Здесь он стал заместителем Б.П. Константинова как заведующего астрофизическим отделом, а также заведующим лабораторией космических исследований. Михаил Михайлович проделал большую работу по организации отдела, подбору кадров и определению программы работ. Первоочередной задачей отдела стал поиск антиматерии в микрометеорах, что составляло реализацию идей Б.П. Константинова об обнаружении и использовании антивещества для создания источников энергии и самого мощного оружия. Под руководством М.М. Бредова и Б.П. Константинова были получены новые интересные астро- и геофизические результаты по природе микрометеоров в окрестности Земли, а вне ее магнитосферы — зарядового состава космических лучей, а также физики комет. При этом использовались данные, полученные с искусственных спутников Земли и советских космических станций «Зонд-4» и «Зонд-5».

Важным достижением астрофизического отдела тех лет было опровержение гипотезы о существовании пылевого пояса вокруг Земли, которая возникла в начале 1960-х годов и своим появлением была обязана некорректной интерпретации экспериментальных данных, полученных с первых космических аппаратов.

В конце 1960-х годов произошли стремительные изменения в служебном положении Михаила Михайловича: в 1968 году он был утвержден в ученой степени доктора физико-математических наук, в 1970 — в ученом звании профессора, а в 1969 году, после безвременной кончины Бориса Павловича Константинова, стал его преемником на посту руководителя астрофизического отдела. Учитывая неоценимый вклад М.М. Бредова в физическую науку, в 1970 году руководство ФТИ им. А.Ф. Иоффе выдвинуло его в число кандидатов в член-корреспонденты АН СССР. К сожалению, это избрание не состоялось из-за резкого ухудшения здоровья ученого.

После перехода на работу из ИПАНа в ФТИ научная работа Михаила Михайловича не исчерпывалась астрофизическими исследованиями. Несмотря на огромную

занятость научной работой и преподаванием в ЛПИ (см. далее), он продолжал руководить изучением плазменных эффектов в различных элементах и соединениях в бывшей своей лаборатории ИПАНа. Последние работы, выполненные по этой тематике под его руководством, были опубликованы уже после кончины Михаила Михайловича.

Еще в 1952 году М.М. Бредов начал свою преподавательскую деятельность на кафедре теоретической физики физико-механического факультета ЛПИ в должности доцента-совместителя и читал лекции для студентов-физиков. Михаил Михайлович был великолепным педагогом, которым восхищались студенты. Его блестящее ораторское мастерство было характерно многочисленными образными примерами, неожиданными аналогиями, которые делали материалы лекций доступными, увлекательными. М.М. Бредова отлича-



М.М. Бредов (I ряд) со студентами. Фрагмент группового фотоснимка, сделанного в мае 1970 года после церемонии последнего звонка, проведенной студентами факультета радиоэлектроники (выпуск 1971 года)



ли доброжелательность, безукоризненная корректность со всеми, чуткость к нуждам окружающих и постоянная готовность прийти на помощь. В различных ситуациях он мог без какой-либо подготовки решить любую физико-математическую задачу, возникшую у студентов. В связи с этим он снискал подлинный авторитет и любовь в студенческой среде. Плохо подготовившиеся к экзаменам студенты, как правило, долго не могли избавиться от чувства стыда перед Михаилом Михайловичем за свое незнание предмета на экзамене.

На церемониях последнего звонка М.М. Бредов выступал с теплыми напутствиями студентам выпуска и фотографировался с ними на память (см. фрагмент фотографии).

Перу М.М. Бредова (и его соавторов) принадлежат учебник и задачник по электродинамике, выдержавшие уже несколько изданий. Ими до сих пор пользуются студенты, не знающие ничего о судьбе автора.

К блестящей педагогической деятельности М.М. Бредова тесно примыкала и научно-просветительская, на которую он тоже находил время. Являясь членом Методического совета Ленинградского отделения общества «Знание», он неоднократно выступал по Всесоюзному телевидению и

писал научно-популярные статьи по последним достижениям современной ему физики для центральных газет. Особым успехом пользовались его публичные лекции, которые он проводил не только в различных учреждениях Ленинграда, но и в других городах Советского Союза.

Жизнь Михаила Михайловича оказалась недолгой. Он скончался 29 сентября 1976 года, всего лишь на неделю пережив свой шестидесятилетний юбилей. Не стало выдающегося ученого и замечательного человека, навсегда оставившего память в сердцах его родственников, друзей, коллег и студентов.

Его фундаментальные исследования в различных областях физической науки принесли ему широкую известность в СССР и за рубежом. Некоторые из его работ не утратили и ныне своей актуальности и широко применяются в электронике и других областях техники.

Авторы надеются, что в год столетия М.М. Бредова настоящая статья станет своеобразным «нерукотворным памятником» этому замечательному ученому и человеку.

Выражаем искреннюю благодарность директору Музея ФТИ им. А.Ф. Иоффе Р.Ф. Витман, а также дочери М.М. Бредова Марии Михайловне за предоставление важных сведений для написания статьи.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВЕЙС Александр Николаевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alnveis@mail.ru

ЯЩУРЖИНСКАЯ Ольга Александровна — кандидат физико-математических наук, научный редактор журнала «Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
yashchurg@mail.ru

Veis A.N., Yashchurzhinskaya O.A. PROFESSOR MIKHAIL MIKHAILOVICH BREDOV
(dedicated to the 100th anniversary since his birth).

This personalia is devoted to the memory of Mikhail Mikhailovich Bredov (1916 – 1976), who was a prominent scientist in physics working closely with A.F. Ioffe and B.P. Konstantinov. He worked at Leningrad Physical Technical Institute of the USSR SA (LPhTI) from 1938 to 1976 (off and on), at Semiconductor Research Institute of USSR SA (1954–1961). He also was a lecturer at the Leningrad Polytechnical Institute

(1952 – 1973). In the scientist's biography, his research work is accentuated. Bredov's participation in the WW2 is also described. The pedagogical and educational activities of M.M. Bredov are presented.

MIKHAIL MIKHAILOVICH BREDOV, IOFFE PHYSICAL TECHNICAL INSTITUTE, LENINGRAD POLYTECHNICAL INSTITUTE.

THE AUTHORS

VEIS Aleksandr N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

alnveis@mail.ru

YASHCHURZHINSKAYA Olga A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

yashchurg@mail.ru



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Алексеева О.А.	23	Крупина М.А.	52
Андреева Н.В.	68	Крымская К.И.	68
Андроникова Д.А.	9	Ломтева К.О.	111
Бааке Э.	39	Мамин Р.Ф.	15
Барышников С.О.	111	Мелькер А.И.	52, 59
Борисова М.Э.	33	Мольков С.И.	78
Бронвальд Ю.А.	9	Мусаева Д.А.	39
Бурковский Р.Г.	9	Набережнов А.А.	15, 23
Ванина П.Ю.	15	Нижанковский В.И.	15
Вахрушев С.Б.	9, 23	Рябов В.А.	88, 102
Вейс А.Н.	123	Савин В.Н.	78
Воробьева Т.В.	59	Сухотерин М.В.	111
Гежа В.	39	Товар М.	23
Долгаков И.А.	23	Филимонов А.В.	9, 68
Ильин В.К.	39	Ящуржинская О.А.	123
Камалов А.М.	33		

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
№ 3 (248) 2016**

Учредитель — Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Иванов* — председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А.Э. Фотиади* — зам. председателя ред. коллегии
канд. физ.-мат. наук, доцент *В.М. Капралова* — ответственный секретарь
канд. физ.-мат. наук *О.А. Ящуржинская* — научный редактор, корректор
А.С. Колгатина — переводчик
Н.А. Бушманова — технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.Н. Смирнова*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 27.09.2016. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 16,3. Уч.-изд. л. 16,3. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Издательство Политехнического университета
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 г. выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» (ISSN 1994-2354). Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», издается под двойными международными стандартными сериальными номерами **ISSN 1994-2354, (сериальный) ISSN 2304-9782**. С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международную систему по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (<http://journals.spbstu.ru>). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться ДОСРОЧНО.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:

(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Наталья Александровна

или по e-mail: physics@spbstu.ru