

СОДЕРЖАНИЕ

Информатика, вычислительная техника и управление

Разработка архитектуры встраиваемой СУБД малых космических аппаратов Ю.В. Конкин, А.Н. Колесенков	7
Повышение эффективности процессов оперативного управления и технологической координации на основе интеллектуального подхода А.Н. Козлова, М.А. Цуканов, О.А. Божкова	14
Разработка алгоритма для решения задачи маршрутизации транспорта в городских условиях С.А. Коваленко, В.Ф. Барабанов, Н.И. Гребенникова	22

Энергетика

Анализ функционирования компрессорной станции по критерию энергоэффективности Л.В. Булыгина, В.И. Ряжских	27
Анализ влияния изменения уставок по напряжению на электростанциях на значения сальдо-перетока активной мощности в сечении В.В. Петров, А.А. Альмендеев, В.И. Полищук	35
Анализ состояния эргодического элемента в системах управления потенциально-опасными производствами Ю.В. Клепач, С.А. Ткалич, В.Л. Бурковский	45

Радиотехника и связь

Влияние параметров ударных воздействий на динамические характеристики радиоэлектронных модулей третьего уровня П.В. Иевлев	53
Моделирование ударных испытаний в радиоэлектронике в соответствии с государственными стандартами В.И. Борисов, П.В. Иевлев, А.В. Муратов, Т.Л. Тураева, А.В. Турецкий	61
Алгоритм цифровой когерентной демодуляции двоичных сигналов с ОФМ и его помехоустойчивость А.Н. Глушков, Е.С. Герасименко	70
Исследование рангового алгоритма обнаружения сигнала с ППРЧ П.Е. Бизюков, В.П. Литвиненко, Ю.В. Литвиненко	75
Модель состояний внешней среды при оценке оптической заметности наземных объектов в инфракрасном диапазоне длин волн В.Г. Керков, В.Д. Мочалин, Г.Л. Тюрин	80

Машиностроение и машиноведение

Экспериментальное исследование наложения вибрации на процесс электрохимической размерной обработки А.И. Болдырев, А.А. Болдырев, В.В. Григораш	86
Дозирование энергии удара для получения из стружки брикетов заранее назначенной плотности И.А. Чечета, А.Е. Чечета	90
Диффузионная сварка титана с использованием давления на начальном этапе В.В. Пешков, А.Б. Булков, И.Б. Корчагин, С.М. Ларсов	95

Физика

Влияние термообработки на электрические свойства двухслойных тонкопленочных структур $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$	
И.С. Ильяшев, Ю.Е. Калинин, В.А. Макагонов, С.Ю. Панков, А.В. Ситников.....	100
Моделирование процессов сорбции-десорбции метана силикалитом	
Д.С. Куцова, Е.В. Богатиков, А.Н. Шебанов, Д.Г. Куликов, Е.Н. Бормонтов.....	108
Моделирование процессов формирования термоэлектрокинетической ЭДС в условиях нестационарного тепломассопереноса в конденсированных средах	
А.В. Сидоров, В.М. Грабов, А.А. Зайцев, Д.В. Кузнецов, Д.А. Нарциссов.....	113
Теоретическое исследование собственной спиновой поляризации и размерного магнетизма в ультракоротких углеродных нанотрубках (0,9)	
Г.И. Глушков, А.В. Тучин, Е.Н. Бормонтов.....	122
Диэлектрические свойства нанокомпозитов $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4 - \text{SiO}_2$	
Т.Н. Короткова, Л.С. Стекленева, Е. Рысякиевич - Пасек, Л.Н. Коротков.....	127
Современные накопители водорода на основе гибридных функциональных материалов	
А.В. Звягинцева, А.О. Артемьева.....	133
Барические свойства 2D слоистых структур с разным типом межслойного взаимодействия	
А.В. Тучин, Ю.В. Каспер, Т.В. Куликова, Л.А. Битюцкая, Е.Н. Бормонтов.....	139
Линейный диэлектрический отклик в наноструктурированном титанате бария	
О.И. Сысоев, Т.Н. Короткова, В.В. Запорожский, Д.А. Лисицкий, Л.И. Янченко, Н.А. Емельянов, Л.Н. Коротков.....	144

CONTENTS

Informatics, computer engineering and control

Embedded data base management system architecture development of small spacecrafts Yu.V. Konkin, A.N. Kolesenkov	7
Efficiency improving of operational control and technological coordination processes based on intellectual approach A.N. Kozlova, M.A. Tsukanov, O.A. Bozhkova.....	14
Development of an algorithm for finding an optimal route in urban environment S.A. Kovalenko, V.F. Barabanov, N.I. Grebennikova.....	22

Energetics

Analysis of the functioning of the compressor station on the criterion of energy efficiency L.V. Bulygina, V.I. Ryazhskikh.....	27
Analysing the voltage levels influence on the power station affecting maximum allowable balance of the flow of active power In the cross-section V.V. Petrov, A.A. Al'mendejev, V.I. Polishchuk.....	35
The analysis of the current status of the ergodic element in control systems of the potentially-dangerous productions Yu.V. Klepach, S.A. Tklich, V.L. Burkovskiy.....	45

Radio engineering and communication

Influence of applied shock parameters on the dynamic characteristics of the third level electronic modules P.V. Ievlev.....	53
Simulation of impact tests in electronics in accordance with state standards V.I. Borisov, P.V. Ievlev, A.V. Muratov, T.L.Turaeva, A.V. Turetskiy.....	61
Algorithm of digital coherent demodulation of binary signals with differential phase keying and its interference immunity A.N. Glushkov, E.S. Gerasimenko.....	70
Investigation of the rank-algorithm of fhss detection P.E. Bizyukov, V.P. Litvinenko, Yu.V. Litvinenko.....	75
Model of external environment states in assessing the optical visibility of ground objects in the infrared wavelengths range V.G. Kerkov, V.D. Mochalin, G.L. Tyurin.....	80

Mechanical engineering and science of machines

Experimental investigation of vibration application on the electrochemical dimensional processing A.I. Boldyrev, A.A. Boldyrev, V.V. Grigorash.....	86
Dosing the impact energy for obtaining briquets of predetermined density from cutting chip I.A. Checheta, A.E. Checheta.....	90
Diffusion welding of titan using pressure in the initial stage V.V. Peshkov, A.B. Bulkov, I.B. Korchagin, S.M. Larsov.....	95

Physics

Effect of heat treatment on electrical properties two-layer thin-film structures $ZnO/Zn_xFe_{1-x}O$ I.S. Ilyashev, Yu.E. Kalinin, V.A. Makagonov, S.Yu. Pankov, A.V. Sitnikov.....	100
Simulation of methane sorption and desorption in silicalite D.S. Kutsova, E.V. Bogatikov, A.N. Shebanov, D.G. Kulikov, E.N. Bormontov.....	108

Modeling the processes of formation of thermo-electrokinetic emf in the conditions of non-stationary heat-assistance in condensed environment	
A.V. Sidorov, V.M. Grabov, A.A. Zaitsev, D.V. Kuznetsov, D.A. Nartsisov.....	113
Theoretical study of intrinsic spin polarization and size-dependent magnetism of ultra-short carbon nanotubes (0,9)	
G.I. Glushkov, A.V. Tuchin, E.N. Bormontov.....	122
Dielectric properties of Rb_2ZnCl_4 - SiO_2 nanocomposites	
T.N. Korotkova, L.S. Stekleneva, E. Rysiakiewicz-Pasek, L.N. Korotkov.....	127
Modern hydrogen storage based on hybrid functional materials	
A.V. Zvyagintseva, A.O. Artemieva.....	133
Baric properties of 2D layer structures with a different type of inter-layer interaction	
A.V. Tuchin, Yu.V. Kasper, T.V. Kulikova, L.A. Bityutskaya, E.N. Bormontov.....	139
Linear and nonlinear dielectric response in nanostructured barium titanate	
O.I. Sysoev, T.N. Korotkova, V.V. Zaporozhskiy, D.A. Lisitskiy, L.I. Yanchenko, N.A. Emelianov, L.N. Korotkov.....	144

РАЗРАБОТКА АРХИТЕКТУРЫ ВСТРАИВАЕМОЙ СУБД МАЛЫХ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ

Ю.В. Конкин, А.Н. Колесенков

Рассматривается задача проектирования систем управления базами данных (СУБД) для использования на борту малых космических аппаратов. Целью исследования является разработка структуры бортовой СУБД, описание принципов функционирования ее элементов, а также разработка универсального формата данных. Предложенная архитектура СУБД имеет низкие требования к производительности бортовой вычислительной системы и ресурсам памяти. Рассматриваются особенности работы СУБД с многоуровневой структурой памяти. Выделены компоненты физической структуры базы данных. Анализ методов доступа показывает, что условиям задачи наиболее соответствует метод бинарного выровненного дерева для доступа по первичному, уникальному или внешнему ключу. В целях сокращения объемов используемой памяти предлагается отказаться от индексирования по внешнему ключу и выполнять поиск записи при проверке ссылочной целостности последовательным просмотром таблицы. Для хранения данных в базе разработан формат, описывающий физическую структуру базы данных, который содержит необходимые для загрузки информации параметры. Доступ к данным по значению ключа основан на алгоритме обхода бинарного дерева. Эксперименты по реализации разработанной СУБД проводились на языке программирования C++ с возможностью кросс-платформенного переноса исполняемого кода

Ключевые слова: база данных, СУБД, спутник, предварительная обработка, бортовой

Введение

Благодаря современным достижениям информатики и микроэлектроники, активной коммерциализации космической деятельности создание и запуск малых космических аппаратов (МКА) становятся достаточно распространенными явлениями [1]. Снижение себестоимости изготовления позволяет формировать эффективные роевые группировки МКА, а повышение автономности МКА приводит к увеличению числа выполняемых задач. В сложившейся ситуации актуальной является задача разработки и унификации эффективных встраиваемых бортовых систем управления (БСУ) и баз данных, имеющих низкие требования к мощности вычислительной машины на борту МКА.

Использование средств предварительной обработки информации непосредственно на борту МКА является необходимым и перспективным, так как исходный поток данных, формируемых сенсорами в режиме реального времени, превышает возможности каналов передачи данных и требует значительных энергетических ресурсов [2].

Малая производительность космических вычислительных машин частично объясняется

необходимостью дополнительной защиты от радиации [3]. Ввиду ограниченного объема оперативной и дополнительной памяти, а также малой мощности вычислительной системы, размещенной на борту МКА, актуальной является задача организации хранения общего информационного потока от бортовых систем сбора данных в специализированной базе данных (БД) для дальнейшей обработки и анализа средствами бортового программного обеспечения.

Важнейшей составляющей МКА является БСУ, которая должна обеспечить функционирование МКА с момента отделения от ракеты-носителя до завершения программы полета.

Обычно при разработке МКА используют специализированное системное программное обеспечение, создаваемое для каждого конкретного космического аппарата. Рынок предлагает широкий выбор готовых к использованию базовых аппаратно-программных комплексов, стандартизованных и протестированных в области промышленной автоматизации, и в то же время удовлетворяющих высоким техническим требованиям к космической технике [4].

В последнее время ситуация в этой области меняется в сторону использования тиражируемых БСУ [5]. Возрастающие потребности в компьютеризации на борту МКА, на которых могут устанавливаться сотни

Конкин Юрий Валериевич – РГРТУ, канд. техн. наук, доцент, e-mail: konkinjv@yandex.ru
Колесенков Александр Николаевич – РГРТУ, канд. техн. наук, доцент, e-mail: sk62@mail.ru

систем, финансовые ограничения космической отрасли приводят к построению БСУ на базе открытых стандартов и апробированных промышленностью технологий.

На сегодняшний день множество передовых инженерных компаний, которые занимаются космическими системами и компьютерным оборудованием, разрабатывают БСУ на базе ядра операционной системы Linux. Преимущества БСУ на базе Linux: надежность, устойчивость к перегрузкам, возможность преобразования в операционную систему реального времени, низкая стоимость. Использование Linux позволяет также создавать бортовое программное обеспечение с применением средств программирования высокого уровня.

Для организации хранения и оперативного доступа к данным на борту МКА необходимо использовать системы управления базами данных. Стандартные базы данных, такие как SQL, достаточно требовательны к ресурсам вычислительной машины, что делает затруднительным или невозможным использование их в качестве бортовых СУБД [6].

Постановка задачи

Разработка бортовой системы управления базой данных (СУБД) для задач хранения и обработки информации на МКА вызвана следующими причинами [7]:

- низкая мощность вычислительной системы на борту МКА;
- ограничение по объему оперативной памяти и постоянных запоминающих устройств;
- при вводе и изменении структурированной информации необходимо обеспечивать целостность данных;
- для одновременного использования СУБД несколькими задачами необходимо предусмотреть многопользовательский доступ к БД;
- отсутствие бортовых вариантов СУБД с необходимыми характеристиками.

В существующих бортовых СУБД перечисленные выше возможности для обработки данных представлены не полностью или вообще отсутствуют.

Архитектура СУБД

В бортовой СУБД предлагается использовать реляционную модель данных и многоуровневую структуру памяти:

- внешняя энергонезависимая память, обеспечивающая сохранение базы данных

после выключения питания;

- оперативная память, в которую загружается база данных для выполнения запросов, добавления, изменения и удаления данных;

- память служебных данных СУБД, предназначенная для чтения и записи блоков данных, построения индексов, сохранения управляющих признаков. Данная память должна обладать максимальным быстродействием.

В физической структуре базы данных можно выделить следующие компоненты:

- таблицы данных;
- хранимые записи;
- первичные ключи (для идентификации хранимой записи в таблице);
- уникальные ключи (для исключения повторов значений выбранных атрибутов записи в таблице);
- внешние ключи (для организации ссылочной целостности).

Исходя из вышесказанного рассмотрим следующие известные методы доступа с точки зрения их использования в данной задаче:

- хеширование;
- последовательный поиск;
- бинарный поиск;
- поиск в бинарном дереве.

Анализ перечисленных выше методов доступа показывает, что условиям задачи наиболее соответствует метод бинарного выровненного дерева для доступа по первичному, уникальному или внешнему ключу. В целях сокращения объемов используемой памяти можно отказаться от индексирования по внешнему ключу и выполнять поиск записи при проверке ссылочной целостности последовательным просмотром таблицы [8].

С учетом особенностей бортовых вычислительных систем в архитектуре СУБД (рис. 1) можно выделить две подсистемы:

1) Подсистема обработки запросов, установленная непосредственно на борту и реализующая все функции, связанные с обработкой запросов приложений. Для этого специальный загрузчик копирует из энергонезависимой памяти всю БД в оперативную память для выполнения запросов и изменения данных. После этого модуль запросов готов принимать запросы бортовых приложений и с помощью функций СУБД обрабатывать их и возвращать требуемые данные.

2) Подсистема разработки СУБД, установленная на персональном компьютере и предназначенная для разработки БД, редактирования таблиц, перестройки сбойных индексов, проверки и восстановления физической структуры БД, изменения структуры БД, связанные с добавлением, изменением, удалением полей, индексов и ссылок, если в БД уже есть данные. Кроме того, данную подсистему можно использовать для сбора статистических данных о результатах полетов.

Бортовая БД может являться источником информации для нескольких подсистем бортовой вычислительной системы. Поэтому возможно одновременное обращение к информации в БД из нескольких приложений. Отсюда возникает задача обеспечения доступа нескольких приложений по чтению и записи к одним и тем же данным.

Анализ возможных структур вычислительных систем, а также задач, в которых планируется использовать БД, показывает, что разделение транзакций приложений может быть обеспечено следующими способами:

1) Каждое приложение работает со своей версией БД. При запуске приложения выделяется память для копии БД и осуществляется ее загрузка с внешнего носителя. Для этого в СУБД предусмотрен специальный модуль загрузки БД. Все изменения в копию БД может вносить только данное приложение с помощью функций ядра СУБД. Эти изменения другим приложениям недоступны. После сохранения изменений на внешнем носителе изменения в данных становятся доступными другим приложениям. Для получения приложением измененных данных необходимо повторно загрузить в память приложения новую версию БД. Измененные данные на внешнем носителе не блокируются. При очередном сохранении БД каким-либо приложением старая версия данных заменяется на новую.

2) Каждое приложение видит законченные транзакции других приложений. В этом случае активизируется модуль запросов приложений, который является частью СУБД. При этом создается только одна копия БД в памяти модуля запросов. В память других приложений БД не загружается. Для реализации данного способа в структуре модуля запросов предусмотрены процедуры для выполнения всех возможных запросов к БД. Каждый запрос

имеет уникальный номер. Полученные номера запросов заносятся в очередь, предусмотренную в модуле запросов. После выбора очередного номера осуществляется вызов соответствующей процедуры. После выполнения запроса его номер удаляется из очереди. Результаты запроса записываются в специальный массив, откуда их может получить приложение с помощью специальной функции. Последнее состояние БД доступно всем приложениям. При этом в БД изменены только те данные, которые указаны в запросе. Выгрузка БД на внешний носитель осуществляется при завершении работы.

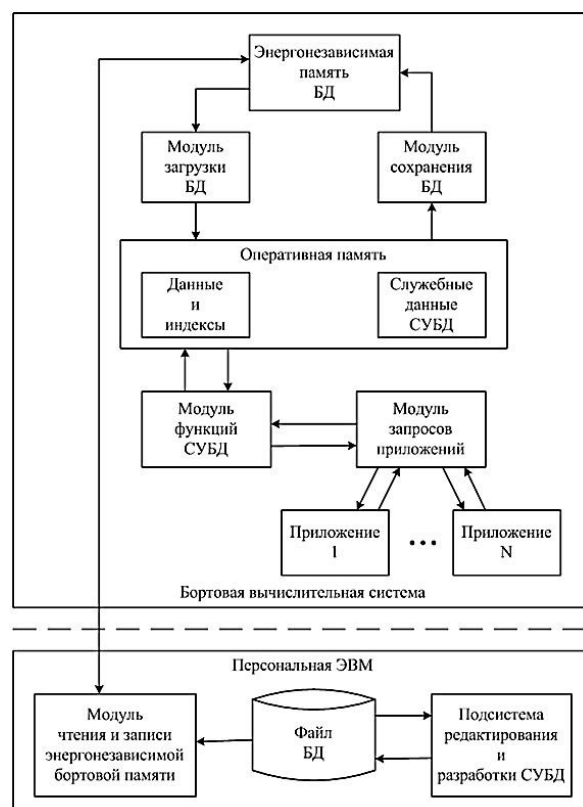


Рис. 1. Архитектура бортовой СУБД

Оба способа разделения транзакций одновременно использоваться не могут. Для работы необходимо выбрать один из них, исходя из особенностей структуры вычислительной системы и алгоритмов работы устройств. В первом случае БД является распределенной, так как каждое устройство системы управляется своим приложением и содержит свою копию БД [9].

Для того чтобы изменения, вносимые одним приложением, стали доступны другим, необходимо выполнить следующие действия:

- подтвердить выполнение транзакции

приложением;

- загрузить БД в память каждого приложения.

Преимуществом такого способа является отсутствие конкурентных блокировок данных разными приложениями. Недостатком является то, что результаты работы одного приложения могут быть перекрыты другим.

Во втором случае БД не является распределенной, так как используется только модулем запросов приложений. Запросы обрабатываются в порядке их поступления от приложений. При этом отсутствует конкурентная блокировка данных разными приложениями.

Так как БД является централизованной, то результаты работы одного приложения становятся доступными другим без специальных действий по репликации, т. е. приведение всех возможных копий данных к одинаковому виду. Кроме того, в данном случае минимизируются пересылки данных между приложениями, так как каждое приложение посылает только номер запроса, а получает только ответ на него. Ограничением быстродействия может быть скорость обмена по внутреннему интерфейсу вычислительной системы [10].

Формат данных

Для хранения БД разработан формат, описывающий физическую структуру БД (рис. 2). Формат содержит следующие параметры:

- заголовок базы данных;
- дескрипторы таблиц. В структуре данных хранится информация о местоположении полей таблицы, указатель на первый блок данных, количество и уникальность индексов таблицы, размеры ключей, а также неключевых полей. Такое описание используется для каждой таблицы, указанной в базе данных;

- дескрипторы полей. В данной структуре для каждого поля указываются наименование, первый байт в физической записи данных, размер поля в байтах, тип поля, номер ключа, в которое входит поле. Анализ предметной области показывает, что типы данных могут быть следующими: BYTE (1 байт), INTEGER (2 байта), LONG (4 байта), FLOAT (4 байта), DOUBLE (8 байт), DATE (4 байта), TIME (4 байта), STRING (1.255 байт);

- дескрипторы ссылок, предназначенных для организации ссылочной целостности при добавлении, изменении, удалении записи. Для организации ссылки необходимо выделить

внешний ключ;

- список блоков данных для таблиц, указанных в дескрипторах. Заполненность блоков данных может быть различной. Каждый блок начинается с заголовка. В заголовке блока указывается адрес следующего блока данной таблицы, если он есть, или пустой указатель, если блок последний. Кроме того, в заголовке блока указывается количество записей текущего блока для упрощения алгоритмов чтения и поиска данных. Указатель в данной системе состоит из двух частей: 4 байта адреса блока и 4 байта смещения блока. Пустой указатель заполняется нулями. Каждый блок данных представлен двусвязным списком записей данных, который хранит информацию об индексировании записей с помощью двоичного дерева.

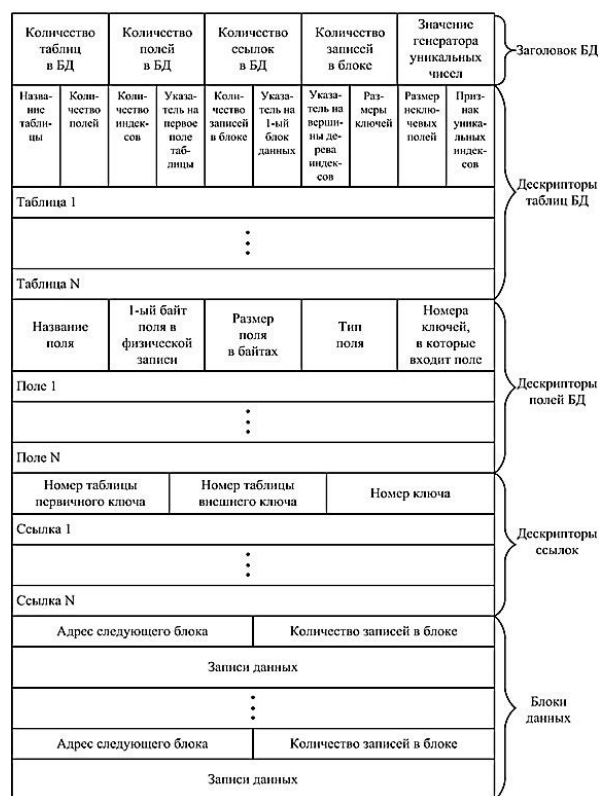


Рис. 2. Формат физической структуры базы данных

Запись данных содержит информацию о значениях всех полей записи в двоичном коде, соответствующем типу данных поля. Для получения значений записей в порядке следования по ключу в структуре записи предусмотрены поля, содержащие информацию о местонахождении записи во всех деревьях индексов, по которым индексировалась запись. Такая структура записи позволяет сократить размер памяти, занимаемый БД, так как не

требуется отдельно хранить значения ключей [11]. В данном случае значения информационных полей и ключей объединены в одной области памяти. Физическая структура записи представлена на рис. 3.

Доступ к данным по значению ключа основан на алгоритме обхода бинарного дерева. Алгоритм является симметричным, то есть может использоваться как для просмотра дерева в порядке убывания ключа, так и в порядке возрастания. Алгоритм использует стек для хранения пройденных вершин дерева, что обеспечивает возможность отката по дереву вверх при достижении конечной вершины дерева. Физическая структура списка блоков данных представлена на рис. 4.

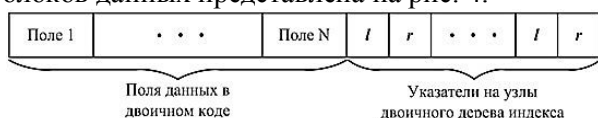


Рис. 3. Физическая структура записи БД

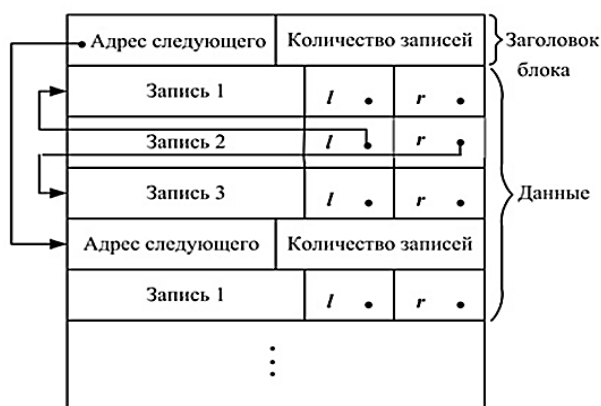


Рис. 4. Физическая структура списка блоков

Экспериментальная часть

Эксперименты по реализации разработанной СУБД проводились в среде Microsoft Visual Studio Community с возможностью кросс-платформенного переноса исполняемого кода. Данные, измененные в процессе работы, сохраняются в оперативной памяти, а при необходимости могут быть скопированы в энергонезависимую FLASH-память. На основе данной архитектуры можно организовать как многопользовательский

доступ к разделяемым данным, так и параллельные транзакции, в которых пользователь видит изменения только тех данных, которые сделал он сам.

В результате экспериментальных исследований была создана БД для хранения навигационной информации на борту МКА [12,13]. После проведения анализа описанной выше предметной области выделены следующие сущности:

1. КАРТА – для хранения картографической информации об участке земной поверхности (табл. 1). Здесь X1,Y1 – прямоугольные координаты юго-западного угла карты; X2,Y2 – прямоугольные координаты северо-западного угла карты; X3,Y3 – прямоугольные координаты северо-восточного угла карты; X4,Y4 – прямоугольные координаты юго-восточного угла карты. Прямоугольные координаты представляются в заданной картографической проекции. Атрибут «Идентификатор карты» выделим в качестве первичного ключа сущности КАРТА.

2. ЭТАЛОН – для хранения информативного участка на карте, используемого в качестве эталона (табл. 2). В,L - широта и долгота привязки на местности центрального элемента разложения эталонного изображения (ЭИ); X,Y - прямоугольные координаты в заданной картографической проекции в метрах для центрального элемента разложения ЭИ [14,15]. Атрибут «Идентификатор эталона» выделим в качестве первичного ключа сущности ЭТАЛОН. Атрибут «Идентификатор карты» выделим в качестве внешнего ключа для организации ссылочной целостности.

Таблица 1
Сущности «Карта»

Атрибут	Тип	Размер, байт
Идентификатор карты	LONG	4
Название карты	STRING	8
X1	DOUBLE	8
Y1	DOUBLE	8
X2	DOUBLE	8
Y2	DOUBLE	8
X3	DOUBLE	8
Y3	DOUBLE	8
X4	DOUBLE	8
Y4	DOUBLE	8

Таблица 2

Сущность «Эталон»

Литература

Атрибут	Тип	Размер
Идентификатор эталона	LONG	4
Идентификатор карты	LONG	4
B	DOUBLE	8
L	DOUBLE	8
X	DOUBLE	8
Y	DOUBLE	8

Заключение

В работе представлена архитектура реляционной СУБД, ориентированная на встраивание в бортовое программное обеспечение МКА. Предложенная архитектура СУБД имеет низкие требования к мощности вычислительной системы и ресурсам памяти на борту МКА.

Также разработан универсальный формат представления данных для СУБД, ориентированный на встраивание в бортовое программное обеспечение МКА. При вводе и изменении структурированной информации обеспечивается целостность данных, а для одновременного использования СУБД несколькими задачами возможен многопользовательский доступ к базе данных. Используя представленные архитектуру СУБД и формат, можно создавать базы данных для хранения данных от различных сенсоров, навигационной и другой информации.

1. Макриденко Л.А. Концептуальные вопросы создания и применения малых космических аппаратов / Л.А. Макриденко, С.Н. Волков, В.П. Ходненко // Вопросы электромеханики. Труды НПП ВНИИЭМ. – 2010. – Т. 114. – № 1. – С. 15–26.

2. Антамошкин А.Н. Технологические аспекты создания бортового программного обеспечения спутников связи / А.Н. Антамошкин, А.А. Колташев // Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. – 2005. – № 3. – С. 93–95.

3. Колесников А.Н. Технология поддержки принятия управленческих решений на основе оперативного мониторинга пожарной обстановки / А.Н. Колесников // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. – 2015. – № 9. – С. 157–163.

4. Конкин Ю.В. Распознавание изображений на основе текстурных признаков харалика и искусственных нейронных сетей / Ю.В. Конкин, А.Н. Колесников // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. – 2016. – № 2. – С. 117–123.

5. Технология создания программных моделей бортовых компьютеров спутников / А.В. Барков, А.А. Колташев, М.В. Тимисков, Н.Н. Шумаков // Научные технологии. – 2014. – Т. 15. – № 9. – С. 34–38.

6. Тиори Т. Проектирование структур баз данных / Т. Тиори, Дж. Фрай; пер. с англ. – М.: Мир, 1985. – 287 с.

7. Коннолли Т. Базы данных. Проектирование, реализация и сопровождение. Теория и практика / Т. Коннолли, К. Бегг. – М.: Вильямс, 2003. – 1440 с.

8. Кириллов В.В. Введение в реляционные базы данных / В.В. Кириллов, Г.Ю. Громов. – СПб.: BHV, 2009. – 464 с.

9. Конкин Ю.В. Система управления базами данных для навигационных комплексов летательных аппаратов / Ю.В. Конкин // Проблемы передачи и обработки информации в сетях и системах телекоммуникаций. – 2005. С. 240–241.

10. Дейт К. Введение в системы баз данных / К. Дейт; пер. с англ. – М.: Вильямс, 2002. – 1072 с.

Рязанский государственный радиотехнический университет

EMBEDDED DATA BASE MANAGEMENT SYSTEM ARCHITECTURE DEVELOPMENT OF SMALL SPACECRAFTS

Yu.V. Konkin¹, A.N. Kolesenkov²

¹PhD, Associate Professor, Ryazan State Radioengineering University, Ryazan, Russian Federation
e-mail: konkinjv@yandex.ru

²PhD, Associate Professor, Ryazan State Radioengineering University, Ryazan, Russian Federation
e-mail: sk62@mail.ru

A problem of designing database management systems (DBMS) for use on board of small space vehicles is considered. The purpose of the work is to develop the structure of on-board DBMS, description of the principles of functioning of its elements, as well as development of a universal data format. The proposed architecture of DBMS has low requirements for the performance of the on-board computer system and memory resources. Features of DBMS operation with a multilevel memory structure are considered. The components of physical structure of the database are identified. The analysis of access methods shows that the binary aligned tree method for accessing using the primary, unique, or foreign key is the most appropriate one for the task conditions. In order to reduce the amount of memory used, it is suggested not to index the foreign key, and perform record search when checking the referential integrity by sequentially viewing a table. To store data in the database, a format is

developed that describes the physical structure of the database, which contains the parameters necessary for downloading information. The access to the data by the value of a key is based on the algorithm of traversing the binary tree. The experiments on the implementation of the developed database were conducted in the Microsoft Visual Studio Community programming system with possibility of cross-platform transfer of executable code

Key words: database, DBMS, satellite, preprocessing, on-board

References

1. Makridenko L.A., Volkov S.N., Khodnenko V.P. "Conceptual issues of creation and application of small space vehicles", *Electromechanical matters. Proc. of VNIEM studies. (Voprosy elektromekhaniki. Trudy NPP VNIEM)*, Moscow, 2010, vol. 114, no. 1, pp. 15-26.
2. Antamoshkin A.H., Koltashev A.A. "Technological aspects of creating on-board software of communication satellites", *Siberian Journal of Science and Technology*, 2005, no. 3, pp. 93-95.
3. Kolesenkov A.N. "Technology of supporting the management decisions based on operational monitoring of the fire situation", *Proceedings of the TSU. Technical Science*, 2015, no. 9, pp. 157-163.
4. Konkin Y.V., Kolesenkov A.N. "Recognition of images based on textural signs of haralik and artificial neural networks", *Proceedings of the TSU. Technical Science*, 2016, no. 2, pp. 117-123.
5. Barkov A.V., Koltashev A.A., Timiskov M.V., Shumakov N.N. "The technology of creating software models of satellite on-board computers", *High Technologies*, 2014, vol. 15, no. 9, pp. 34-38
6. Teorey T., Fry J. "Designing Database Structures", Russ. ed., Moscow, Mir, 1985, 287 p.
7. Connolly T.M., Begg C.E. "Database Systems: A Practical Approach to Design, Implementation and Management", Russ. ed., Moscow, Vil'yams, 2003, 1440 p.
8. Kirillov V.V., Gromov G.Yu. "Introduction to relational database" ("Vvedenie v relyatsionnye bazy dannykh"), Saint Petersburg, BHV, 2009, 464 p.
9. Konkin Yu.V. "Database management system of navigational complexes of aircrafts", *Problems of information transferring and processing in networks and systems of telecommunications. Proc. of 14th International Scientific Technological Conference (Problemy peredachi i obrabotki informatsii v setyakh i sistemakh telekommunikatsiy: Tez. dokl. 14-y mezhdunar. nauch.-tekhn. konf. Ryazan. gos. radiotekhn. akad.)*, Ryazan, 2005, pp. 240-241.
10. Date C.J. "Introduction to Database Systems", Russ. ed., Moscow, Vil'yams, 2002, 1072 p.

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОЦЕССОВ ОПЕРАТИВНОГО УПРАВЛЕНИЯ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ КООРДИНАЦИИ НА ОСНОВЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО ПОДХОДА

А.Н. Козлова, М.А. Цуканов, О.А. Божкова

В статье рассматривается проблема технологической координации и оперативного управления непрерывно-дискретными производственными системами. Приводится декомпозиция задачи оперативного управления производством на этапы слежения за работой отдельных агрегатов, составления и оптимизации производственного расписания, проверки возможности реализации построенного расписания в условиях реального производства, корректировка производственного расписания в режиме on-line в случае возникновения рассогласования фактической и запланированной производственных ситуаций, проверки возможности реализации скорректированного расписания. В качестве задачи исследования рассматривается повышение эффективности решения основной проблемы технологической координации, связанной с проверкой реализации составленного расписания на основе реализации модели производственной системы, представленной последовательностью отдельных технологических агрегатов. Каждый из них дискретный по своему характеру — со своим началом и окончанием, с получением выходных результатов или конечной продукции в каждой операции, однако в динамике работа системы характеризуется как непрерывно-дискретная. Приводится обзор формализмов описания поведения таких систем и выявляются их недостатки. Рассмотрена возможность применения нечеткой модели для описания основных звеньев сложноструктурированной производственной системы при решении задачи планирования на этапах проверки и корректировки производственного расписания. Произведена апробация модели на примере сталеплавильного производства

Ключевые слова: оперативное управление, технологическая координация, оптимизация, нечеткая логика, искусственный интеллект

Введение

Основной задачей оперативного планирования и управления производством является составление согласованных производственных планов цехов предприятия и обеспечение их выполнения. Процесс решения этой задачи существенно усложняется для производств, характеризующихся широкой номенклатурой выпускаемой продукции, многообразием оборудования, многостадийностью технологических процессов, многовариантностью технологических маршрутов и, как следствие, сложными перекрестными материально-транспортными связями [3].

Технологическая координация (ТК) - составная часть оперативного управления (ОУ), обеспечивающая согласование работы отдельных звеньев управляемой системы в условиях конкретных технологических и организационно-технологических ситуаций и выполнение производственной программы по

количеству, качеству и номенклатуре продукции.

Основой ТК является контактный график (КГ) - производственное расписание, регламентирующее работу основного технологического оборудования. Проблема ТК сложноструктурированными производствами заключается в необходимости оперативной корректировки КГ в случае рассогласования текущей производственной ситуации относительно запланированной, что предполагает перебор возможных вариантов очередности выполнения заказов сменного-суточного задания (ССЗ), по соответствующим технологическим маршрутам.

Задача ОУ и ТК производства

Рассмотрим декомпозицию задачи ОУ и ТК производства на следующие подзадачи [4] (рис 1):

- слежение за работой отдельных агрегатов;
- составление и оптимизация производственного расписания;
- проверка возможности реализации построенного расписания в условиях реального производства;
- корректировка производственного расписания в режиме on-line в случае возникновения рассогласования фактической и запланированной производственных ситуаций;

Козлова Анна Николаевна – СТИ НИТУ МИСиС, магистрант, e-mail: anya2911@yandex.ru
Цуканов Михаил Александрович – СТИ НИТУ МИСиС, канд. техн. наук, старший преподаватель, e-mail: tsukanov_m_a@mail.ru
Божкова Олеся Александровна – СТИ НИТУ МИСиС, магистрант, e-mail: lesyabozhkova@yandex.ru

- проверка возможности реализации скорректированного расписания.

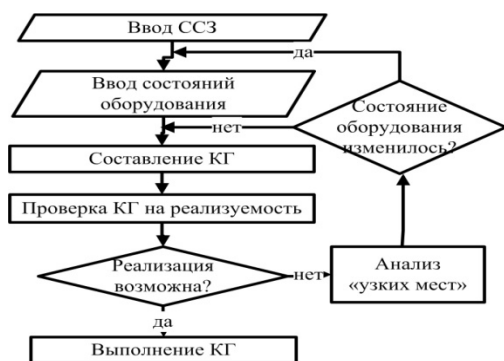


Рис. 1. Обобщенная блок-схема решения задачи ОУ и ТК

Основой эффективного решения основной проблемы технологической координации, связанной с проверкой реализации составленного расписания, является реализация модели производственной системы, представленной последовательностью отдельных технологических агрегатов, которые выполняют ряд операций, дискретных по своему характеру — со своим началом и окончанием, с получением выходных результатов или конечной продукции в каждой операции. Декомпозиция таких систем на составляющие их компоненты и элементы, дискретные по своему смыслу, имеет конечное число указанных составляющих. В динамике работу системы можно представить непрерывно-дискретной простым переходом к ее анализу в ограниченных временных интервалах.

Невозможность представления непрерывно-дискретной системы чисто дискретными или чисто динамическими моделями позволяет выделить эти системы в отдельный класс систем, поведение которых описывается бесконечной последовательностью сменяющих друг друга длительных непрерывных и мгновенных дискретных поведений.

Н.П. Бусленко [1] рассматривает непрерывно-дискретные системы как обобщающий (самый общий и самый сложный) класс сложных систем и называет такие системы агрегативными. Модель агрегата может быть использована как модель всей непрерывно-дискретной системы или ее элемента. В последнем случае система представляется сетью агрегатов с фиксированными каналами связей.

Моделирование поведения агрегата и агрегативной системы заключается в построении последовательности переходов из одного особого состояния в другое. Такой подход к моделированию, предложенный Н.П. Бусленко и основанный на принципе "особых состояний", фактически являлся первой попыткой учета дискретности в методах исследования непрерывно-дискретных систем.

Другой формализм описания поведения непрерывно-дискретных систем был предложен В.М. Глушковым в 1973 году [2]. Формализм включает в себя математическую модель непрерывно-дискретной системы, язык спецификации, а также набор процедур и функций реализации моделирующего алгоритма.

В противоположность агрегативному подходу, моделирующий алгоритм В. М. Глушкова базируется на дискретном событийном подходе к моделированию сложных систем. Под моделированием поведения непрерывно-дискретной системы понимается построение множества последовательностей событий, приводящих к смене ее поведения и структуры, причисляя к событию начальное состояние системы. Глобальное поведение моделируется с помощью специального процесса-монитора, который продвигает системное время в соответствии с календарем планирования событий или в соответствии с анализом времени наступления события, которое планируется по условию. Процесс моделирования заканчивается, когда календарь событий оказывается пустым.

Гибридное направление исследования непрерывно-дискретных систем возникло в начале 90-х годов на базе современной методологии спецификации и верификации сложных дискретных систем и систем реального времени, разработанной в теории реактивных систем [6]. Основатели гибридного направления, вводя в базовую дискретную модель реактивной системы некоторые характеристики непрерывного поведения, определяют, таким образом, новый класс сложных систем, который они называют "гибридной реактивной системой" [7].

Исследование поведения гибридной системы сводится к статическому качественному анализу поведенческих свойств, без использования поточечного численного моделирования глобального поведения системы.

Из анализа различных подходов к исследованию непрерывно-дискретных систем следует, что на сегодняшний день не существует подхода к моделированию и анализу этого класса сложных систем, в котором бы равноправно и логично сосуществовали методы исследования дискретной и непрерывной компоненты.

Учитывая тот факт, что в реальных производственных системах не всегда возможно точное описание процесса за счет неполноты и недостоверности информации, часто для описания процессов используют методы искусственного интеллекта, в частности нечеткие модели.

Рассмотрим возможность представления каждого компонента сложной производственной системы (рис. 2) в виде нечеткой модели.

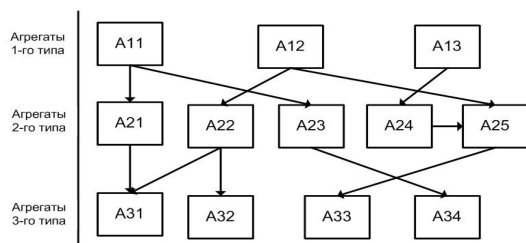


Рис. 2. Пример связей сложноструктурированного производства

Для задачи планирования наибольшую важность имеет параметр времени работы каждого технологического агрегата в процессе выполнения текущего расписания. Исходя из этого представим каждый агрегат реальной производственной системы в виде нечеткой модели.

Входными параметрами нечеткой модели являются временные интервалы T (1) работы производственного агрегата, в течение которых он находится в определенном состоянии S (2).

$$T = \begin{Bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \\ \dots & \dots \\ t_{n1} & t_{n2} \end{Bmatrix}; \quad (1)$$

где t_{n1} , t_{n2} - время начала и окончания этапа работы технологического агрегата, n - количество состояний s в ходе работы агрегата.

Приведенные интервалы T характеризуют максимально возможное время нахождения агрегата в состоянии. В реальных условиях

длительность состояния может отличаться ввиду специфики производственного процесса.

Выход нечеткой модели - состояние S в определенный момент времени.

$$S = \{s_1, s_2, \dots, s_n\}; \quad (2)$$

где s_n - состояние агрегата на n этапе работы агрегата.

Нахождение агрегата в каждом из приведенных состояний по технологии производства характеризуется максимальным временным интервалом. Его длительность зависит от многих факторов. При составлении плана на производстве как правило закладывают максимальное время работы каждого агрегата, однако опытный персонал, управляющий агрегатом в реальном времени, способен идентифицировать состояние более точно. Нечеткая модель позволит формализовать знания такого персонала и провести корректировку производственного расписания на основе определения актуального времени работы производственного оборудования.

Для того чтобы определить в каком состоянии s_k находится агрегат X_{ij} в заданное время t , составим соответствующие правила.

$\forall$ вида агрегата i

$\forall$ агрегата j в текущей категории агрегатов i

Выбираем $\max(\mu_{X_{ij}S_i}(t)) = y$.

Соответственно y - максимальное значение функции принадлежности агрегата X_{ij} в момент времени t .

Пример типового правила для базы, описывающей работу агрегата X_{ij} :

$$f \mu_{X_{ij}S_k}(t) \geq \mu_{X_{ij}S_{k+1}}(t) \text{ then } S = s_k \quad (3)$$

где S - состояние, в котором будет находиться агрегат X_{ij} в момент времени t

Своевременная правильная оценка текущего состояния каждого из элементов сложноструктурированного производства крайне важна для повышения эффективности процессов планирования на этапах проверки и корректировки текущего расписания с целью уменьшения непроизводственных затрат, связанных с рассогласованием текущей ситуации относительно запланированной.

Апробация модели на примере сталеплавильного производства

Рассмотрим применение нечеткой логической модели в процессе принятия решений по оперативному управлению и технологической координации оборудования

электросталеплавильного цеха (ЭСПЦ) ОАО «Оскольский электрометаллургический комбинат» (рис. 3).

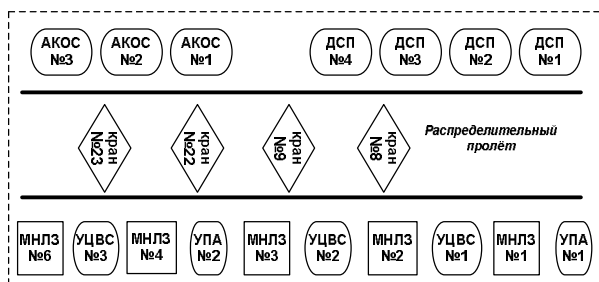


Рис. 3. Схема расположения агрегатов в ЭСПЦ

В состав электросталеплавильного цеха входят четыре дуговые сталеплавильные печи (ДСП), две установки продувки аргоном (УПА), три установки циркуляционного вакуумирования стали (УЦВС), два агрегата комплексной обработки стали (АКОС), пять машин непрерывного литья заготовок (МНЛЗ), пять стенов разогрева сталь-ковшей (СРСК) и четыре разливочных крана.

При производстве непрерывнолитой заготовки (НЛЗ) в условиях ЭСПЦ существуют следующие маршруты обработки стали:

ДСП-УПА-МНЛЗ;
ДСП-УПА - АКОС-МНЛЗ;
ДСП-АКОС-УЦВС-МНЛЗ;
ДСП-УЦВС-АКОС-МНЛЗ.

В качестве примера рассмотрим первый технологический маршрут.

Согласно технологии производства, ДСП характеризуется следующими состояниями:

$$S = \left\{ \begin{array}{l} \text{Загрузка, МежПлавочныйИнтервал,} \\ \text{Плавка, Доводка, Выпуск, Простой} \end{array} \right\}; \quad (4)$$

Максимальные временные интервалы для каждого из состояний:

Загрузка - $t_{11}-t_{12}=\{0-7\}$;
МежПлавочныйИнтервал $t_{21}-t_{22}=\{0-40\}$;
Плавление - $t_{31}-t_{32}=\{0-80\}$;
Доводка - $t_{41}-t_{42}=\{0-10\}$;
Выпуск - $t_{51}-t_{52}=\{0-10\}$;
Простой - $t_{61}-t_{62}=\{0-\infty\}$.

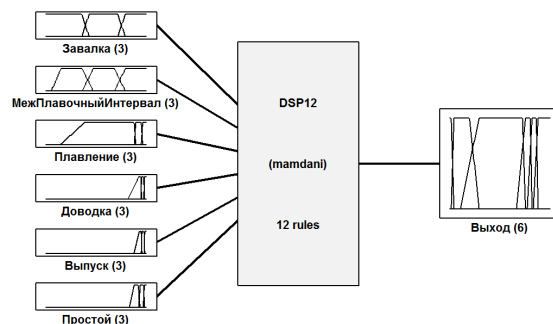


Рис. 4. Входы и выходы нечеткой логической модели ДСП

Для лингвистической оценки входных параметров используем три термина, характеризующих степень принадлежности к состоянию на каждом этапе в зависимости от длительности работы агрегата – «высокая», «средняя», «низкая» (рис. 5 - 10).

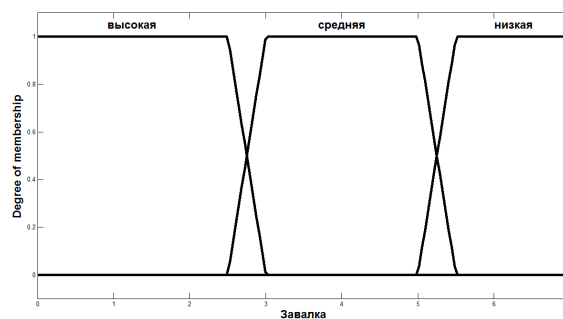


Рис. 5. Лингвистические оценки для входной переменной $t_{11}-t_{12}$

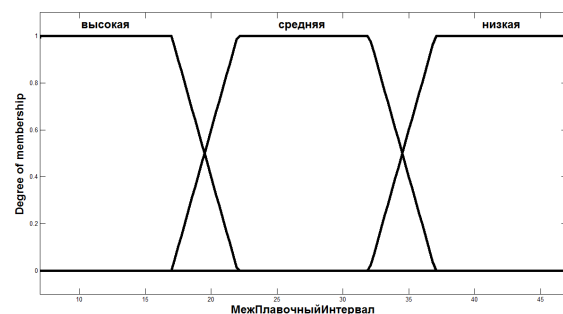


Рис. 6. Лингвистические оценки для входной переменной $t_{21}-t_{22}$

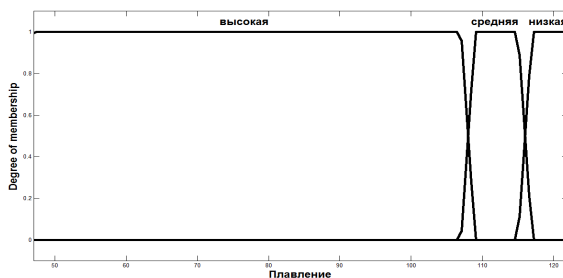


Рис. 7. Лингвистические оценки для входной переменной $t_{31}-t_{32}$

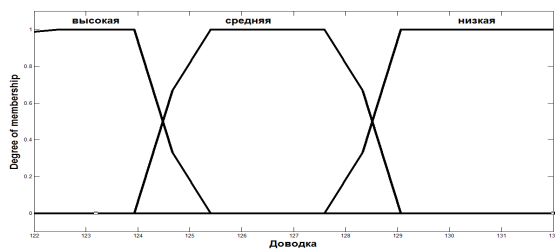


Рис. 8. Лингвистические оценки для входной переменной t41-t42

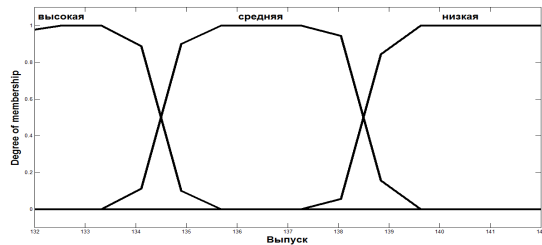


Рис. 9. Лингвистические оценки для входной переменной t51-t52

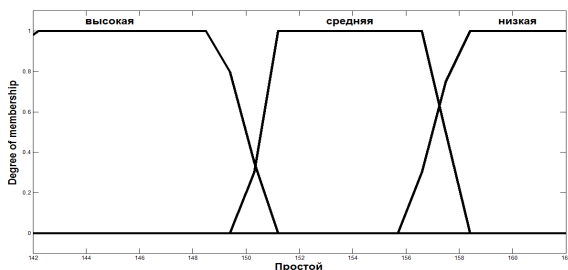


Рис. 10. Лингвистические оценки для входной переменной t61-t62

Оценим выход как вероятность нахождения агрегата в конкретный момент времени в одном состоянии из ряда (4) используя нечеткую модель Мандани [5] (рис. 11).

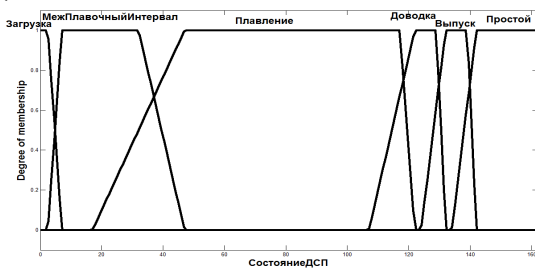


Рис. 11. Выход нечеткой модели для состояний ДСП

Модель УПА на основе нечеткой логической модели

Рассмотрим нечеткую модель установки продувки аргоном (УПА). Возьмем ее упрощенную модель, характеризуемую следующими состояниями:

$$S = \left\{ \begin{array}{l} \text{поступление стали, обработка стали,} \\ \text{ожидание, простой} \end{array} \right\}; \quad (5)$$

Максимальные временные интервалы для каждого из состояний:

Поступление стали - t11-t12={0-5};

Обработка стали - t21-t22={0-75};

Ожидание - t31-t32={0-20};

Простой - t41-t42={10-∞};

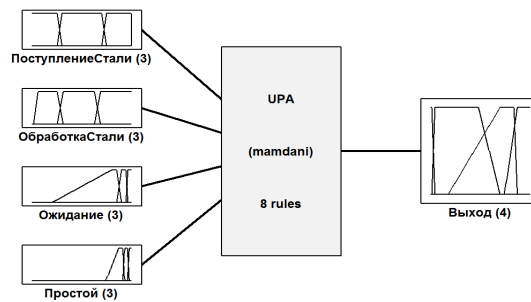


Рис. 12. Входы и выходы нечеткой логической модели УПА

Построим лингвистические оценки каждого из входных параметров в fis-редакторе пакета Matlab (рис. 13 -16).

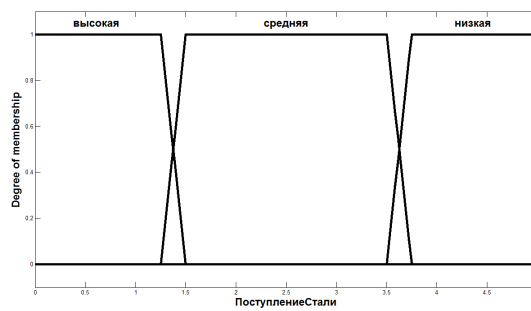


Рис. 13. Лингвистические оценки для входной переменной t11-t12

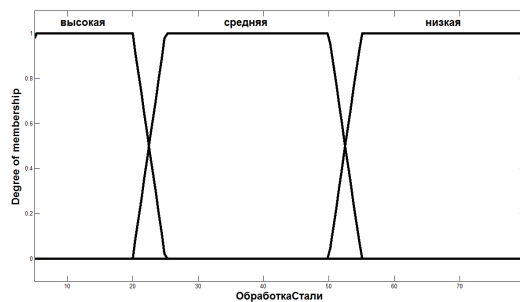


Рис. 14. Лингвистические оценки для входной переменной t21-t22

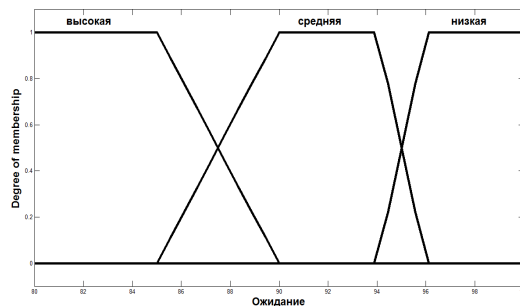


Рис. 15. Лингвистические оценки для входной переменной t31-t32

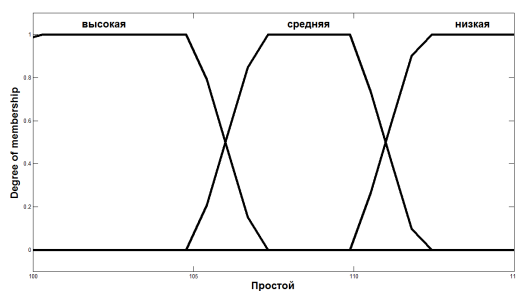


Рис. 16. Лингвистические оценки для входной переменной t41-t42

Оценим выход как вероятность нахождения агрегата в конкретный момент времени в одном состоянии из ряда (5) используя нечеткую модель Мандани [5] (рис. 17).

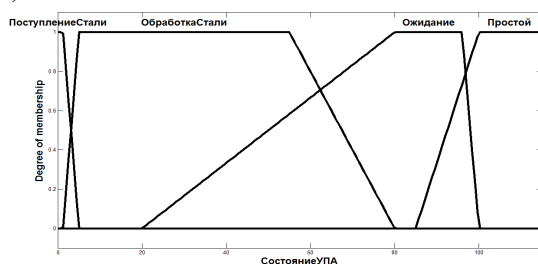


Рис. 17. Выход нечеткой модели для состояний УПА

Модель МНЛЗ на основе нечеткой логической модели

Рассмотрим нечеткую модель машины непрерывного литья заготовки (МНЛЗ). Возьмем ее упрощенную модель, характеризующуюся следующими состояниями:

$$S = \left\{ \begin{array}{l} \text{поступление стали, разливка стали,} \\ \text{выпуск, забор пустого стальнойковша} \end{array} \right\}; \quad (6)$$

Максимальные временные интервалы для каждого из состояний:

Поступление стали - t11-t12={0-5};

Разливка стали - t21-t22={0-100};

Выпуск стали - t31-t32={0-10};

Забор пустого стальнойковша - t41-t42={0-10}.

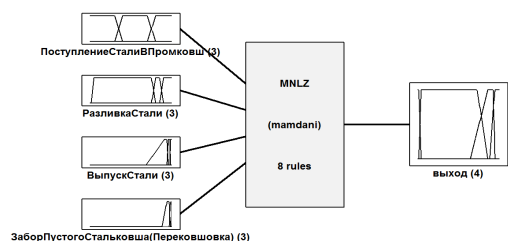


Рис. 18. Входы и выходы нечеткой логической модели МНЛЗ

Построим лингвистические оценки каждого из входных параметров в fis-редакторе пакета Matlab (рис. 19-22).

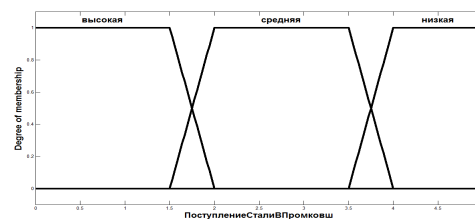


Рис. 19. Лингвистические оценки для входной переменной t11-t12

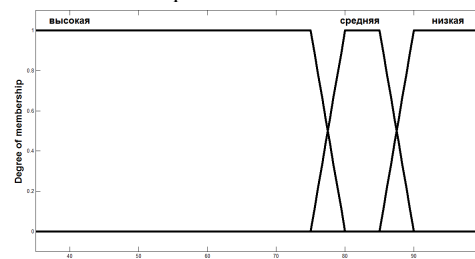


Рис. 20. Лингвистические оценки для входной переменной t21-t22

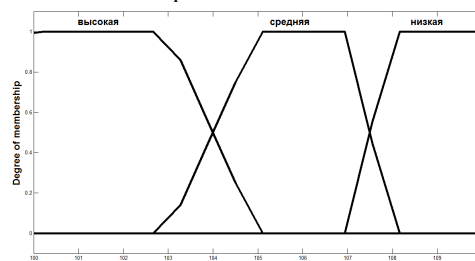


Рис. 21. Лингвистические оценки для входной переменной t31-t32

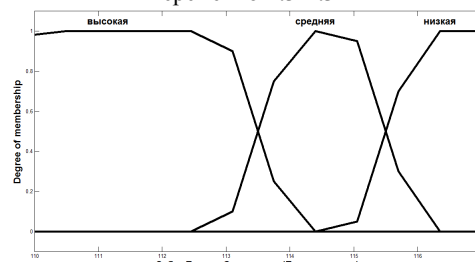


Рис. 22. Лингвистические оценки для входной переменной t41-t42

Оценим выход как вероятность нахождения агрегата в конкретный момент времени в одном состоянии из ряда (6), используя нечеткую модель Мандани [5] (рис. 23).

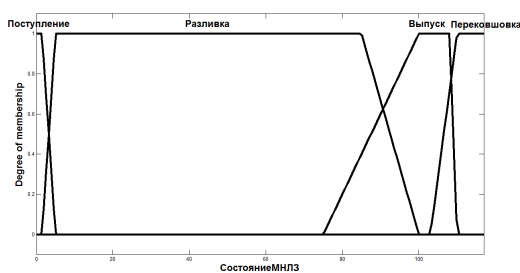


Рис. 23. Выход нечеткой модели для состояний МНЛЗ

Сравнение показателей работы известных в мире производителей стали показывает, что существенного снижения потребления

энергоносителей и уменьшения удельного расхода сырья и вспомогательных материалов удастся достигнуть в случае обеспечения высокой удельной производительности сталеплавильных агрегатов при условии достижения максимального согласования ритма их работы с ритмом работы МНЛЗ. Поэтому рассмотрим визуализацию правил определения состояний на примере данного агрегата.

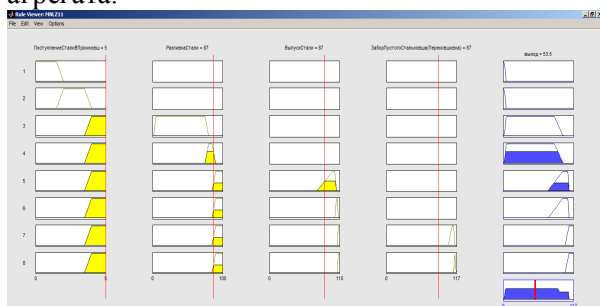


Рис. 24. Визуализация нечеткого логического выхода для МНЛЗ

На основе приведенных правил возможно решение задачи определения фактического времени работы производственного агрегата, что позволит повысить эффективность процессов проверки и корректировки расписания в темпе производства.

Описание основных производственных звеньев сложноструктурированной системы в виде нечетких моделей позволяет отразить все этапы производственного цикла каждого технологического агрегата с учетом реальных производственных факторов, реализованных правилами, на основе которых реализуется преобразование лингвистической оценки в принадлежность к реальному состоянию производственного оборудования.

Заключение

Применение нечеткой логической модели при моделировании производственного процесса сталеплавильного цеха позволит компенсировать время простоев агрегатов исходя из полученной разницы между фактическим временем, отводимым на работу каждого из них, и определенным фактически. На данной основе возможно перестроение графика работы агрегатов, что позволит повысить эффективность всего комплекса оборудования в режиме работы плавка на плавку.

Литература

1. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем/ Н.П. Бусленко. М.: Наука, 1968.-355 с.
2. Глушков В.М. Логическое проектирование дискретных устройств / В.М. Глушков. - Киев : Наук. думка, 1987. - 263 с.
3. Литвинцев П.И. Методы организации вычислений в диалоговых системах планирования: Канд. диссертация. – М.: Выч. Центр АН СССР. 1981. – 190.
4. Боева Л.М. Мультиагентная система поддержки принятия решений по технологической координации производств с многовариантными технологическими маршрутами / Л.М. Боева, М.А. Цуканов // Системы управления и информационные технологии. Воронеж,-2012.–Вып. 2(48).
5. Штовба С.Д. Проектирование нечетких систем средствами MATLAB / С.Д. Штовба. – М.: Горячая линия–Телеком, 2007. – 288 с.
6. Alur R., Courcoubetis C., Henzinger T., Ho P-T.: Hybrid automata: an algorithmic approach to the specification and analysis of hybrid systems. In Workshop on Theory of Hybrid Systems, Lyndby, Denmark, June 1993. LNCS 736, Springer-Verlag.
7. Nicollin X., Olivero A., Sifalis Y., Yovine S.: An Approach to the Description and Analysis of Hybrid Systems. Hybrid Systems, Lecture Notes in Comp.Sci 736, p.149-178. Springer-Verlag, 1993.

Старооскольский технологический институт им. А.А. Угарова (филиал) Национального исследовательского технологического университета «МИСиС»

EFFICIENCY IMPROVING OF OPERATIONAL CONTROL AND TECHNOLOGICAL COORDINATION PROCESSES BASED ON INTELLECTUAL APPROACH

A.N. Kozlova¹, M.A. Tsukanov², O.A. Bozhkova³

¹MA, Ugarov Stary Oskol Technological Institute National University of Science and Technology "MISiS", Stary Oskol, Russian Federation,

e-mail: anya2911@yandex.ru

²PhD, Assistant Professor, Ugarov Stary Oskol Technological Institute National University of Science and Technology "MISiS", Stary Oskol, Russian Federation,

e-mail: tsukanov_m_a@mail.ru

³MA, Ugarov Stary Oskol Technological Institute National University of Science and Technology "MISiS", Stary Oskol, Russian Federation,

e-mail: lesyabozhkova@yandex.ru

The article deals with the problem of technological coordination and operational management of continuously-discrete production systems. The decomposition of the operational control task into the stages of tracking the operation of individual units, compiling and optimizing the manufacture schedule, verification the feasibility of implementing the constructed schedule in real manufacture conditions, adjusting the production schedule in on-line mode in the event of a mismatch between the actual and planned production situations, checking the possibility of the adjusted schedule implementation. As a research task, it is considered to increase the efficiency of solving the main problem of technological coordination associated with verifying the implementation of the compiled schedule based on the implementation of the production system model, represented by the sequence of individual technological aggregates. Each of them is discrete in its nature - with its beginning and ending, with output results or final output in each operation; however, in dynamics, the system operation is characterized as continuous-discrete. A review of formalisms describing the behavior of such systems is presented and their shortcomings are revealed. The possibility of using a fuzzy model for describing the main links of a complex structured production system in solving the planning problem at the stages of checking and adjusting the production schedule is considered. The model is tested on the example of steelmaking production

Key words: operation control, technological coordination, optimization, fuzzy logic, artificial intelligence

References

1. Buslenko N.P. "Complex systems modeling" ("Modelirovanie slozhnykh sistem"), Moscow, Nauka, 1968, 355 p.
2. Glushkov V.M. "Logical design of discrete field" ("Logicheskoe proektirovanie diskretnykh ustroystv"), Kiev, Nauk. Dumka, 1987, 263 p.
3. Litvintsev P.I. "Methods of organizing calculations in interactive planning systems" Ph.D. diss. ("Metody organizatsii vychisleniy v dialogovykh sistemakh planirovaniya: Kand. dissertatsiya"), Moscow, Computing Center AN USSR, 1981, 190 p.
4. Boeva L.M., Tsukanov M.A. "A multi-agent system to support decision-making process of coordination of production with multiple-process route", *Control Systems and Information Technologies*, Voronezh, 2012, no. 2(48).
5. Shtovba S.D. "Development of fuzzy system by means of MATLAB" ("Proyektirovaniye nechetkikh sistem sredstvami MATLAB"), Moscow, Hotline – Telecom (Goryachaya liniya – Telekom), 2007, 288 p.
6. Alur R., Courcoubetis C., Henzinger T., Ho P-T. "Hybrid automata: an algorithmic approach to the specification and analysis of hybrid systems", In Workshop on Theory of Hybrid Systems, Lyndby, Denmark, LNCS 736, Springer-Verlag, 1993
7. Nicollin X., Olivero A., Sifalis Y., Yovine S. "An Approach to the Description and Analysis of Hybrid Systems. Hybrid Systems", Lecture Notes in Comp.Sci. 736, Springer-Verlag, 1993, pp.149-178.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ МАРШРУТИЗАЦИИ ТРАНСПОРТА В ГОРОДСКИХ УСЛОВИЯХ

С.А. Коваленко, В.Ф. Барабанов, Н.И. Гребенникова

Несмотря на активное применение информационных технологий, актуальность проблемы решения задачи маршрутизации транспорта в городских условиях не снижается с течением времени, поскольку практика выдвигает все более сложные задачи как по количеству оптимизируемых параметров, так и по количеству ограничений, учитываемых при ее решении.

Представлен рациональный алгоритм поиска оптимального маршрута, учитывающий особенности транспортной схемы города, что позволяет уменьшить количество вычисляемых путей, сокращая размерность исходной задачи, тем самым сокращается и время на ее решение. «Рациональным», а не «оптимальным», алгоритм называется потому, что изменен принцип формирования матрицы смежности: не вычисляются точные значения матрицы, а используются геометрические расстояния между точками.

Достоинством данного подхода является прямая зависимость точности алгоритма от вида графа, поскольку в случае большого количества пунктов назначения алгоритм поиска дает наилучшие результаты с точки зрения вычислительных ресурсов, и решение задачи доставки грузов с использованием транспортных средств в условиях крупного города является рациональным.

Строгое соблюдение сроков поставок при формировании рациональных маршрутов помогает добиться не только минимизации затрат на эксплуатацию, на перевозку людей, но и сократить расходы на хранение товарно-производственных запасов на складах

Ключевые слова: задача маршрутизации транспорта, алгоритм поиска рационального маршрута, оценка алгоритмов

Введение

Задачи маршрутизации автотранспорта являются ключевыми задачами в области логистики. Доставка товара в большинстве случаев добавляет к его стоимости сумму, сравнимую со стоимостью самого товара, поэтому поиск рационального решения в целях снижения транспортных затрат является актуальным [1-4].

Задача маршрутизации транспорта – это типичная задача комбинаторной оптимизации, в которой необходимо определить набор маршрутов от парка транспортных средств до нескольких отдаленных точек-потребителей. Задачи данной тематики принадлежат к пересечению задачи коммивояжера и задачи об упаковке рюкзака [5].

Постановка задачи

В данной статье рассматривается решение первой составляющей задачи маршрутизации, а именно разработка алгоритма поиска рационального маршрута с учетом особенностей планировки города, представленной в виде графа.

При решении данной задачи следует

рассматривать следующие особенности задачи:

- геометрическая задача (планарная, матрица расстояний отражает расстояния между точками на плоскости);

- симметричная и асимметричная задачи.

В общем виде алгоритм поиска рационального маршрута в городских условиях представлен на рис. 1.

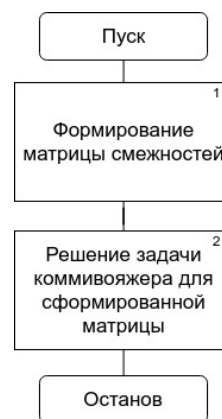


Рис. 1. Базовый алгоритм поиска рационального маршрута в городских условиях

Матрицей смежности в рассматриваемом решении считается время достижения от одной рассматриваемой точки до другой. Затем производится поиск рационального маршрута одним из выбранных алгоритмов.

Следует заметить, что задача для ситуации с городским графом имеет свои особенности,

Коваленко Сергей Александрович – ВГТУ, магистрант,
e-mail: sergpc@yandex.ru

Барабанов Владимир Федорович - ВГТУ, д-р техн. наук,
профессор, e-mail: bvf@list.ru

Гребенникова Наталия Ивановна – ВГТУ, канд. техн. наук,
доцент, e-mail: g-naty@yandex.ru

которые необходимо учитывать, а именно то, что задача является асимметрической и, благодаря планировке городов, задачу с определенной долей приближения можно назвать геометрической. Это позволяет изменить принцип формирования матрицы смежности, а именно, не вычислять точные значения матрицы смежностей, а довольствоваться геометрическими расстояниями между точками. С учетом этого факта, получаем модифицированный алгоритм поиска рационального маршрута, представленный на рис. 2.

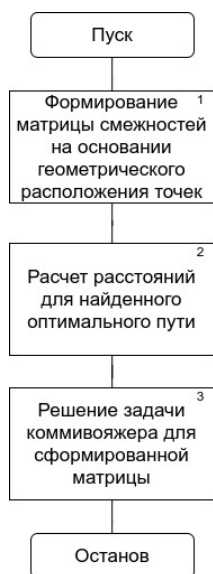


Рис. 2. Модифицированный алгоритм поиска рационального маршрута в городских условиях

Здесь блок формирования матрицы смежностей выглядит следующим образом: вес матрицы смежностей между точкой a_{ij} и a_{km} вычисляется по формуле:

$$s = (a_{ij} - a_{km})^2$$

Далее решается задача маршрутизации по сформированной псевдоматрице смежности. Затем производится расчет путей по уже найденному «рациональному» маршруту одним из выбранных алгоритмов поиска пути.

Оценка сложности комбинаций алгоритмов

В итоге имеется два принципиально различающихся алгоритма решения задачи с различными вариациями алгоритмов решения промежуточных задач.

Для этапа поиска пути между точками, а также формирования матрицы смежностей в базовом алгоритме рассмотрены следующие

алгоритмы:

- алгоритм «Astar»;
- алгоритм Дейкстры [6].

Для этапа поиска кратчайшего пути между точками по матрице смежностей реализованы следующие алгоритмы:

- метод простого перебора;
- метод ветвей и границ (частный случай – метод Литтла).

Рассмотрим алгоритмы решения задачи для n узлов, базовый алгоритм представляет следующее:

- формирование матрицы смежностей для $N+1$ узлов (n и начальная точка), при формировании матрицы необходимо произвести расчет времени достижения $(N+1) * N$ оптимальных путей между точками (время работы алгоритма Дейкстры $O(n^2)$, а время работы «A star» — $O(\log h^*(n))$);

- решение задачи для сформированной матрицы смежностей. Здесь наиболее быстрый путь будет найден простым перебором, однако следует иметь в виду, что сложность алгоритма при данном подходе $O(N!)$ может удовлетворять лишь при небольшом количестве точек, при этом необходимо обратить внимание на метод ветвей и границ при количестве вершин N за время $O(N^3 \ln^2(N))$.

В итоге имеем следующие вариации базового алгоритма:

- формирование матрицы смежностей (алгоритм Дейкстры), решение задачи коммивояжера (полный перебор), предполагаемая сложность - $O(n^2) * (N+1) * N + O(N!)$;
- формирование матрицы смежностей (алгоритм «A star»), решение задачи коммивояжера (полный перебор), предполагаемая сложность - $(O(\log h^*(n))) * (N+1) * N + O(N!)$;
- формирование матрицы смежностей (алгоритм Дейкстры), решение задачи коммивояжера (метод ветвей и границ), предполагаемая сложность - $O(n^2) * (N+1) * N + O(N!)$;
- формирование матрицы смежностей (алгоритм «A star»), решение задачи коммивояжера (метод ветвей и границ), предполагаемая сложность - $(O(\log h^*(n))) * (N+1) * N + O(N^3 \ln^2(N))$ [7].

Вариации модифицированного алгоритма

Вариации модифицированного алгоритма представлены далее.

При формировании матрицы смежностей

для $N+1$ узлов необходимо произвести расчет геометрических расстояний между точками по формуле

$$s = (a_{ij} - a_{km})^2,$$

т. е. время выполнения алгоритма $O(N^2)$.

Решение задачи для сформированной матрицы смежностей на основе геометрических расстояний будет рациональным для городов с преимущественно прямоугольной планировкой, при выходе за пределы города этот алгоритм может не дать рациональных результатов, в таком случае следует использовать реализацию базового алгоритма. Скорости алгоритма решения задачи коммивояжера такие же, как и в базовом алгоритме (перебор— $O(N!)$, метод ветвей и границ— N за время $O(n^3 \ln^2(n))$).

Поскольку в модифицированном алгоритме пути для матрицы смежностей не вычисляются (анализ идет на основе геометрических расстояний между точками), то после поиска рационального пути необходимо вычислить полные маршруты пути между точками пути.

Вычислять их стоит одним из реализованных методов поиска рационального пути между точками (алгоритм Дейкстры или «A star»). Всего необходимо вычислить $N + 1$ расстояний, т. е. сложность этой части алгоритма следующая: $O(n^2) * (N + 1)$ при использовании алгоритма Дейкстры, $O(\log^*(n)) * (N+1)$ — при использовании алгоритма «A star».

Резюмируя, получим следующие варианты модифицированного алгоритма:

- формирование матрицы смежностей (координатный метод), решение задачи коммивояжера (полный перебор), вычисление оптимального пути (алгоритм Дейкстры), предполагаемая сложность $O(N^2) + O(N!) + O(n^2) * (N + 1)$;

- формирование матрицы смежностей (координатный метод), решение задачи коммивояжера (полный перебор), вычисление оптимального пути (алгоритм «A star»), предполагаемая сложность $O(N^2) + O(N!) + O(\log^*(n)) * (N+1)$;

- формирование матрицы смежностей (координатный метод), решение задачи коммивояжера (метод ветвей и границ), вычисление оптимального пути (алгоритм Дейкстры), предполагаемая сложность $O(N^2) + O(n^3 \ln^2(n)) + O(n^2) * (N + 1)$;

- формирование матрицы смежностей (координатный метод), решение задачи коммивояжера (метод ветвей и границ), вычисление оптимального пути (алгоритм «A

star»), предполагаемая сложность $O(N^2) + O(n^3 \ln^2(n)) + O(\log^*(n)) * (N+1)$.

Модифицированный алгоритм явно быстрее, но он будет выдавать приближенное решение. К тому же модифицированный алгоритм стоит использовать лишь для городских условий (поскольку в городских условиях оценка координатным методом расстояний наиболее приближена к оценке реальными расстояниями). Следует также иметь в виду, что некоторые задачи могут быть решены за допустимое время и базовым алгоритмом, что дает большую точность.

Комбинированный алгоритм поиска оптимального маршрута в городских условиях

В итоге получим, что наиболее рациональным вариантом алгоритма будет комбинированный алгоритм с переключениями в зависимости от текущих параметров задачи. Финальный алгоритм с переключениями представлен на рис.3, в алгоритме использованы следующие обозначения:

- NOptim—количество узлов для переключения с базового алгоритма на оптимизированный (учитывается EnableOpt);

- NmOptim—количество узлов для безусловного переключения с базового алгоритма на оптимизированный (всегда больше NmaxOptim), для случаев с «очень большим» количеством узлов для посещения величина введена для того, чтобы уменьшить нагрузку на вычислительное устройство при формировании матрицы смежностей;

- NmaxEnumerat—кол-во узлов для переключения с метода полного перебора на метод ветвей и границ;

- EnableOpt—допустимость использования оптимизированного алгоритма (в случае, если задача решается в пределах городского графа), N — количество узлов, которые необходимо посетить.

Определить NmmaxOption и NmaxOption следует эмпирически.



Рис. 3. Модифицированный алгоритм с переключениями

Воронежский государственный технический университет

DEVELOPMENT OF AN ALGORITHM FOR FINDING AN OPTIMAL ROUTE IN URBAN ENVIRONMENT

S.A. Kovalenko¹, V.F. Barabanov², N.I. Grebennikova³

¹MA, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: sergpc@yandex.ru

²Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: bvf@list.ru

³PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: g-naty@yandex.ru

Despite active use of information technology, the relevance of the problem of transport routing in urban conditions does not decrease over time, as practice poses increasingly complex problems, both in terms of the number of optimized parameters and the number of constraints taken into account when solving.

A rational algorithm for finding the optimal route is presented, taking into account the features of the directional grid, which makes it possible to reduce the number of computed paths, reducing the dimension of the original problem, thereby reducing

Литература

1. Плотников О.А. Решение задачи поиска оптимального пути между двумя точками на графе с нерегулярным весом ребер / О.А. Плотников, Е.С. Подвальный // Вестник Воронежского государственного технического университета. - 2012. - Т. 8. № 6. - С. 22-26.
2. Плотников О.А. Разработка меметического алгоритма для решения задач оптимального планирования грузоперевозок / О.А. Плотников, Е.С. Подвальный // Вестник Воронежского государственного технического университета. - 2012. - Т. 8. № 10.1. - С. 19-24.
3. Плотников О.А. Разработка алгоритма для комплексного решения задач транспортной логистики / О.А. Плотников, Е.С. Подвальный // Вестник Воронежского государственного технического университета. - 2011. - Т. 7. № 11. - С. 102-105.
4. Плотников О.А. Решение задач многоальтернативной маршрутизации грузоперевозок с помощью эволюционных методов / О.А. Плотников, Е.С. Подвальный // Системы управления и информационные технологии. 2013. - Т. 51. № 1.1. - С. 187-192.
5. Мудров В.А. Задача о коммивояжере: учеб. пособие для вузов / В.А. Мудров. - 1-е изд. - М.: Знание, 1969. - 66 с.
6. Russel J. Алгоритм Дейкстры / J. Russel, R. Cohn. - СПб.: Символ Плюс, 2012. - 112 с.
7. Smith N. On the computational complexity of branch and bound search strategies Publisher Monterey / N. Smith, R. Douglas. - California: Naval Postgraduate School, 2012. - 108 с.

the time for its solution. The algorithm is called "rational" but not "optimal", because the principle of forming an adjacency matrix is changed: exact values of the matrix are not calculated, but geometrical distances between points are used.

The advantage of this approach is the direct dependence of the accuracy of the algorithm on the kind of graph, since in the case of a large number of destinations, the search algorithm gives the best results from the point of view of computing resources, and the solution of the task of delivering goods using vehicles in a large city is rational.

Strict adherence to the delivery dates for the formation of rational routes helps to achieve not only minimization of operating costs, transportation of people, but also to reduce the costs of storing inventory in warehouses

Key words: routing problem, transportation algorithm for finding the optimal route, evaluation of algorithms

References

1. Plotnikov O.A., Podval'nyy E.S. "The solution of the problem of finding the optimal path between two points on a graph with irregular weight of edges", *The Bulletin of Voronezh State Technical University*, Voronezh, 2012, vol. 8, no. 6, pp. 22-26
2. Plotnikov O.A., Podval'nyy E.S. "Development of a memetic algorithm for solving problems of optimal planning of cargo transportation", *The Bulletin of Voronezh State Technical University*, Voronezh, 2012, vol. 8, no. 10-1, pp. 19-24
3. Plotnikov O.A., Podval'nyy E.S. "Development of an algorithm for the complex solution of transport logistics problems", *The Bulletin of Voronezh State Technical University*, Voronezh, 2011, vol. 7, no. 11, pp. 102-105
4. Plotnikov O.A., Podval'nyy E.S. "Solving the problems of multi-alternative routing of cargo transportation using evolutionary methods", *Automation and Remote Control*, 2013, vol. 51, no. 1.1, pp. 187-192
5. Mudrov V.A. "The problem of the traveling salesman: Tutorial." ("Zadacha o kommivoyazhere: ucheb. posob. dlya vuzov. 1-e izd"), Moscow, Znanie, 1969, 66 p.
6. Russel J., Cohn R. "Dijkstra's algorithm" ("Algoritm Deykstry"), Saint Petersburg, Simvol Plyus, 2012, 112 p.
7. Smith N., Douglas R. "On the computational complexity of branch and bound search strategies Publisher Monterey", California, Naval Postgraduate School, 2012, 108 p.

АНАЛИЗ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ КОМПРЕССОРНОЙ СТАНЦИИ ПО КРИТЕРИЮ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОСТИ

Л.В. Булыгина, В.И. Ряжских

Повышение энергоэффективности компрессорных станций (КС) – актуальная проблема в газовой отрасли. Анализ и расчет технологических режимов работы КС при этом является неотъемлемой частью решения задачи обеспечения энергоэффективности и оптимизации работы КС и всей газотранспортной системы (ГТС) в целом. В статье рассмотрены основные объекты газотранспортной системы: компрессорная станция, линейный участок магистрального газопровода, газовая смесь – природный газ. Также рассмотрен расчет аппарата воздушного охлаждения (АВО) газа (дополнительного объекта ГТС) как пункта редуцирования температуры. Освещены вопросы регулирования работы газоперекачивающих агрегатов и АВО газа.

Исследовано влияние выходных термодинамических параметров (температуры и давления) компрессорной станции на энергоэффективность работы КС. Проведен эксперимент по оценке влияния выходного давления на локальную и системную энергоэффективность КС на примере работы линейной КС с установленными на ней газотурбинными газоперекачивающими агрегатами ГПА-16. Выполнен расчет и анализ режимов работы участка газотранспортной системы с тремя линейными компрессорными станциями по критериям энергоэффективности. В качестве критериев энергоэффективности были приняты показатели годового объема потребления топливного газа на рассматриваемом участке ГТС и значения потребляемой мощности компрессорных станций.

Применение рассмотренных в статье методов расчета режимов работы КС и регулирования выходных термодинамических параметров КС позволит улучшить показатели энергоэффективности КС, уменьшить потребляемую мощность компрессорных станций и снизить затраты топливного газа

Ключевые слова: энергоэффективность, компрессорная станция, газоперекачивающий агрегат, аппарат воздушного охлаждения газа

Введение

Повышение энергоэффективности компрессорных станций, как основных потребителей топливно-энергетических ресурсов, является актуальной проблемой сегодня [1]. Неотъемлемым звеном при этом в решении задачи обеспечения энергоэффективности компрессорных станций и оптимизации их работы становится расчет режимов работы КС.

Для разработки различных алгоритмов расчетов газотранспортной системы необходимо предварительно разработать алгоритмы расчетов объектов ГТС [2], которые будут обеспечивать высокую скорость работы, и соотноситься с предлагаемыми методиками, изложенными в нормах технологического проектирования.

Основные объекты ГТС

К основным объектам ГТС относятся (рис. 1):

- Объект – газовая смесь (природный газ);

- Объект – линейный участок;
- Объект – компрессорная станция.

Параметры газовой смеси.

Все производимые расчеты ГТС так или иначе опираются на параметры газовой смеси, транспортируемой по трубе. Сами эти параметры можно определить из компонентного состава газа, поэтому газовая смесь выделяется как самостоятельный объект, результатом расчета которого являются параметры смеси, необходимые для моделирования других объектов.

Исходя из компонентного состава, определяются следующие параметры: молярная масса, плотность природного газа, газовая постоянная, приведенные давление и температура, коэффициент сжимаемости, изобарная теплоемкость газа, динамическая вязкость, коэффициент Джоуля-Томпсона.

Булыгина Лидия Викторовна – ДООО «Газпроект-инжиниринг», ведущий инженер, тел. 8(908)130-83-86, e-mail: lidaspitsina@yandex.ru
Ряжских Виктор Иванович – ВГТУ, д-р техн. наук, профессор, e-mail: ryazhskih_vi@mail.ru



Рис. 1. Технологические параметры основных объектов ГТС

Параметры линейного участка магистрального газопровода (МГ).

Для линейного участка используется модель стационарного течения газа. Линейный участок можно описать шестью основными параметрами: температура газа в начале и конце участка газопровода, абсолютное давление на входе и выходе участка, коммерческий расход в начале и конце газопровода.

Расчет компрессорной станции.

Для расчетов оценочного уровня компрессорная станция моделируется по мощности согласно [4], не учитывая характеристики газоперекачивающих агрегатов (ГПА) (рис. 2). Однако при этом необходимо обеспечить возможность набора структуры компрессорной станции из агрегатов разной мощности и разделение агрегатов на рабочие и резервные с учетом возможного перехода агрегата как из рабочего в резервный, так и из резервного рабочий.

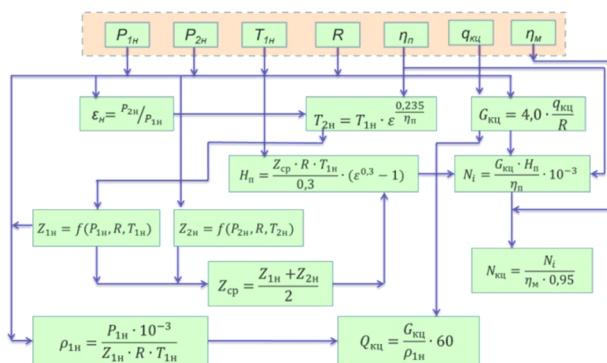


Рис. 2. Блок-схема определения параметров работы КЦ расчетно-оценочным методом, где P_{1n} (P_{2n}) – давление на входе (давление на выходе) КЦ, МПа; T_{1n} (T_{2n}) – температура на входе (температура на выходе) КЦ, К; q_{kc} – производительность, млн.м³/сут.; Z_{1n} (Z_{2n}) – коэффициент сжимаемости на входе (коэффициент сжимаемости на выходе) КЦ; Z_{cp} – средний коэффициент

сжимаемости; ϵ_n – степень повышения давления; R – газовая постоянная, кДж/кг·К; η_n – политропный КПД; η_m – механический КПД; G_{kc} – массовый расход КЦ, кг/с; N_i – внутренняя мощность сжатия КЦ, кВт; Q_{kc} – объемный расход КЦ, м³/мин; ρ_{1n} – плотность газа на входе, кг/м³; N_{kc} – мощность, потребляемая КЦ, МВт; H_n – политропный напор, кДж/кг

Так же, как и линейный участок, работу компрессорной станции описывают давление, температура и расход на входе и выходе КС, но к этим параметрам необходимо добавить еще два: сжатие на КС и мощность КС. Таким образом, работу компрессорной станции можно описать следующими параметрами: температура в начале и конце участка газопровода, абсолютное давление на входе и выходе участка, коммерческий расход газа в начале и конце участка, мощность (сжатия) КС, степень повышения давления (степень сжатия).

Давления газа на входе (выходе) компрессорного цеха (во входном и выходном патрубках компрессора или первого (последнего) в группе последовательно соединенных компрессоров) вычисляют по формулам:

$$P_{1n} = P_k - \delta P_{вх}, \quad (1)$$

$$P_{2n} = P_n + \delta P_{вых}, \quad (2)$$

где $\delta P_{вх}$ ($\delta P_{вых}$) – потери давления в трубопроводах и оборудовании на входе (выходе) компрессорного цеха (КЦ), МПа; P_k , P_n – давления газа в прилегающих линейных участках (на узле подключения КЦ), МПа.

Температуру газа T_{1n} на входе компрессорного цеха (КЦ) принимают равной температуре газа T_k в конце предшествующего линейного участка газопровода. Температуру газа на выходе КЦ принимают равной значению температуры газа после установки охлаждения или равной температуре после компрессоров (при отсутствии охлаждения газа).

Объемный расход на входе компрессора, м³/мин:

$$Q_{1n} = \frac{60 \cdot G_n}{\rho_{1n}} = 0,24 \cdot \frac{Z_{1n} \cdot T_{1n}}{P_{1n}} \cdot q_n, \quad (3)$$

где q_n – суточная производительность, млн. м³/сут; ρ_{1n} – плотность газа при условиях на входе, кг/м³:

$$\rho_{1n} = \frac{P_{1n} \cdot 10^3}{Z_{1n} \cdot R \cdot T_{1n}}, \quad (4)$$

R – газовая постоянная, кДж/кг·К; G_n – массовый расход, кг/с:

$$G_n = 4,0 \cdot \frac{q_n}{R} \quad (5)$$

Степень повышения давления (степень сжатия) – отношение абсолютных давлений,

измеренных в сечениях выходного и входного патрубков (фланцев) компрессора:

$$\varepsilon_n = \frac{p_{2n}}{p_{1n}} \quad (6)$$

Степень повышения температуры - отношение абсолютных температур на выходе и входе компрессора:

$$\tau_n = \frac{T_{2n}}{T_{1n}} \quad (7)$$

Удельная политропная работа (политропный напор), кДж/кг, в соответствии с [3]:

$$H_n = \frac{Z_{1n} \cdot R \cdot T_{1n}}{m_V} \cdot (\varepsilon_n^{m_V} - 1), \quad (8)$$

или

$$H_n = \frac{Z_{cp} \cdot R \cdot T_{1n}}{m_V} \cdot (\varepsilon_n^{m_T} - 1), \quad (9)$$

где $m_V = \frac{\lg(\tau \frac{Z_{2n}}{Z_{1n}})}{\lg \varepsilon_n}$ – объемный показатель политропного процесса; $m_T = \frac{\lg \tau_n}{\lg \varepsilon_n}$ – температурный показатель политропного процесса; $Z_{cp} = \frac{Z_{1n} + Z_{2n}}{2}$ – средний коэффициент сжимаемости.

Температура газа после сжатия (на выходе из центробежного нагнетателя (ЦБН)):

$$T_{2n} = T_{1n} \cdot \varepsilon_n^{m_T} \approx T_{1n} \cdot \varepsilon_n^{\frac{0,235}{\eta_n}} \quad (10)$$

Внутренняя мощность ЦБН (мощность сжатия), кВт:

$$N_i = H_i \cdot G_n = \frac{H_n \cdot G_n}{\eta_n} \quad (11)$$

Мощность, кВт, на муфте газотурбинной установки (ГТУ)-ЦБН в зависимости от внутренней мощности ЦБН:

$$N_n = \frac{N_i}{\eta_m \cdot K_n}, \quad (12)$$

где η_m – механический КПД ЦБН, включающий в себя потери в подшипниках, насосах и других устройствах, способных привести к потерям (отводу) энергии от ЦБН; K_n – коэффициент технического состояния ЦБН. Значения механического КПД, η_m , принимают по данным технической документации конкретного типоразмера.

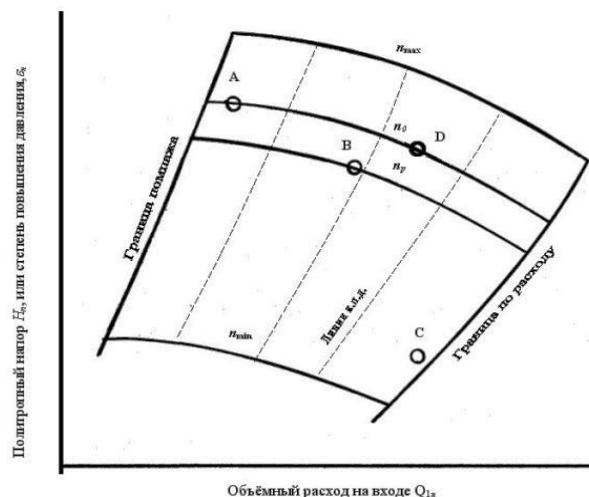


Рис. 3. Диаграмма режимов ЦБН

Поле возможных режимов ЦБН определяется его расходно-напорной характеристикой и имеет определенные физические ограничения. На рис. 3 показана диаграмма режимов центробежного компрессора. Нормальная рабочая точка - это ожидаемый режим обычной эксплуатации, в процессе которого желательна оптимальная эффективность. Номинальная (100 %) частота вращения определяется напором, который требуется получить в спецификационной точке А и расходом, который необходимо обеспечить в других спецификационных точках, таких как точка С. Нормальная частота вращения обычно соответствует приблизительно 98 % от номинальной частоты вращения (если не устанавливается другая величина). Максимальная (обычно 105 % от номинальной величины) и минимальная (обычно 70 % от номинальной величины) частоты вращения - это величины, которые поставщик разрешает для длительной эксплуатации.

Когда работа нагнетателя описывается только мощностью, для возможности управления агрегатом необходимо ввести дополнительный параметр: коэффициент использования мощности - это отношение потребляемой мощности к располагаемой мощности. Коэффициент характеризует, насколько эффективно расходуется мощность ГПА и насколько эффективно работает вся компрессорная станция:

$$K_n = \frac{N_n}{N_e^p}, \quad (13)$$

где N_e^p – располагаемая мощность ГТУ, МВт; N_n – потребляемая мощность, МВт;

Располагаемую мощность ГТУ определяют согласно [4] по следующей формуле:

$$N_e^p = N_e^0 \cdot K_N \cdot K_t \cdot K_y \cdot K_{\bar{n}} \cdot K_{Pa}, \quad (14)$$

где N_e^0 – номинальная мощность ГТУ; K_N – коэффициент технического состояния ГТУ (по мощности), принимают равным 0,95, если не имеется оснований для принятия другой величины; K_t – коэффициент, учитывающий влияние температуры атмосферного воздуха; K_y – коэффициент, учитывающий наличие утилизатора тепла; K_{Pa} – коэффициент, учитывающий влияние высоты над уровнем моря; $K_{\bar{n}}$ – коэффициент влияния относительной скорости вращения ротора силовой турбины; обычно учитывается в составе коэффициента K_N .

Учёт влияния температур атмосферного воздуха рекомендуется [4] рассчитывать по формуле:

$$K_t = 1 - k_t \cdot \frac{T_a - 288}{T_a}, \quad (15)$$

где T_a – расчетная температура атмосферного воздуха на входе в ГТУ, К; k_t – коэффициент, величину которого для оценочных расчетов рекомендуется принимать 3,0.

Расчётная температура атмосферного воздуха на входе в ГТУ определяется по формуле:

$$T_a = T_a^{cp} + 5, \quad (16)$$

где T_a^{cp} – средняя температура атмосферного воздуха расчетного календарного периода, К.

Расчет АВО газа

Дополнительным объектом ГТС является пункт редуцирования температуры (АВО). Это объект, проходя через который все свойства газового потока, кроме температуры, сохраняются, а температура сбрасывается до некоторой заданной величины. Такой пункт является простой моделью аппарата воздушного охлаждения газа (АВО), устанавливающегося после КЦ.

Количество аппаратов воздушного охлаждения (АВО) газа определяется на основе гидравлических и тепловых расчётов газопровода по режиму пропускной способности.

Расчётная температура атмосферного воздуха на входе установки охлаждения газа принимается по средней температуре расчётного периода с поправкой на изменчивость климатических данных:

$$T_a^{ABO} = T_a^{cp} + 2 \quad (17)$$

Температура газа на выходе:

$$T_{2\Gamma}^{ABO} = T_a^{ABO} + (T_{1\Gamma}^{ABO} - T_a^{ABO}) \cdot \exp\left(-\frac{k}{G^{ABO}}\right), \quad (18)$$

где $T_{1\Gamma}^{ABO}, T_{2\Gamma}^{ABO}$ – температура газа, соответственно, на входе и выходе из АВО, К; T_a^{ABO} – расчётная температура атмосферного воздуха, К; G^{ABO} – массовый расход (производительность) газа через АВО газа, кг/ч (млн м³/сут.); k – коэффициент, кг/ч (млн м³/сут.), определяемый для номинальных параметров по технической документации конкретного типоразмера АВО газа:

$$k = G_0^{ABO} \cdot \ln\left(\frac{T_{1\Gamma}^{ABO} - T_a^{ABO}}{T_{2\Gamma}^{ABO} - T_a^{ABO}}\right), \quad (19)$$

где G_0^{ABO} – номинальный массовый расход (производительность) газа через АВО газа, кг/ч (млн м³/сут.).

Массовый расход (производительность) одного аппарата для расчётного режима:

$$G_0^{ABO} = \frac{k}{\ln\left(\frac{T_{1\Gamma}^{ABO} - T_a^{ABO}}{T_{2\Gamma}^{ABO} - T_a^{ABO}}\right)} \quad (20)$$

Расчёт потерь давления, МПа, газа в АВО для режимов, отличающихся от номинального:

$$\Delta P^{ABO} = \Delta P_0^{ABO} \cdot \frac{\rho_0^{ABO}}{\rho^{ABO}} \cdot \left(\frac{G^{ABO}}{G_0^{ABO}}\right)^2, \quad (21)$$

где ρ – плотность газа, для средней температуры $\left(\frac{T_{1\Gamma}^{ABO} + T_{2\Gamma}^{ABO}}{2}\right)$ и абсолютного давления газа на входе АВО ($P_{1\Gamma}^{ABO}$).

Регулирование работы ГПА и АВО

КС состоят из одного или нескольких компрессорных цехов, осуществляющих технологические процессы очистки, компримирования и последующего охлаждения природного газа с использованием газоперекачивающих агрегатов (ГПА), пылеуловителей (ПУ) или фильтр-сепараторов (ФС), аппаратов воздушного охлаждения газа (АВО) (рис. 4).

Для оптимизации режима работы КС [5] регулирование термодинамических параметров происходит в зависимости от изменения:

- количества работающих нагнетателей на КС;
- фактического числа оборотов ротора каждого нагнетателя;
- количества включенных вентиляторов в АВО газа.

Диапазон изменения оптимизируемых параметров может быть ограничен. Ограничения могут быть связаны с пропускной способностью газопровода, минимально-допустимой температурой газа (по условию недопущения выпадения на стенках труб гидратов), максимально-допустимой температурой газа (по условию недопущения

повреждения противокоррозионной изоляции трубопровода), максимально-допустимым выходным давлением в газопроводе, минимальным давлением в газопроводе (по условию обеспечения технологического режима газопровода и обеспечения допустимого давления на входе следующей линейной КС). Учет ограничений осуществляется путем сужения диапазона варьирования, то есть изменением верхней или нижней границы данного оптимизируемого параметра. Ограничения на оптимизируемые параметры формулируются в виде двухсторонних неравенств, определяющих верхнюю и нижнюю границы их изменения.

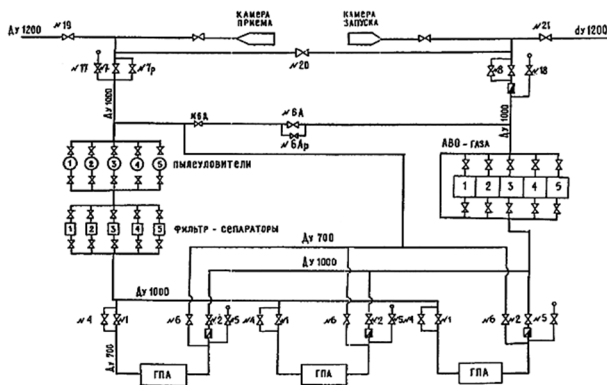


Рис. 4. Технологическая схема КС с параллельной обвязкой ГПА

Влияние выходных термодинамических параметров на энергоэффективность КС

Рассмотрим влияние выходных термодинамических параметров (температуры на выходе АВО и давления на выходе компрессорного цеха) на энергоэффективность работы КС.

В качестве критериев энергоэффективности будем использовать значения потребляемой мощности компрессорного цеха (N_n) и годовой расход топливного газа (ТГ) ($q_{тг}$).

Расход топливного газа ГТУ, тыс. $\text{м}^3/\text{ч}$, определяется согласно [3]:

$$q_{тг} = q_{тг}^0 \left(0,75 \cdot \frac{N_n}{N_e^0} + 0,25 \cdot K_{Pa} \sqrt{\frac{T_a}{288}} \right) \cdot K_{тг} \cdot K_{п}, \quad (22)$$

где $q_{тг}^0 = \frac{3,6 \cdot 10^3 \cdot N_e^0}{\eta_e \cdot Q_{тс}}$ – номинальный расход топливного газа, тыс. $\text{м}^3/\text{ч}$; $K_{тг}$ – коэффициент технического состояния ГТУ (по топливу); N_n – мощность, потребляемая ЦБН, МВт; η_e – номинальный КПД ГТУ; $Q_{тс}$ – теплота сгорания топливного газа, $\text{кДж}/\text{м}^3$.

В качестве примера выберем линейную компрессорную станцию с установленными на ней 4 газотурбинными агрегатами ГПА-16 (при схеме работы в режиме проектной производительности $3 \times 1 + 1$), давлением на входе в КЦ $P_{1н} = 5,4$ МПа, максимальным давлением на выходе КЦ $P_{2н} = 7,5$ МПа, температурой газа на входе КЦ $T_{1н} = 293$ К, коммерческой производительностью КЦ $q_n = 90$ млн. $\text{м}^3/\text{сут}$. Ограничения по давлению на выходе КЦ: $6,6 \text{ МПа} \leq P_{2н} \leq 7,5 \text{ МПа}$.

Минимальное давление на выходе несет ограничение по условиям работы центробежного нагнетателя (ЦБН), максимальное давление – по условию максимально допустимого рабочего давления в трубопроводе. Температура на выходе АВО газа не должна быть выше 45°C – по условию недопущения плавления изоляции трубопровода.

Расчет потребляемой мощности выполнен расчетно-оценочным методом, а затем уточнен с учетом характеристик ЦБН согласно [4]. Из результатов расчета потребляемой мощности и годового расхода топливного газа, следует, что минимальные затраты топливного газа (рис.5) и минимальная потребляемая мощность (рис.6) будет в режиме минимально-допустимого давления на выходе (при условии сохранения технологического режима и возможности транспортировки газа до следующей КС).

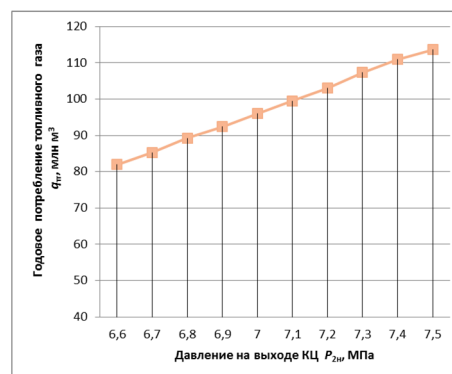


Рис. 5. Зависимость годового потребления топливного газа КЦ-1 от выходного давления

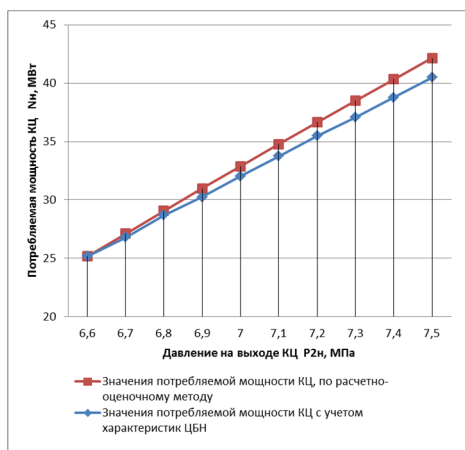


Рис. 6. Зависимость потребляемой мощности КЦ-1 от выходного давления

При этом можно говорить о локальной (собственной) энергоэффективности КС, отражающей техническое состояние без учета ее энергетического вклада в работу ГТС и без взаимосвязи работы КС с другими станциями.

Однако данный режим работы, с минимальным допустимым давлением на выходе КЦ-1, обеспечивающий локальную энергоэффективность КС, не будет говорить об энергоэффективной работе всего участка ГТС, т.е. об энергоэффективности системной. Системная энергоэффективность характеризует энергоэффективность газотранспортной системы с учетом энергетической взаимозависимости входящих в него объектов, учитывает режим их совместной работы (энергетический вклад каждого объекта в работу системы) [6].

Исходя из формул (8), (11), (22), температура на выходе АВО газа компрессорной станции КС-1 не влияет на потребляемую мощность КС-1 и объемы потребления ТГ, но будет влиять на энергетическую эффективность последующей станции. Уменьшение температуры технологического газа, поступающего в газопровод после его охлаждения в АВО, приведет к уменьшению средней температуры газа на линейном участке трубопровода и, как следствие, к снижению температуры и увеличению давления газа на входе в последующую КС. Это, в свою очередь, приведет к уменьшению степени сжатия на последующей станции (при сохранении давления на выходе из неё) и энергозатрат на компримирование газа по станции.

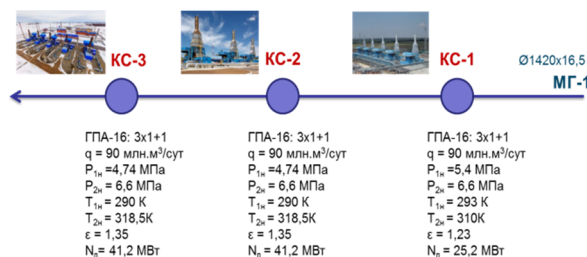


Рис. 7. Расчетная схема участка ГТС с тремя одноцеховыми линейными КС

Рассмотрим влияние выходного давления КЦ-1 на энергоэффективность последующих компрессорных станций. Для этого проведем расчет участка ГТС (рис.7) магистрального газопровода Ø1420x16,5 мм с расположенными на нем тремя линейными одноцеховыми компрессорными станциями КС-1, КС-2, КС-3. Характеристики работы КС-2 и КС-3 примем аналогичными КС-1. Работа агрегатов ГПА-16 по схеме 3x1+1. Давление в конце линейного участка – входное давление на КС. Выходное давление КС – начальное давление следующего участка МГ. Потерями давления во входной и выходной обвязке КС пренебрежем вследствие их небольшой величины по сравнению с потерями по участку МГ между КС.

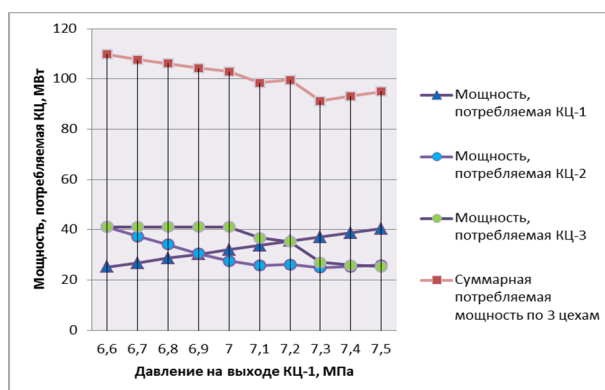


Рис. 8. Зависимость потребляемой мощности компрессорных цехов КЦ-1, КЦ-2, КЦ-3 от выходного давления КЦ-1

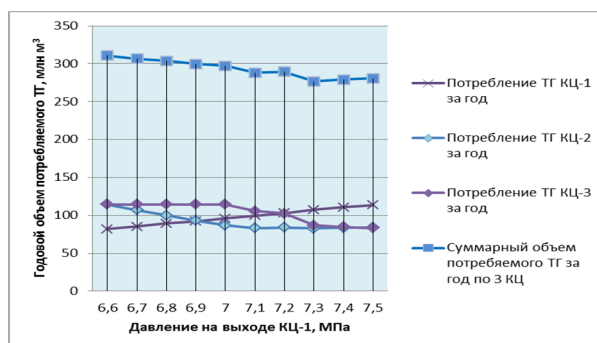


Рис. 9. Зависимость годового потребления топливного газа компрессорных цехов КЦ-1, КЦ-2, КЦ-3 от выходного давления КЦ-1

Результаты расчета, представленные на рис. 8, 9, показывают повышение энергоэффективности следующих за КС-1 станций КС-2 и КС-3 с увеличением выходного давления КЦ-1. Потребляемая мощность и годовое потребление КС-2, КС-3 топливного газа снижается за счет более высокого давления на входе компрессорных цехов КЦ-2, КЦ-3 и снижения необходимой степени сжатия для обеспечения технологического режима МГ. Общее (по трем цехам) потребление топливного газа и суммарная потребляемая мощность, являющиеся показателями системной энергоэффективности участка ГТС, также снижаются при значениях давления на выходе КЦ-1, близких к максимально разрешенному.

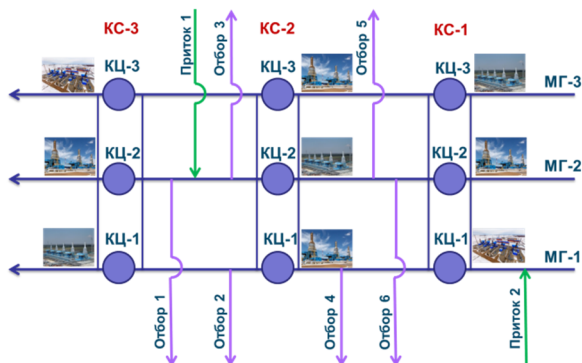


Рис. 10. Пример расчетной схемы участка ГТС с многоцеховыми КС

Выводы

Расчет режимов работы КС – необходимая составляющая при оценке энергоэффективности КС и участка ГТС (рис.10). Результаты исследования влияния выходных термодинамических параметров (давления и температуры) КС позволяют сделать следующие выводы:

- снижение температуры газа на выходе с компрессорной станции (в АВО газа) влияет на энергетическую эффективность последующей станции в результате снижения потерь давления на участке газопровода между КС и снижения энергозатрат на сжатие газа из-за более низкой температуры газа на входе нагнетателя;
- поддержание давления нагнетания вблизи максимально-допустимых значений позволяет снизить потери по длине трубопровода, увеличить входное давление на следующей КС и снизить необходимую степень сжатия, тем самым уменьшая потребляемую мощность, объемы потребления топливного газа и увеличивая энергоэффективность работы ГТС.

Литература

1. Распоряжение Правительства Российской Федерации от 13.11.2009 г. №1715-р. Об Энергетической стратегии России на период до 2030 года // Собрание законодательства РФ. - 2009. - №48. - ст.5836. - 103 с.
2. Казак А.С. Обоснование оптимальных вариантов развития и реконструкции газотранспортных систем в условиях неопределенности: монография / А.С. Казак, В.В. Русакова, И.Б. Кудрявцев. – М.: Газпром ВНИИГАЗ, 2010. – 188 с.
3. СТО Газпром 2-3.5-051-2006. Нормы технологического проектирования магистральных газопроводов. - М.: ВНИИГАЗ, 2006. - 187 с.
4. Р Газпром 2-3.5-281-2008. Рекомендации по выбору основного технологического оборудования для транспорта газа. - М.: ВНИИГАЗ, 2009. - 73 с.
5. Козаченко А.Н. Эксплуатация компрессорных станций магистральных газопроводов / А.Н. Козаченко. – М.: Нефть и газ, 1999. – 463 с.
6. СТО Газпром 2-3.5-113-2007. Методика оценки энергоэффективности газотранспортных объектов и систем. – М.: ВНИИГАЗ, 2007. – 118 с.

Дочернее открытое акционерное общество «Газпроектинжиниринг», г. Воронеж
Воронежский государственный технический университет

ANALYSIS OF THE FUNCTIONING OF THE COMPRESSOR STATION ON THE CRITERION OF ENERGY EFFICIENCY

L.V. Bulygina¹, V.I. Ryazhskikh²

¹Engineer, DOAO «Gazproektengineering», Voronezh, Russian Federation
ph. 8(908)130-83-86, e-mail: lidaspitsina@yandex.ru

²PhD, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: ryazhskih_vi@mail.ru

Increasing the energy efficiency of compressor stations (CS) is an outstanding issue within the entire gas industry. Analysis and calculation of technological operating modes of the CPs is an integral part of the overall solution of the problem

of ensuring energy efficiency and optimizing the operation of the CPs and the gas transportation system (GTS) as a whole. The main parts of the gas transportation system are reviewed in the article: compressor station, line section of the main gas pipeline, gas mixture vs. natural gas. Additionally, the calculation of the air cooling device (ACD) of gas (additional GTS particle) as a temperature reduction matter is reviewed. The issues of regulation of the operation of gas pumping units and ACD gas are revised.

The effect of the thermodynamic parameters (temperature and pressure) of the compressor station on the energy efficiency of the compressor station was also thoroughly investigated in the article. The effect of outlet pressure on local and system energy efficiency of the compressor station was assessed experimentally based on a linear compressor station with gas turbine gas compressor units GPA-16 installed on it. Calculation and analysis of the operation modes of the gas transmission system with three linear compressor stations were carried out according to energy efficiency criteria. The annual consumption of fuel gas in the section of the GTS and the power consumption of the compressor stations were adopted as criteria for energy efficiency.

Applying the methodology considered in the article for calculating the operational modes of the compressor station and regulating the output thermodynamic parameters of the compressor station will improve the energy efficiency parameters of the compressing process, reduce the power consumption of compressor stations and, as a result, will reduce the fuel gas costs

Key words: energy efficiency, compressor station, gas pumping unit, gas air-cooling unit

References

1. "On the Energy Strategy of Russia for the period up to 2030 - Decree of the RF Government from 13.11.2009, no 1715-city district. ("Rasporjazhenie Pravitel'stva Rossijskoj Federacii ot 13.11.2009 g. №1715-r. Ob Jenergeticheskoj strategii Rossii na period do 2030 goda"), *Collection of the RF legislation (Sbornik zakonodatelnykh aktov RF do 2030 goda)* 2009. No. 48, article 5836, p. 103.
2. Kazak, A.S., Rusakova V.V., Kudrjavcev I.B. "Substantiation of optimal options for the development and reconstruction of gas transmission systems in conditions of uncertainty" ("Obosnovanie optimal'nyh variantov razvitiya i rekonstrukcii gazotransportnyh sistem v uslovijah neopredelennosti: monografija"), Moscow, *Gazprom VNIIGAZ*, 2010, p. 188.
3. Gazprom "The norms of technological design of the main pipelines. ("Normy tehnologicheskogo proektirovaniya magistral'nyh gazoprovodov STO Gazprom 2-3.5-051-2006"), Moscow, *Gazprom VNIIGAZ*, 2006. P. 187.
4. Gazprom "Recommendations regarding the selection of the main technological equipment for the gas transportation", 2-3.5-281-2008. ("Rekomendacii po vyboru osnovnogo tehnologicheskogo oborudovaniya dlja transporta gaza"), Moscow, *Gazprom VNIIGAZ*, 2009, p. 73.
5. Kozachenko, A.N. "Compressor stations operation of the main gas pipelines" ("Ekspluatacija kompressornyh stancij magistral'nyh gazoprovodov"), Moscow, 1999, p. 463.
6. Patented Study no. STO Gazprom 2-3.5-113-2007. Methodology for assessing the energy efficiency of gas transmission facilities and systems (Metodika ocenki jenergojeffektivnosti gazotransportnyh ob'ektov i system). – Moscow, *Gazprom VNIIGAZ*, 2007, 118 p.

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ИЗМЕНЕНИЯ УСТАВОК ПО НАПРЯЖЕНИЮ НА ЭЛЕКТРОСТАНЦИЯХ НА ЗНАЧЕНИЯ САЛДО-ПЕРЕТОКА АКТИВНОЙ МОЩНОСТИ В СЕЧЕНИИ

В.В. Петров, А.А. Альмендеев, В.И. Полищук

Развитие электроэнергетики, рост генерирующих и потребляющих мощностей, усложнение структуры электрических сетейкратно повышают сложность управления режимами энергосистемы в целом. Повышение эффективности управления электроэнергетическими режимами крупных энергосистем является важнейшей задачей, стоящей перед диспетчерскими службами Системного оператора и ФСК ЕЭС. У используемых в настоящее время методов оперативного управления режимами возникают трудности при возникновении превышения максимально допустимого перетока активной мощности в контролируемом сечении, что может служить причиной отключения потребителей как средствами противоаварийной автоматики, так и в результате проведения оперативных мероприятий. В настоящее время остро стоит задача в расширении арсенала средств управления утяжеленными режимами, способных снизить или полностью исключить подобные ограничения электроснабжения.

В рамках исследований вопроса управления утяжеленными режимами энергосистем использовалась разработанная авторами методика по снижению сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении крупной энергосистемы за счет использования регулирующего эффекта нагрузки по напряжению.

В результате расчетов электрических режимов по разработанной методике были получены данные, позволяющие утверждать, что за счет использования регулирующего эффекта нагрузки по напряжению было достигнуто снижение сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении на 7,4% от исходного значения.

Использование разработанной методики позволяет расширить арсенал мероприятий оперативного управления, используемых при решении задачи предотвращения развития и ликвидации недопустимого превышения сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении энергосистемы. Достоверность полученных результатов подтверждается тождественностью синтезированной модели – моделям, используемым персоналом Системного оператора, а также строгим следованием принятым методикам расчета электрических режимов

Ключевые слова: энергосистема, статические характеристики нагрузки, напряжение, максимально допустимый переток

Введение

При планировании и управлении электроэнергетическим режимом контролируется множество параметров, среди которых напряжение в контрольных пунктах, текущее значение перетока активной мощности в контролируемом сечении, максимально допустимый переток активной мощности (МДП) в контролируемом сечении, токовая загрузка сетевых элементов. В результате различных событий данные параметры могут выходить за рамки допустимых значений, что приведет к возникновению и развитию аварийного режима в энергосистеме. Одним из таких нарушений является превышение МДП в контролируемом сечении. При соблюдении неравенства (1) (при отсутствии нарушений других параметров режима) в случае нормативного возмущения в послеаварийном

режиме обеспечивается нормальная работа энергосистемы.

$$P < P_{\text{МДП}} \quad (1)$$

Если же неравенство (1) не соблюдается, то при нормативном возмущении в послеаварийном режиме нормальная работа энергосистемы не гарантируется из-за вероятности возникновения дальнейших нарушений параметров режима, что может привести к лавинообразному развитию аварии.

Вследствие этого, при превышении МДП, диспетчерским персоналом предпринимаются мероприятия по снижению сальдо-перетока активной мощности в сечении. К таким мероприятиям относятся [1-3]:

- Увеличение генерации в дефицитной части энергосистемы и снижение генерации в избыточной части энергосистемы, в том числе с использованием допустимых аварийных перегрузок генерирующего оборудования;
- Изменение топологии сети, которое заключается в переводе узлов нагрузки на баланс другого энергорайона;
- Ввод графиков временных отключений в дефицитной части энергосистемы.

Петров Вячеслав Валерьевич - СГТУ, аспирант, тел. 8(960)816-20-99, e-mail: Petrov.v.163@yandex.ru

Альмендеев Андрей Аркадьевич - Филиал АО «СО ЕЭС» - Самарское РДУ, канд. техн. наук, диспетчер оперативно-диспетчерской службы, тел. 8(927)204-22-74, e-mail: almendeevaa@rambler.ru

Полищук Владимир Иосифович - СГТУ, д-р техн. наук, доцент, тел. 8(987)943-01-05, e-mail: Polischuk_vi@mail.ru

Изменение объемов генерации на электростанциях является наиболее эффективным мероприятием по ликвидации недопустимой перегрузки сечения энергосистемы, обладающее высоким быстродействием. Однако для этого необходимо иметь достаточное количество резервов мощности генераторов на загрузку и разгрузку, которые ограничиваются ввиду высоких финансовых издержек, необходимых для формирования и поддержания резервов.

Изменение топологии сети также обладает высокой эффективностью, так как позволяет быстро вывести из энергорайона часть нагрузки. При этом быстродействие определяется временем, необходимым для изменения коммутационного состояния оборудования. Однако данное мероприятие возможно использовать для достаточно небольшого числа узлов нагрузки. Для расширения возможностей данного метода ликвидации недопустимого превышения МДП необходимо вводить новые электрические связи, которые приведут к удорожанию инфраструктуры и излишнему усложнению управления электроэнергетическими режимами рассматриваемой части энергосистемы.

Ввод графиков временных отключений в дефицитной части энергосистемы является наименее приоритетным методом разгрузки сечения ввиду того, что при его использовании нарушается электроснабжение отдельных потребителей. Данный способ разгрузки используется лишь в крайнем случае, при недостаточной эффективности других мероприятий и сопровождается значительными финансовыми ущербами.

Постановка задачи: Исследовать возможность использования регулирующего эффекта нагрузки для снижения сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении Самарской энергосистемы.

Определение статических характеристик нагрузки

Известно, что регулирующий эффект нагрузки (далее РЭН) обуславливается статическими характеристиками нагрузки (далее СХН), которые отражают свойства нагрузки, проявляющиеся при медленных изменениях параметров режима, то есть таких изменениях, при которых каждое их значение

соответствует установившемуся режиму. Особый интерес с точки зрения оперативного управления электрическими режимами представляют СХН по напряжению и обусловленный ими РЭН по напряжению для активной и реактивной мощности, который достаточно правильно характеризует изменение нагрузки при малых отклонениях напряжения.

Статические характеристики нагрузки по напряжению различны для разного типа нагрузки, при этом получить точные данные о составе нагрузки того или иного узла зачастую проблематично. Поэтому при расчетах электрических режимов принято использовать типовые СХН комплексных узлов нагрузки.

Использование СХН затруднено ввиду сложности точного их определения. При этом основным способом их получения является проведение активного эксперимента, связанного с изменением электроэнергетических параметров на время проведения испытаний. При этом нельзя вмешиваться в технологический процесс предприятий, так как необходимы значения, присущие стандартным и наиболее типичным технологическим циклам.

Для оценки предполагаемого положительного эффекта от использования РЭН по напряжению в области оперативного управления электрическими режимами авторами был проведен анализ работ, посвященных определению СХН по напряжению.

Одной из таких работ являлась серия экспериментов, проведенных в 60-х годах во ВНИИЭ [4], где объектом исследований выступала комплексная нагрузка, которая включала в себя следующие группы потребителей:

- Коммунально-бытовые потребители (внутреннее и наружное освещение, бытовые приборы, электродвигатели небольшой мощности)
- Небольшие промышленные предприятия
- Электрифицированный транспорт
- Прочие потребители (водопровод, канализация, прилегающие сельскохозяйственные районы).

В качестве комплексной нагрузки исследовались узлы нагрузки в городах с населением 150-300 тыс. чел., а в качестве промышленной – узлы нагрузки предприятий с преимущественно крупными асинхронными электродвигателями, а также узел нагрузки с преобладанием синхронных электродвигателей.

Активные мощности нагрузки испытуемых узлов были в пределах 30-150 МВт. Определялись характеристики суммарной нагрузки узлов и отдельных групп потребителей мощностью от 5 до 25-50 МВт, питавшихся по линиям 6-110 кВ. При этом измерения проводились как в дневное, так и в ночное время суток.

Таблица 1

Вид нагрузки	Регулирующие эффекты нагрузки	
	k_P	k_Q
Коммунально-бытовая нагрузка, малые промышленные узлы	1,45	3,5
Крупные промышленные узлы	1	2,8
Узлы с большой долей горнодобывающих предприятий	0,6 (0÷1,9)	3,9(-0,7÷8,9)
Узлы с большой долей нефтяной промышленности	0,25(0÷1,5)	4(1,6÷11)
Узлы с различной промышленной нагрузкой	0,5-1,2 0,9-2,0 1,0-1,3 0,32-0,8	4,5-5,5 3,2-6,4 2,5-5,0 3,0-3,2
Синхронные двигатели	0	0,75; 2,7
Асинхронные двигатели	0	2,0; 3,2

Также стоит упомянуть исследовательскую работу, которая была проведена в 1993 г. в Кировском политехническом институте в рамках научно-исследовательской работы по исследованию возможностей создания оперативного резерва мощности в АО «КИРОВЭНЕРГО» [5] за счет регулирования напряжения в узлах электропотребления.

Были проведены расчеты на базе ПЭВМ «Искра 10.30» по разработанной программе расчета параметров установившихся режимов «RSET». Для решения данной задачи в программу были введены корректировки активных и реактивных мощностей электроприёмников в соответствии со статическими характеристиками.

В результате расчетов было определено, что при снижении напряжения на 5% и 10% наблюдалось снижение потребляемой активной мощности на 6,16% и 10,4% соответственно. При этом снижение напряжения приводило к повышению нагрузочных потерь. Например, при понижении напряжения на 10% потери увеличивались на 3,8-5,7%.

С целью выявления реального эффекта от регулирования напряжения были проведены экспериментальные исследования на ПС «Беляево» и «Шестаки» СЭС, которые питают преимущественно сельскохозяйственных потребителей. Фиксация измерений напряжения, активной мощности и тока проводилась через 0,5-1 минуту. Продолжительность 15-20 минут. При обработке результатов измерений определялись оценки математических ожиданий токов, напряжений, активных и полных мощностей.

Изменение напряжения на первой секции шин на 8,5-9,7% привело к уменьшению активной мощности на 13,6-15,9%. Повышение напряжения на 4,9-6,26% привело к увеличению активной мощности на 7,33-8,9% соответственно. Похожие значения были получены и для секции шин №2. На ПС «Шестаки» также наблюдалось уменьшение активной мощности.

Сопоставив расчетные и экспериментальные данные, были сделаны выводы, что снижение напряжения на шинах вторичного напряжения ЦП дает большее уменьшение активной мощности, чем предполагалось в расчетах.

Как известно, одним из способов учета РЭН по напряжению в расчетах является представление СХН по напряжению полиномом второй степени вида (2) и (3):

$$P(U) = P_{ном} \left[a_0 - a_1 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right) + a_2 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right)^2 \right], \quad (2)$$

$$Q(U) = Q_{ном} \left[b_0 - b_1 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right) + b_2 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right)^2 \right], \quad (3)$$

где $P_{ном}$ – номинальная активная мощность нагрузки, $P(U)$ – расчетная активная мощность нагрузки, $Q_{ном}$ – номинальная реактивная мощность нагрузки, $Q(U)$ – расчетная реактивная мощность нагрузки $U_{ном}$ – номинальное напряжение узла, U – расчетное напряжение в узле, $a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2$ – коэффициенты полиномов, отражающие состав комплексного узла нагрузки для активной и реактивной мощности соответственно. Именно в таком формате были представлены результаты экспериментов по определению СХН по напряжению 2013 г. на ПС 35/6 «Сибкабель» г. Томск [6,7]. Диапазон изменения напряжения составил 15%. Данные снимали с помощью цифрового анализатора

электропотребления, подключенного к вторичным цепям ТТ и ТН.

В течение эксперимента с помощью устройства РПН изменялось напряжение на второй секции шин 6 кВ. При этом продолжительность работы на каждой ступени составляла 2 мин. В результате активного эксперимента был получен массив данных, на основе которых определили СХН по напряжению для активной и реактивной мощности:

$$P(U) = P_{ном} \left[1,481 - 2,277 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right) + 1,796 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right)^2 \right], \quad (4)$$

$$Q(U) = Q_{ном} \left[52,048 - 108,651 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right) + 57,599 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right)^2 \right], \quad (5)$$

где $P_{ном}$ – номинальная активная мощность ПС 35/6 кВ «Сибкабель», $P(U)$ – расчетная активная мощность ПС 35/6 кВ «Сибкабель», $Q_{ном}$ – номинальная реактивная мощность ПС 35/6 кВ «Сибкабель», $Q(U)$ – расчетная реактивная мощность ПС 35/6 кВ «Сибкабель», $U_{ном}$ – номинальное напряжение ПС 35/6 кВ «Сибкабель», U – расчетное напряжение на ПС 35/6 кВ «Сибкабель».

При этом РЭН по напряжению для ПС 35/6 кВ «Сибкабель», рассчитанный по полиномам (4) и (5), будет следующим:

Таблица 2
РЭ для полиномов (4), (5).

U, %	P, %	Q, %
115	1,23766	3,274027
110	1,14946	2,22669
105	1,07024	1,467348
100	1	1
95	0,93874	0,812648
90	0,88646	0,91729
85	0,84316	1,309928

В настоящее время в практике планирования и управления электрическими режимами обобщенные характеристики нагрузки представляются в виде полиномов со следующими коэффициентами:

$$P(U) = P_{ном} \left[0,83 - 0,3 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right) + 0,47 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right)^2 \right], \quad (6)$$

$$Q(U) = Q_{ном} \left[3,7 - 7 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right) + 4,3 \left(\frac{U}{U_{ном}} \right)^2 \right]. \quad (7)$$

При этом регулирующий эффект для данных СХН по напряжению составит:

Таблица 3
РЭ для полиномов (6), (7)

U, %	P, %	Q, %
115	1,106575	1,33675
110	1,0687	1,203
105	1,033175	1,09075
100	1	1
95	0,969175	0,93075
90	0,9407	0,883
85	0,914575	0,85675

Исходя из вышеописанного видно, что РЭН по напряжению значителен и может оказывать существенное влияние на режимы работы энергосистем, ввиду чего должен учитываться при расчетах электрических режимов. Это, в свою очередь, позволяет не только повысить точность расчета режимов при решении задач планирования, но и открывает новые возможности по расширению арсенала оперативных мероприятий, направленных на предотвращение развития и ликвидации различных аварийных нарушений.

Одной из решаемых задач, путем использования регулирующего эффекта нагрузки по напряжению, является предотвращение развития и ликвидация недопустимого превышения МДП сечения.

Известно, что расчет МДП производится по шести критериям, одним из которых является критерий обеспечения допустимой токовой нагрузки линий электропередачи и электросетевого оборудования в нормальной (ремонтной) схеме и в послеаварийных режимах после нормативных возмущений. Данный критерий является определяющим для многих энергосистем. Следовательно, применение методов, направленных на токовую разгрузку сетевых элементов, позволит снизить текущее значение перетока активной мощности и уменьшить или полностью ликвидировать превышение МДП сечения.

Различными исследователями проводились работы по поиску методов снижения токовых перегрузок сетевых элементов. Данные работы можно разделить на два направления:

- Методы, использующие текущие возможности оборудования энергосистемы. К примерам можно отнести различного рода алгоритмы оптимизации, такие как, например, поиск оптимального деления сети с целью снижения перегрузок оборудования [8-12]. Серьезным недостатком данного направления является недостаточная универсальность некоторых предлагаемых решений.
- Методы, основанные на возможностях нового оборудования. Примером работ в данном направлении выступают исследования возможностей устройств FACTS (Flexible Alternative Current Transmission System) – так называемых «гибких линий», которые позволяют управлять перетоками мощности [13-16]. Одним из недостатков данного направления является необходимость ввода нового оборудования, что влечет за собой крупные расходы на перевооружение и модернизацию электроэнергетического оборудования.

Предлагаемое авторами мероприятие по снижению токовой загрузки сетевых элементов, которое приводит к снижению сальдо-перетока активной мощности, использует свойства элементов энергосистем, ввиду чего является достаточно универсальным.

Методы исследования

Суть предлагаемого оперативного мероприятия заключается в использовании регулирующего эффекта комплексных узлов нагрузки по напряжению, обусловленному их статическими характеристиками

В рамках исследований, опубликованных в [17], был проведен ряд расчетов для модели крупной энергосистемы, топология которой схожа с топологией реальной энергосистемы. В процессе расчетов определялось влияние уровней напряжений в энергосистеме на сальдо-переток сечения. В качестве управляющих воздействий было рассмотрено снижение напряжения на электростанциях, а также переключение отпаяк РПН на крупных системных подстанциях напряжением 220 и 500 кВ. В результате снижения напряжения в

энергосистеме было зарегистрировано снижение сальдо-перетока в сечении от 0,4% до 10,16% в зависимости от величины снижения напряжения, а также энергообъектов, на которых моделировалось снижение напряжения.

В [18] был рассмотрен вопрос влияния изменения напряжения в энергосистеме на значения максимально допустимого перетока активной мощности в сечении. В рамках расчетов производилось определение сальдо-перетока и максимально допустимого перетока активной мощности в сечении. В качестве управляющих воздействий использовались снижение напряжения на электростанциях, путем снижения заданного напряжения на шинах эквивалентного генератора, переключение отпаяк РПН на подстанции 220/110 кВ, а также различные комбинации данных управляющих воздействий.

В результате расчетов было зафиксировано снижение сальдо-перетока вплоть до 91,58% от номинального значения. Значение МДП изменялось в более широких пределах от 95,4% до 104,4% от номинального МДП.

Исходя из данных возникает вопрос о применимости снижения напряжения в генерирующих узлах с целью уменьшения сальдо-перетока активной мощности в сечении, ведь согласно стандарту организации АО «СО ЕЭС» [1] «...следует учитывать, что при снижении напряжения в узлах энергосистемы происходит снижение предела передаваемой мощности в контролируемых сечениях и увеличение токовой загрузки электротехнического оборудования...». А не возникнет ли ситуации, когда снижение МДП превысит снижение сальдо-перетока активной мощности в сечении?

Для ответа на данный вопрос необходимо определиться с интервалами снижения напряжения.

В соответствии со стандартами организации АО «СО ЕЭС» [1,19] известно, что в случае нормативного возмущения при отсутствии дополнительных нарушений параметров режима энергосистемы в исходном режиме нарушения МДП происходить не будет. Следовательно, при установлении напряжения в контрольных пунктах в интервале значений от нижнего предупредительного предела до верхнего предупредительного предела изменение значения МДП можно не учитывать. Это обусловлено тем, что значения МДП,

используемые в практике планирования и ведения режима энергосистемы, фиксированы и привязаны к каждой конкретной схеме энергосистемы, ввиду несовершенства методов расчета и технической базы, которая не позволяет проводить расчет МДП в режиме реального времени для каждого конкретного режима. Обычно в качестве исходного режима выбирается зимний и летний замерные дни. Сейчас в «СО ЕЭС» ведутся работы по внедрению новой системы мониторинга запасов устойчивости (ПК СМЗУ), одной из функций которой является расчет МДП в режиме реального времени. Однако ввод данного программного комплекса является сложной задачей, в решении которой задействовано множество ресурсов, ввиду чего дата запуска системы в промышленную эксплуатацию на данный момент неизвестна.

Таким образом, получается, что за счет снижения напряжения в дефицитной части энергосистемы можно добиться ввода сальдо-перетока в область допустимых значений и ликвидировать превышение МДП, не прибегая к отключению потребителей.

Границей снижения напряжения, как указывалось выше, будет выступать значение **нижнего предупредительного предела**, при котором в соответствии со стандартами организации будет обеспечиваться нормальная работа энергосистемы в послеаварийном режиме при нормативном возмущении.

В качестве управляющего воздействия предлагается использовать регулирование напряжения на шинах станций за счет изменения тока возбуждения генераторов. Данное мероприятие отличается быстродействием и может быть применено на большинстве генерирующих объектов энергетики.

Для анализа положительного эффекта от данного мероприятия авторами была синтезирована методика снижения сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении путем использования регулирующего эффекта нагрузки по напряжению со следующим алгоритмом действий:

1. На модели энергосистемы произвести расчет электрического режима с контролем отсутствия нарушения заданных ограничений.

2. Определить текущее значение сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении рассматриваемой энергосистемы.

3. Определить уровни напряжений в генерирующих узлах, при которых будет обеспечиваться снижение сальдо-перетока активной мощности в контролируемом сечении. Определение уровней напряжений в генерирующих узлах производится методом пошагового снижения напряжения с контролем выполнения заданных ограничений.

4. Выставить полученные значения напряжений в узлах-генераторах и произвести контрольный расчет электрического режима и сальдо-перетока активной мощности.

5. Определить достигнутый объем снижения сальдо-перетока активной мощности.

Результаты

Для определения степени влияния снижения напряжения в ПВК RastrWin 3.0 проведена серия расчетов на модели, топология которой аналогична топологии исследуемой Самарской энергосистемы.

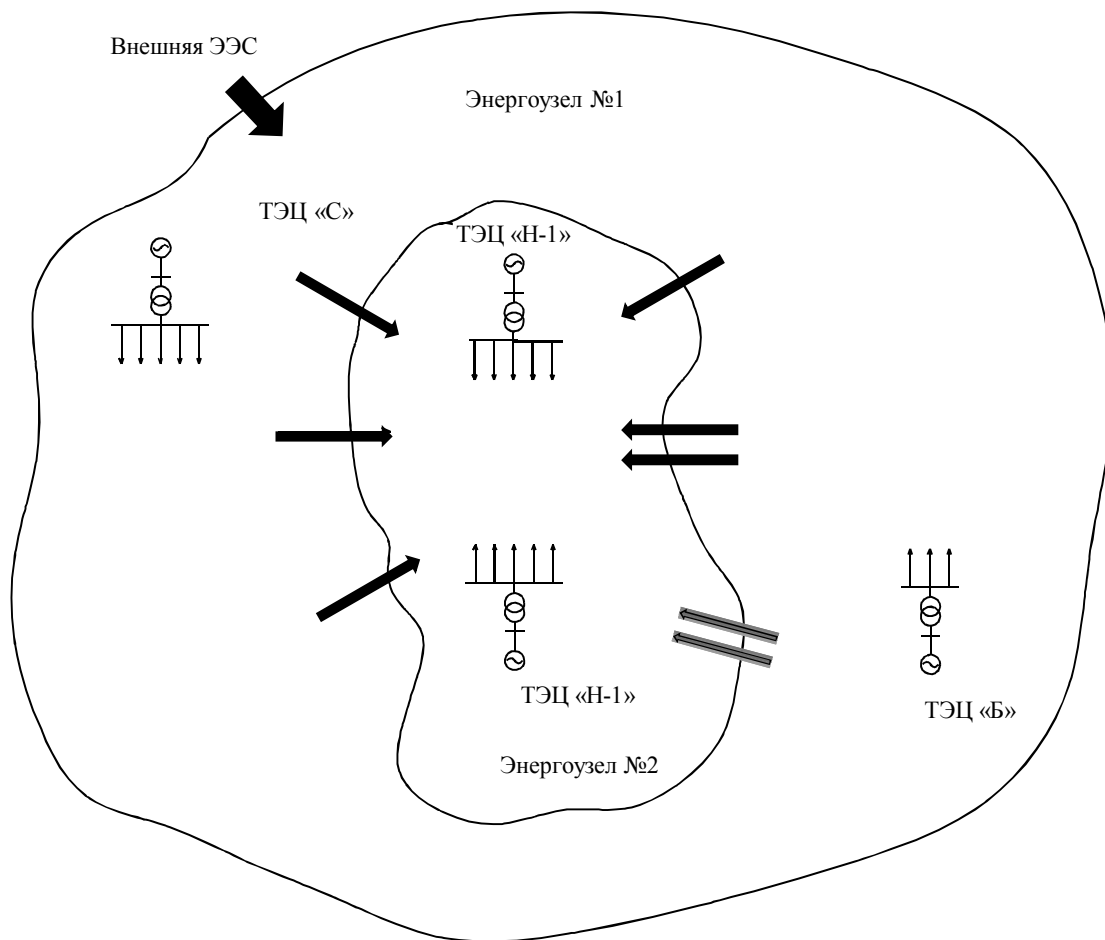
Модель представлена двумя энергорайонами и внешней ЭЭС. В состав энергорайонов входят электрические сети номинальным напряжением 220 и 110 кВ, две подстанции 500 кВ, восемь трансформаторных подстанций 220/110 кВ, шесть подстанций 110/6 кВ, а также четыре электростанции «Н-1», «Н-2», находящиеся на балансе первого энергорайона, и «С», «Б», находящиеся на балансе второго энергорайона. Также в состав модели входит подстанция 500/220 кВ, причем шины 500 кВ являются балансирующим узлом данной модели, а связь с шинами 220 кВ осуществляется с помощью трансформаторной ветви $K_{тр}=2$, которая моделирует связь с внешней ЭЭС. Связь между первым и вторым энергорайоном осуществляется с помощью шести линий 220 кВ и двух линий 110 кВ, которые образуют в своем составе сечение.

Для данной модели произведены расчеты значений сальдо-перетока активной мощности и МДП по критерию обеспечения допустимой токовой нагрузки линий электропередачи и электросетевого оборудования в нормальной (ремонтной) схеме и в послеаварийных режимах после нормативных возмущений, который, как указывалось выше, является определяющим при расчете МДП для большинства энергосистем. Расчет производился для разных исходных условий по уровням напряжения на электростанциях без учета нерегулярных колебаний активной

мощности и объемов нагрузки, подключенной к противоаварийной автоматике. Снижение напряжения достигалось путем изменения уставок по напряжению на шинах генераторного напряжения электростанций и составляло -5% и -10% от номинального значения для пар станций «Н-1», «Н-2» и «С», «Б».

Алгоритм расчета МДП в соответствии со стандартом организации АО «СО ЕЭС» СТО 59012820.27.010.001-2013 будет следующий:

1. Задать рассматриваемое контролируемое сечение, расчетную траекторию утяжеления, контролируемые ветви.
2. Выполнить моделирование послеаварийного режима после рассматриваемого нормативного возмущения.



Принципиальная схема рассматриваемой энергосистемы

3. Провести пошаговое утяжеление режима с контролем корректности параметров режима вплоть до получения сбалансированного режима с токовой нагрузкой любого из контролируемых элементов равной допустимой токовой нагрузке в послеаварийном режиме.

4. Выполнить восстановление схемы путем включения элементов, отключенных в результате рассматриваемого нормативного возмущения.

5. Зафиксировать значение сальдо-перетока сечения.

6. Определить допустимый переток в сечении по формуле (8)

$$P_{\text{доп6}} = P_{\text{д/ав}}(I_{\text{н/ав}}^{\text{доп}}) - \Delta P_{\text{но}} + \Delta P_{\text{ПА}}, \quad (8)$$

где $P_{\text{доп6}}$ - допустимый переток активной мощности по критерию обеспечения допустимой токовой нагрузки линий электропередачи и электросетевого оборудования в послеаварийных режимах после нормативных возмущений (МВт); $P_{\text{д/ав}}$ -

переток активной мощности в контролируемом сечении в доаварийном режиме (МВт); $I_{n/ae}^{don}$ - допустимая токовая нагрузка линий электропередачи и электросетевого оборудования в послеаварийном режиме (А); $P_{0/ae}(I_{n/ae}^{don})$ - полученный в п. 5 переток активной мощности в контролируемом сечении в доаварийном режиме, соответствующий допустимой токовой нагрузке линий электропередачи и электросетевого оборудования в послеаварийных режимах после нормативных возмущений (МВт).

7. Повторить пункты 1-6 алгоритма для всех нормативных возмущений.

8. Выбрать наименьшее значение P_{006} , которое будет являться МДП для рассматриваемой схемы. В процессе расчета осуществлялся контроль уровней напряжений в контрольных пунктах. Выбранные коэффициенты полиномов соответствовали (5), (6).

В результате расчета получены значения МДП и сальдо-перетока в сечении (табл. 4).

Таблица 4

Результаты расчетов

	Сальдо	Δ	МДП	Δ
Исходный режим	197,56	0	315,816	0
5%: «Н-1», «Н-2»	189,928	7,632	297,75	-18,06
5%: «Н-1», «Н-2»; 5%: «Б», «С»	188,32	9,24	306,22	-9,59
10%: «Н-1», «Н-2»	185,464	12,096	258,349	-57,46
10%: «Н-1», «Н-2»; 5%: «Б», «С»	181,9	15,66	284,943	-30,87
10%: «Н-1», «Н-2»; 10%: «Б», «С»	180,26	17,3	283,143	-32,67

Исходя из данных, представленных в таблице 4, видно, что снижение напряжения на станциях «Н-1» и «Н-2» оказывает большее влияние, нежели снижение напряжения на станциях «Б» и «С». В рассматриваемых исходных режимах выполняется условие $U < U_{нпп}$, из чего следует, что снижение МДП учитывать не обязательно.

Выводы

Таким образом, проанализирована возможность использования снижения напряжения в дефицитной части энергосистемы для ввода сальдо-перетока сечения в область допустимых значений. Теоретические выводы доказаны результатами моделирования в сертифицированном

программном комплексе RastrWin 3.0, проведенными по известным общепринятым методикам расчета. В результате снижения напряжения в дефицитной части энергосистемы путем изменения уставок по напряжению на шинах генераторного напряжения электростанций было достигнуто снижение сальдо-перетока в сечении вплоть до 92,6% от его первоначального значения, что соответствует 17,3 МВт для рассматриваемого режима.

Литература

- СТО 59012820.29.240.007-2008. Правила предотвращения развития и ликвидации нарушений нормального режима электрической части энергосистем. – Введ. 2008-24-09. – М.: Стандарт ОАО «СО ЕЭС», 2008. – 49 с.
- РД 34.20.577. Методические указания по определению устойчивости энергосистем ч. 1 / МЭЭ СССР ГТУЭЭ. 1977. – 64 с.
- Методические указания по устойчивости энергосистем / НЦ ЭНАС, М.: 2004
- Экспериментальные исследования режимов энергосистем / Л.М. Горбунова, М.Г. Портной, Р.С. Рабинович и др. М.: Энергоатомиздат, 1985. – 448 с.
- Исследование возможностей создания оперативного резерва мощности в АО «Кировэнерго» за счет регулирования напряжения в узлах электропотребления. Отчет о научно-исследовательской работе / В.А. Каленик, Г.А. Черепанова и др. – Киров: Кировский политехнический институт, 1993. – 25 с.
- Методика идентификации статических характеристик нагрузки по результатам активного эксперимента / В.И. Полищук и др. // Известия Томского политехнического университета. Техника и технологии в энергетике. – 2014. – № 4. – С. 165-175.
- Определение коэффициентов полиномов статических характеристик нагрузки по напряжению на основе экспериментальных данных / А.В. Паздерин и др. // Электроэнергетика глазами молодежи: сб. докл. участников V междунар. конф. – 2014. Т. 1. С. 36-40
- Хозяинов М.А. О задаче устранения перегрузок в электрической системе изменением конфигурации сети / М.А. Хозяинов // Электричество. – 1993. – №2. – С. 9-18
- Пономаренко И.С. Автоматизированный анализ послеаварийных режимов электроэнергетических систем / И.С. Пономаренко // Электричество. – 1994. – №8. – С. 1-4
- Пономаренко И.С. Анализ послеаварийных режимов и управление ими в распределительных электрических сетях / И.С. Пономаренко, А.Ю. Скорняков // Электричество. – 2006. – №1. – С. 27-32
- Mazi A.A. Corrective control of power system flows by line and bus-bar switching / A.A. Mazi, B.F. Wollenberg, M.H. Hesses // IEEE Trans on Power Systems. – 1986. – Vol. 1. – №3.
- Glavitch H. Switching as means of control in the Power Systems/ H. Glavitch // Electric Power and Energy Systems. 1985. Vol. 7. №2
- Koglin H.J. Corrective switching: a new dimension in optimal load flow/ H.J. Koglin, H. Muller // Electric Power and Energy Systems. – 1982. – Vol. 4. – №2
- Bakirtzis A.J. Incorporation of switching operations on Power System corrective control computations.

/ A.J. Bakirtzis, A.P. Sakis Meliopoulos // IEEE Trans. on Power Systems. –1987. –Vol. 2. –№3

15. Фролов О.В. Применение фазорегулирующих устройств в ОЭС Северо-запада/ О.В. Фролов // Фундаментальные исследования в технических университетах: материалы XI Всерос. конф. по проблемам науки и высшей школы. –СПб.: ГПУ, –2007. – С. 463-464.

16. Кузнецов М.И. Экспериментальное исследование управления потоком реактивной мощности в электрической системе с трехобмоточным трансформатором / М.И. Кузнецов, А.В. Ромодин, А.М. Костыгов // Электротехника. – 2011. –№11. –С. 46-50

17. Петров В.В. Использование статических характеристик крупных узлов нагрузки при ликвидации аварийных режимов энергосистем / В.В. Петров, А.А. Альмендеев, В.И. Котенев // Оперативное управление в электроэнергетике. – 2016. –№2. –С. 42-46.

18. Петров В.В. Влияние уровней напряжения в контрольных пунктах энергосистемы на значения максимально допустимого перетока мощности в сечении / В.В. Петров, А.А. Альмендеев // Электроэнергетика глазами молодежи: сб. науч. тр. VI междунар. молодежной науч.-техн. Конф. –Казань, –2016. Т.2. С. 351-352

19. СТО 59012820.27.010.001-2013 Правила определения максимально допустимых и аварийно допустимых перетоков активной мощности в контролируемых сечениях диспетчерского центра ОАО «СО ЕЭС». Введ. 2013–18–01 М. : Стандарт организации ОАО «СО ЕЭС»–2013. –С. 35

Самарский государственный технический университет

Филиал АО «СО ЕЭС» «Региональное диспетчерское управление энергосистем Самарской и Ульяновской областей» (Самарское РДУ)

ANALYSING THE VOLTAGE LEVELS INFLUENCE ON THE POWER STATION AFFECTING MAXIMUM ALLOWABLE BALANCE OF THE FLOW OF ACTIVE POWER IN THE CROSS-SECTION

V.V. Petrov¹, A.A. Al'mendeiev², V.I. Polishchuk³

¹Graduate student, Samara State Technical University, Samara, Russian Federation

ph. 8(960)816-20-99, e-mail: PetroV.V.163@yandex.ru

²PhD, Dispatcher the branch of JSC «SO UPS» - «Samara RDO», Samara, Russian Federation

ph. 8(927)204-22-74, e-mail: al'mendeievaa@rambler.ru

³Full Doctor, Associate Professor, Head of the department of power supply of industrial enterprises, Samara State Technical University, Samara, Russian Federation

ph. 8(987)943-01-05, e-mail: Polishchuk_vi@mail.ru

The development of the electricity growth generating and consuming facilities, the growing complexity of electric networks multiples and increases the complexity of the control modes for the power system as a whole. Improving the efficiency of the power management modes of large power systems is the most important problem facing the dispatching services of the 'System operator' and FGC UES of the Russian Federation. Currently, after having been used quite proactively, methods of operational management regimes demonstrate certain difficulties in exceeding the maximum flow of active power in a controlled cross-section, which may cause disconnection of customers, as means for emergency control, and as a result of operational activities. Presently, there is a critical demand for the expansion of the 'Arsenal of management tools for the weighted modes', which would be able to reduce or eliminate such power limitations.

In the framework of the research conducted on the managing of weighted modes of power systems authors used the specifically developed technique aiming at reducing the balance of the flow of active power in a controlled cross-section of large power systems via using the regulating effect of the load voltage.

As a result of adjusting the electric modes based on the developed technique, we are able to suggest that as the usage of the regulating effect of the load voltage was reduced, the balance of active power flow of 7.4% was achieved in the controlled section with the original value.

The use of the developed technique allows to expand the above mentioned arsenal of operational control used in solving the problem of preventing development and elimination of invalid balance of exceeding-the flow of active power in a controlled cross-section of the power system. The reliability of the obtained results is confirmed by the identity of the synthesized models – models used by the staff of the System Operator, as well as by the strict adherence to the accepted methods of calculating of electric modes

Key words: power system, static load characteristics, voltage, maximum permissible flow

References

1. Patented Study no. STO 59012820.29.240.007-2008. "Regulations for the prevention and elimination of violations of the normal electrical power systems", ("Pravila predotvrashheniya razvitiya i likvidatsii narusheniy normal'nogo rezhima jelektricheskoy chasti jenergosistem), Moscow, *Standart*, 2008, p. 38.
2. Patented Study no. RD 34.20.577. "Methodoligical instructions for defining the stability of power systems, Part 1" ("Metodicheskie ukazaniya po opredeleniyu ustojchivosti jenergosistem, Chast I"), Moscow. 1977, p. 64.
3. Monographic Study "Methodoligical instructions for defining the stability of power systems" ("Metodicheskie ukazaniya po opredeleniyu ustojchivosti jenergosistem"), Moscow, 2004.
4. Sovalov. S. A., Gorbunova L. M., Portnoj M. G., Rabinovich R. S "Experimental studies of the power systems modes", "Eksperimental'nyye issledovaniya rezhimov energeticheskikh system", Moscow, *Jenergoatomizdat*, 1985, p. 448.
5. Vasjura Ju. F. Kalenik V. A., Cherepanova G. A. "Studying the possibilities of establishing an operational reserve capacities of JSC Kirovenergo by regulating the voltage at the energy nodes consumption points", *Study report, Kirov Polytechnic Institute, (Otchiot ob issledovanii, Kirovski Politehnicheskii Institut)*, Kirov, 1993, p. 25.
6. Hrushhev Yu., V., Polishhuk V. I. "Methodology of identification of static load characteristics according to the results of experiment", *Izvestiya of Tomsk politehcnical university (Izvestiya Tomskogo Politehnicheskogo Universiteta)*, 2014, no. 4, pp. 165-175.
7. Malozemova O. Yu., Pazderin A. V. "The coefficient of the polynomial static characteristics of the load voltage on the basis of experimental data", *Working papers of the international scientific youth symposium (Materialy mezhdunarodnogo nauchnogo molodizhnogo simpoziuma)*, Kazan, 2014, vol. 1, pp. 36-40.
8. Hozjainov M. A. "On the problem of eliminating overloads in the electrical system change the network configuration", *Elektrichestvo*, 1993, no. 2, pp. 9-18.
9. Ponomarenko I. S., Ussama Dakak "Automated analysis of post-accident modes of electric power systems", *Elektrichestvo*, 1994, no. 8, pp. 1-4.
10. Ponomarenko I. S., Skornjakov A. Ju. "Analysis of post-accident conditions and their management in electrical distribution networks", *Elektrichestvo*, 2006, no. 1, pp. 27-32.
11. Mazi A. A., Hesss M. H., Wollenberg B. F. "Corrective control of power system flows by line and bus-bar switching", *IEEE Trans on Power Systems*, 1986, vol. 1, p. 3.
12. Glavitch H. "Switching as means of control in the Power Systems", *Electric Power and Energy Systems*, 1985, vol. 7, p. 2.
13. Koglin H. J., Muller H., "Corrective switching; a new dimension in optimal load flow", *Electric Power and Energy Systems*, 1982, vol. 4, p. 2.
14. Bakirtzis A. J., Sakis Meliopoulos A. P. "Incorporation of switching operations on Power System corrective control computations", *IEEE Trans. on Power Systems*, 1987, vol. 2, p. 3.
15. Frolov O.V. "Application of phase shifting devices in the IPS of North-West region" ("Primenenie fazoregulirujushhih ustrojstv v OJeS Severo-zapada"), Saint-Petersburg, 2007, pp. 463-464.
16. Kuznecov M. I., Romodin A. V., Kostygov A. M. "Experimental investigation of flow control of reactive power in electrical system with three-winding transformer, *Elktrotehnika*, 2011, no. 11, pp. 46-50.
17. Petrov. V. V., Al'mendevev A.A., Kotenev V.I. "Using voltage static characteristic of large load node in liquidation emergency mode of electric energy systems", *Operational management in the power industry*, 2016, no. 5, pp. 42-46.
18. Petrov. V. V., Al'mendevev A. A "The influence of voltage levels on the measure points of the power system on the maximum allowable power flow in cross section", *Collection of scientific works of the VI international youth scientific and technical conference: "Electrical power engineering through the eyes of youth", (Sbornik nauchnykh trudov VI Mezhdunarodnoy molodezhnoy nauchno-tehnicheskoy konferentsii: «Elektroenergetika glazami molodezhi»)*, Kazan', 2016, v. 2, pp. 351-352.
19. Patented Study no. STO 59012820.27.010.001-2013 "The rules for determining the maximum permissible and emergency permissible overflows of active power in controlled sections of the control center", ("Pravila opredeleniya maksimal'no dopustimyh i avarijno dopustimyh peretokov aktivnoj moshhnosti v kontroliruemyh sechenijah dispetcherskogo centra OAO «SO EJeS»"), Moscow, 2013, p. 35.

АНАЛИЗ СОСТОЯНИЯ ЭРГОДИЧЕСКОГО ЭЛЕМЕНТА В СИСТЕМАХ УПРАВЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛЬНО ОПАСНЫМИ ПРОИЗВОДСТВАМИ

Ю.В. Клепач, С.А. Ткалич, В.Л. Бурковский

В статье анализируется состояние эргодического элемента в системах безаварийного управления сложными техническими системами. Рассматриваются детерминирующие психологические аспекты деятельности персонала, управляющего потенциально опасными технологическими процессами. Ставится акцент на такие факторы, как человеческий фактор, эмоциональность, мотивация, психологическая восприимчивость средств прогнозирования аварийных ситуаций. Отмечаются причины эмоциональной напряженности и, в частности, избыточная мотивация, порождающая синдром профессионального выгорания. Предлагается способ снижения рабочих факторов стресса за счет рациональной организации труда путем создания автоматизированных средств прогнозирования нештатных ситуаций, способных предугадывать действия оператора и минимизировать риск возникновения состояния паники. Исключение возможности влияния на ход процесса ошибок персонала дает минимизацию воздействия человеческого фактора на вероятность возникновения аварии. Произведена технико-экономическая оценка снижения технического риска для системы прогнозирования за счет минимизации влияния человеческого фактора. Приведен пример расчета ожидаемого экономического эффекта от внедрения системы прогнозирования аварийных ситуаций в химической, фармацевтической и атомной промышленности. Рассмотрены особенности психологической восприимчивости средств прогнозирования с учетом отраслевой направленности подготовки специалистов. Выделена приоритетная задача системы прогнозирования: формирование у персонала психологического протеста эксплуатации аварийных систем. Сформулированы детерминанты положительного психологического восприятия человеком ресурсов системы прогнозирования аварийных ситуаций: доверие ресурсам, удобный интерфейс, простота отображения процессов, органичное звуковое и световое сопровождение, ограничение доступа некомпетентных лиц

Ключевые слова: человеческий фактор, эмоциональность, мотивация, психологическая восприимчивость, аварийная ситуация, система прогнозирования

Введение

Современный уровень развития промышленности характеризуется стремительным расширением опасных производств. Растет число промышленных процессов, отличающихся повышенным уровнем сложности используемых технологий и жесткими требованиями к их применению, а также насыщенностью различными видами производственного оборудования, эксплуатация которого требует жесткого соответствия нормам и правилам. Случайные отклонения от этих норм, вызывающие изменение хода технологического процесса, повышают риск аварийной ситуации.

Вероятность возникновения аварии зависит от ряда факторов: особенностей технологического процесса, степени подготовленности персонала, общего времени функционирования определенного технологического объекта, интенсивности технологических операций, человеческого

фактора (например, ошибки эксплуатационного персонала).

1. Роль человеческого фактора, эмоциональности и мотивации в безопасности производственных процессов

Термин *человеческий фактор* часто используется при объяснении причин аварийной ситуации, возникшей по вине человека. Это многозначный термин, порождаемый в том числе и *эмоциональной напряженностью*, описывающий возможность принятия человеком ошибочных или алогичных решений в конкретных нормальных или критических ситуациях [1, 2].

Эмоциональная напряженность субъектов трудовой деятельности является важнейшим фактором, определяющим результат труда. Эмоциональное напряжение в физиологии рассматривается как состояние чрезмерной мобилизации физиологических функций организма (и первую очередь, нервной системы), возникающее в условиях решения трудной задачи или в опасной ситуации. Эмоциональное напряжение характеризуется активизацией различных функций организма в связи с активными волевыми актами. Эмоциональная напряженность приводит к временному снижению устойчивости психических процессов и работоспособности.

Клепач Юлия Владимировна - ВГПУ, канд. психол. наук, доцент, тел. 8 (473) 253-32-67, e-mail: y-klepach@mail.ru
Ткалич Сергей Андреевич - ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, тел. 8(473) 243-77-20, e-mail: sergeytkalich@mail.ru
Бурковский Виктор Леонидович - ВГТУ, д-р техн. наук, профессор, тел. 8(473) 243-77-20, e-mail: Bvl@vorstu.ru

В условиях эмоционально окрашенных ситуаций также различают:

1) эмоциональное возбуждение — сигнальную реакцию нервной системы на различные психогенные воздействия;

2) эмоциональное напряжение — эмоционально окрашенное волевое усилие, направленное на решение какой-либо мыслительной или двигательной задачи;

3) эмоциональную напряженность — временное понижение устойчивости психических и психомоторных процессов и падение работоспособности, вызванные негативными, иногда чрезмерными психогенными воздействиями.

Причинами эмоциональной напряженности становятся избыточная мотивация, излишне нагнетаемое чувство ответственности за порученное дело, выраженное ощущение серьезной опасности, высокой тревожности и др. Развитию этого негативного психического состояния способствуют низкая эмоционально-волевая устойчивость, выраженная личностная тревожность, неуверенность в своих силах.

Предпосылками эмоциональной напряженности является воздействие различных экстремальных факторов, в частности, наличие высоких рабочих требований, низкого рабочего контроля, низкой психологической поддержки рабочих, неблагоприятного социально-психологического климата в коллективе [3]. С другой стороны, эмоциональная напряженность неразрывно связана с личностными характеристиками субъекта труда: мотивацией трудовой деятельности, спецификой самоотношения, уровнем личностной тревожности, темпераментом и т.п.

Но все же главными факторами, вызывающими эмоциональную напряженность, остаются излишние *эмоциональность и мотивированность*. Р. Йеркс и Д. Додсон еще в 1908 г. установили, что для осуществления деятельности, необходима достаточная мотивация. Однако если мотивация слишком сильна, увеличивается уровень активности и напряжения, вследствие чего в деятельности и в поведении наступают определенные разлады, то есть эффективность работы ухудшается. В таком случае высокий уровень мотивации вызывает нежелательные эмоциональные реакции (напряжение, волнение, стресс и т. п.),

что приводит к ухудшению деятельности. Например: уровень мотивации, который условно можно оценить в семь баллов, будет наиболее благоприятным. Последующее увеличение мотивации (до 10 и более) приведёт не к улучшению, а к ухудшению эффективности деятельности. Таким образом, очень высокий уровень мотивации не всегда является наилучшим.

В.И. Ковалев определяет мотивационную сферу личности как подструктуру, включающую актуальные мотивы и потребности, латентные мотивационные образования (направленность личности, мотивационные установки, интересы). Сама мотивационная потребностная сфера личности также является латентным образованием, в котором актуальные мотивы проявляются как ситуативные функциональные конструкты, сменяющие друг друга. С точки зрения А.В. Бердыган, ценностно - смысловая характеристика профессиональной мотивации является динамическим образованием. Когнитивная характеристика учебно-профессиональной мотивации отражается в системе категорий сознания представлений и целевых объектов, отражающих принадлежность к определенной профессии, а также стремление к достижению успеха в трудовой деятельности [4].

В хроническом повседневном напряжении, эмоциональном переутомлении, переживаемом из-за специфики работы, берет свое начало *синдром профессионального выгорания*. По К. Маслач, «выгорание» — синдром физического и эмоционального истощения, включая развитие отрицательной самооценки, отрицательного отношения к работе и утрату понимания и сочувствия по отношению к коллегам, клиентам и т.п. [5]. К. Кондо определяет синдром «эмоционального сгорания» как дезадаптированность к рабочему месту из-за чрезмерной рабочей нагрузки и неадекватных межличностных отношений.

Структура синдрома эмоционального выгорания, по В.В. Бойко, тоже представляет собой последовательность трёх фаз:

1. Напряжение включает симптомы — переживание психотравмирующих обстоятельств, неудовлетворённость собой, загнанность в клетку, тревогу и депрессию;

2. Резистенция включает симптомы — неадекватное избирательное эмоциональное реагирование, эмоционально-нравственную

дезориентацию, расширение сферы экономии эмоций, редукцию профессиональных обязанностей;

3. Истощение включает симптомы – эмоциональный дефицит, эмоциональную отстранённость, личностную отстранённость (деперсонализацию), психосоматические и психовегетативные нарушения.

Выделяют внешние проявления эмоциональной напряженности и проявления эмоциональной напряженности в деятельности. Последние, в свою очередь, делятся на эмоционально-сенсорные, эмоционально-моторные и эмоционально-ассоциативные нарушения.

Таким образом, перспективным направлением оптимизации труда в профессиях с выраженными эмоциональными нагрузками, наряду с созданием благоприятного психологического климата в коллективе и повышением у работников уровня трудовой мотивации, является обеспечение снижения рабочих факторов стресса за счет рациональной организации труда путем создания автоматизированных средств прогнозирования нештатных ситуаций, способных предугадывать действия оператора и минимизировать риск возникновения состояния паники.

Целью создания подобных систем является повышение степени безопасности производственных процессов посредством сведения к минимуму участия оператора в процессе диагностирования и оценки состояния технологического процесса. Это исключает возможность влияния на ход процесса ошибок персонала, что дает минимизацию воздействия человеческого фактора на вероятность возникновения аварии.

2. Техничко-экономическое обоснование создания системы идентификации и прогнозирования аварийных ситуаций (СИПАС)

Эффективность системы прогнозирования аварийных ситуаций рассмотрим с точки

зрения технико-экономической оценки снижения риска аварии.

Под риском будем понимать ожидаемую частоту или вероятность возникновения опасностей определенного класса, или же размер возможного ущерба (потерь, вреда) от нежелательного события, или же некоторую комбинацию этих величин [6].

Применение понятия риск, таким образом, позволяет переводить опасность в разряд измеряемых категорий. Риск, фактически, есть мера опасности. Часто используют понятие «степень риска» (Level of risk), по сути не отличающееся от понятия риск, но лишь подчеркивающее, что речь идет об измеряемой величине.

Все названные (или подобные) интерпретации термина «риск» используются в настоящее время при анализе опасностей и управлении безопасностью (риском) технологических процессов и производств в целом.

Формирование опасных и чрезвычайных ситуаций - результат определенной совокупности факторов риска, порождаемых соответствующими источниками.

Технический риск – комплексный показатель надежности элементов техносферы. Он выражает вероятность аварии или катастрофы при эксплуатации машин, механизмов, реализации технологических процессов, строительстве и эксплуатации зданий и сооружений:

$$R_T = \frac{N(t)}{T(f)}, \quad (1)$$

где R_T - технический риск;

$N(t)$ - число аварий в единицу времени t на идентичных технических системах и объектах;

T - число идентичных технических систем и объектов, подверженных общему фактору риска f .

Источники и факторы технического риска приведены в табл. 1:

Таблица 1

Источник технического риска	Наиболее распространенные факторы технического риска
Низкий уровень научно-исследовательских работ	1. Ошибочный выбор направления развития техники и технологии по критериям безопасности.
Низкий уровень опытно-конструкторских работ	2. Выбор потенциально опасных конструктивных схем и принципов действия технических систем. Ошибки в определении эксплуатационных нагрузок. Неправильный выбор конструкционных материалов. Недостаточный запас прочности. Отсутствие в проектах технических средств безопасности.

Опытное производство новой техники	3. Некачественная доводка конструкций, технологии, документации по критериям безопасности.
Серийный выпуск небезопасной техники	4. Отклонение от заданного химического состава конструктивных материалов. Недостаточная точность конструктивных размеров. Нарушение режимов термической и химико-термической обработки деталей. Нарушение регламентов сборки и монтажа конструкций машин.
Нарушение правил безопасной эксплуатации технических систем	5. Использование техники не по назначению. Нарушение паспортных (проектных) режимов эксплуатации. Несвоевременные профилактические осмотры и ремонты. Нарушение требований транспортирования и хранения
Ошибки персонала	6. Слабые навыки действия в сложной ситуации. Неумение оценивать информацию о состоянии процесса. Слабое знание сущности происходящего процесса. Отсутствие самообладания в условиях стресса. Недисциплинированность.

Произведем оценку снижения технического риска для системы прогнозирования за счет минимизации влияния человеческого фактора.

Технические системы становятся взаимосвязанными только благодаря наличию такого основного звена, как человек. Но по статистическим данным свыше 60% аварий происходит именно из-за ошибок персонала «рисковых» объектов.

Надежность работы человека определяется как вероятность успешного выполнения им работы или поставленной задачи на заданном этапе функционирования системы в течение заданного интервала времени при определенных требованиях к продолжительности выполнения работы.

Ошибка человека, т.е. невыполнение поставленной задачи (или выполнение запрещенного действия), может явиться причиной повреждения оборудования или имущества либо нарушения нормального хода технологического процесса.

В реальных условиях в большинстве систем независимо от степени их автоматизации требуется в той или иной мере участие человека.

Для СИПАС такие человеческие факторы технического риска, как неумение оценивать информацию о состоянии процесса, недостаточность знаний о его сущности и неспособность принятия решения в сложной ситуации исключаются, т.к. система самостоятельно формирует данные о ходе процесса и составляет прогноз, определяя степень приближения технологического процесса к предаварийной или аварийной ситуации.

Таким образом, для расчетной формулы (1) технического риска величина $N(t)$ (число аварий в единицу времени) уменьшается, т.к. предполагается, что на технических объектах

число аварий, обусловленных ошибками персонала, стремится к нулю. При том же числе рассматриваемых систем (объектов) уменьшение $N(t)$ свидетельствует об уменьшении величины R_T , т.е. о снижении

$$\text{риска: } R_T = \frac{N(t)_{\min}}{T(f)} \rightarrow \min.$$

Для определения оптимальных условий функционирования объекта по критериям «стоимость - безопасность - выгода» важную роль играет прогноз ущерба от возможной аварии с учетом ее вероятности (риска). Математическое ожидание потерь части материальных ценностей вследствие аварии можно определить по формуле

$$M(\Pi) = F * R * (C_{1\text{уд}} * P_Y + C_{2\text{уд}} * P_{II}), \quad (2)$$

где F - площадь зоны разрушения на объекте (или объём произведенной продукции при простое, если под аварией понимать останов технологического процесса);

R - вероятность анализируемой аварийной ситуации (величина риска), 1/год;

$C_{1\text{уд}}$ - удельная стоимость материальных ценностей на объекте (или стоимость оборудования);

$C_{2\text{уд}}$ - удельная стоимость ремонтных работ;

P_Y - доля уничтоженных материальных ценностей на объекте (или вышедшего из строя оборудования);

P_{II} - доля поврежденных материальных ценностей на объекте (или ремонтируемого оборудования).

Таким образом, для оценки последствий от аварии существует зависимость величины ожидаемого ущерба от риска ее наступления. Видно, что ущерб пропорционален степени риска, следовательно, снижение риска (т.е. уменьшение частоты случаев аварии) ведет к сокращению потерь материальных ценностей.

При условии, что рискованные ситуации на производстве обусловлены в основном человеческим фактором, система прогнозирования дает максимальное сокращение потерь, что несомненно обеспечивает её экономическую эффективность.

Рассмотрим на примере, как СИПАС может повлиять на снижение технического риска, обусловленного человеческим фактором.

Всего в мире на 2011 год насчитывалось 450 действующих ядерных реакторов различных типов. По данным МАГАТЭ, за период с 1971 по 1985 гг. в 14 странах мира на АЭС имели место более 150 аварий различной тяжести (около 10 аварий в год). По тем же данным, причины аварий классифицируют согласно следующему перечню табл. 2:

Таблица 2

Причины аварий	Доля аварий, %
Ошибка в проектах, дефекты	30,7
Износ оборудования, коррозионные процессы	25,5
Ошибки оператора	17,5
Ошибки эксплуатации	14,7
Прочие причины	11,6

СИПАС дает возможность освободить оператора от слежения за изменениями технологических координат процесса и принятия решений. С учетом этого рассчитаем изменение величины технического риска за такой же период на тех же объектах при условии внедрения в эксплуатацию разрабатываемой системы прогнозирования аварийных ситуаций.

Число рассматриваемых объектов $T(f)$ постоянно.

Доля аварий из-за ошибок оператора составляет 17,5% от 150 рассматриваемых аварий, т.е. $150 \cdot 0,175 = 27$ аварий. За исключением аварий по этой причине их число составит:

$150 - 27 = 123$ аварии за тот же период.

Оценим снижение риска, переведя частоту аварий в расчете на год:

$150/14 = 11$

$123/14 = 9$

$R_{T1} = \frac{11 \text{ аварий} / \text{год}}{T(f)}$ - величина риска до

внедрения СИПАС;

$R_{T2} = \frac{9 \text{ аварий} / \text{год}}{T(f)}$ - величина риска с внедрением СИПАС.

$E = \frac{R_{T1}}{R_{T2}} = \frac{11}{9} = 1,22$ - коэффициент,

характеризующий снижение риска аварии по причине ошибок оператора для рассмотренных объектов АЭС.

Соответственно, в такое же число раз уменьшатся и ожидаемые потери от аварии, размер которых пропорционален величине риска:

$$M2(P) = \frac{M1(P)}{1,22}. \quad (3)$$

Таким образом, экономический эффект от внедрения системы прогнозирования можно оценить как разность между ожидаемыми потерями до и после внедрения СИПАС:

$$\mathcal{E}_{\text{АЭС}} = M1 - M2 = M1 - \frac{M1}{1,22} = \quad (4)$$

$$= M1 \cdot \left(1 - \frac{1}{1,22}\right) = 0,2 \cdot M1$$

т.е. для данной сферы производства ожидаемый ущерб сократится на пятую часть.

Полный экономический эффект для данной СИПАС характеризуется максимальным экономическим эффектом, который может быть достигнут на основе внедрения СИПАС в различных сферах производства за определенный период эксплуатации [7]:

$$\mathcal{E} = \sum_{i=1}^T \sum_{j=1}^m \mathcal{E}_{Tij}, \quad (5)$$

где T – период эксплуатации,

m – количество сфер внедрения СИПАС,

$\mathcal{E}_{Tij}$ – ожидаемый экономический эффект t -го года в j – той сфере производства от внедрения СИПАС.

Предположим, что основными ожидаемыми сферами внедрения разрабатываемой системы прогнозирования являются химическая промышленность, фармацевтическая промышленность, атомная промышленность. Таким образом, $m = 3$.

Для удобства рассмотрения период эксплуатации примем равным 1 год.

Для оценки экономического эффекта в других сферах промышленности долю аварий по причине ошибок оператора примем равной

половине статистически определенного числа аварий из-за ошибок персонала (60%), т.е. равной 30 %.

Определим величину снижения риска аварии в этих сферах:

Число аварий после внедрения системы прогнозирования

$N2(t) = N1(t) - 0,3 * N1 = 0,7 * N1$, тогда показатель E будет равен:

$$E = \frac{R_{T1}}{R_{T2}} = \frac{N1}{0,7 * N1} = 1,43$$

Для ожидаемых потерь приведем расчет, аналогичный расчету для АЭС. Получим:

$$M2_{хим}(П) = \frac{M1_{хим}(П)}{1,43};$$

$$\mathcal{E}_{хим} = M1_{хим} - M2_{хим} = M1_{хим} - \frac{M1_{хим}}{1,43} =$$

$$= M1_{хим} * (1 - \frac{1}{1,43}) = 0,3 * M1_{хим}$$

$$M2_{фарм}(П) = \frac{M1_{фарм}(П)}{1,43};$$

$$\mathcal{E}_{фарм} = M1_{фарм} - M2_{фарм} = M1_{фарм} - \frac{M1_{фарм}}{1,22} =$$

$$= M1_{фарм} * (1 - \frac{1}{1,22}) = 0,3 * M1_{фарм}$$

Полный экономический эффект от внедрения СИПАС будет определяться суммой:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{АЭС} + \mathcal{E}_{хим} + \mathcal{E}_{фарм} = 0,2 * M1_{АЭС} + 0,3 * M1_{хим} + 0,3 * M1_{фарм}$$

где слагаемые представляют собой величину сокращения ущерба от возможной аварии, рассчитанную относительно ожидаемых потерь.

Таким образом, экономический эффект определяется суммарной экономией затрат, которая может быть получена путем внедрения систем прогнозирования нештатных ситуаций на потенциально опасных производствах.

3. Психологическая восприимчивость моделей СИПАС

Исследуя причинно-следственный комплекс возникновения аварийных ситуаций, О.В. Абрамов в работе [8] отмечает тот факт, что во многих случаях аварии возникают в связи с такими слабо формализуемыми субъективными чертами человеческого фактора, как жажда наживы (стремление любыми путями извлечь максимальную

прибыль) и некомпетентность владельцев технических средств и систем. Следствием этого становится эксплуатация технических средств, выработавших свой ресурс или не прошедших необходимого технического обслуживания. Примером могут служить авария на Саяно-Шушенской ГЭС, гибель теплохода «Булгария» и буровой платформы «Кольская».

В связи с этим появляется еще одна задача системы прогнозирования: формирование у персонала *психологического протеста* эксплуатации аварийных систем.

Также отметим отраслевую направленность подготовки специалистов. В процессе обучения человек находится в атмосфере научных знаний, свойственных именно для данного производства. Знание научной платформы СИПАС внушает специалисту *доверие*. И наоборот, незнание внушает *недоверие и страх*.

Например, при контроле качества и надежности продукции применяется физико-технический анализ на основе термодинамических моделей [9]. В работе [10] рассмотрены основания и возможности использования искусственных нейросетей в системах прогнозирования. В работе [11] рассмотрена лингвистическая система прогнозирования в производстве синтетических каучуков. Процесс вулканизации в шинном производстве предлагается прогнозировать как на основе модели нечеткого логического вывода [12], так и на основе нейросетевой модели [13]. Этот же процесс вулканизации взят в качестве примера в работе [14], где предложен термодинамический подход, позволяющий определять доминирующие параметры риска на основе теории чувствительности [15]. Предлагается также композиционный подход, объединяющий различные концепции и позволяющий составлять модели текущего и долгосрочного прогноза [16]. Каждое из предлагаемых решений имеет свою психологическую восприимчивость.

При разработке СИПАС важны дополнительные требования с точки зрения обеспечения комфортного психологического восприятия.

Желательным для положительного психологического восприятия человеком поддержки ресурсов СИПАС является:

- доверие ресурсам СИПАС;
- удобный интерфейс СИПАС;

- простота отображения процессов;
- органичное звуковое и световое сопровождение;
- ограничение доступа некомпетентных лиц.

Выводы

1. Внедрение системы идентификации и прогнозирования аварийных ситуаций снижает эмоциональную напряженность персонала и способствует повышению степени безопасности производственных процессов.

2. Внедрение системы идентификации и прогнозирования аварийных ситуаций экономически обосновано.

3. При создании системы идентификации и прогнозирования аварийных ситуаций необходимо обязательно учитывать ее психологическую восприимчивость обслуживающим персоналом.

Литература

1. Ткалич С.А. Модели принятия решений в системах управления потенциально-опасными производствами / С.А. Ткалич, В.П. Поваров, А.В. Бурковский // Вестник Воронежского государственного технического университета. - 2014. - Т. 10. - № 5.1. - С. 129-132.

2. Юрков Н.К. К проблеме обеспечения безопасности сложных систем/ Н.К. Юрков //Надежность и качество - 2011: тр. междунар. симпозиума. В 2 т. Пенза: Изд-во ПГУ, 2011. Т.1. С. 104-106.

3. Клепач Ю.В. Социально-психологический климат в группе студентов-психологов как фактор эффективной учебной деятельности/ Ю.В. Клепач, В.А. Кожанова // Современная психология образования: проблемы и перспективы: материалы Всерос. (с междунар. участием) науч.-практ. конф. Воронеж: Воронежский государственный педагогический университет; Российское психологическое общество; Департамент образования, науки и молодежной политики Воронежской области, 2016. С. 192-194.

4. Клепач Ю.В. Особенности конкурентоспособности и учебной мотивации студентов различных специальностей/ Ю.В. Клепач, О.О. Разуваева // Научное периодическое издание «IN SITU». Секция «Психологические науки». -2016. -№ 6. -С. 68-70.

5. Клепач Ю.В. Особенности эмоционального выгорания педагогов / Ю.В. Клепач, Л.Н. Гридьева, Е.Д. Сергеева // Известия Воронежского государственного

педагогического университета. - 2015. - № 1 (266). -С. 258-262.

6. Надежность технических систем и техногенный риск: метод. учеб. пособие/ В.А. Акимов, В.Л. Лапин, В.М. Попов, В.А. Пучков, В.И. Томаков, М.И. Фалеев. М., 2005. 500 с.

7. Берзинь И.Э. Экономика машиностроительного производства/ И.Э. Берзинь, В.П. Калинин. М.: Высш. шк., 1988. 304 с.

8. Абрамов О.В. К проблеме предотвращения аварий технических объектов ответственного назначения / О.В. Абрамов // Надежность и качество сложных систем. 2013. № 1. С. 11-16.

9. Ткалич С.А. Термодинамический подход к прогнозированию аварийных ситуаций/ С.А. Ткалич // Системы управления и информационные технологии. - 2008. -Т. 33. -№ 3.1. -С. 200-204.

10. Ткалич С.А. Основания и возможности использования искусственных нейросетей в системах прогнозирования/ С.А. Ткалич, Е.М. Васильев // Электротехнические комплексы и системы управления. - 2008. - № 2. - С. 37-38.

11. Ткалич С.А. Лингвистическая система прогнозирования аварийных ситуаций в производстве синтетических каучуков/ С.А. Ткалич // Вестник Воронежского государственного технического университета. -2009. -Т. 5. -№ 8. - С. 103-112.

12. Ткалич С.А. Проектирование системы идентификации и прогнозирования аварийных ситуаций процесса вулканизации на основе модели нечеткого логического вывода / С.А. Ткалич, С.А. Моисеев // Вестник Воронежского государственного технического университета. -2011. -Т. 7. - № 3. - С. 38-46.

13. Ткалич С.А. Исследование нейросетевой модели прогнозирования аварийных ситуаций процесса вулканизации/ С.А. Ткалич, А.В. Бурковский, Д.В. Котов // Вестник Воронежского государственного технического университета. -2010. -Т. 6. -№ 7. - С. 15-19.

14. Ткалич С.А. Исследование системы прогнозирования аварийных ситуаций на базе термодинамической модели/ С.А. Ткалич // Системы управления и информационные технологии. -2008. -Т. 33. -№ 3.3. -С. 399-403.

15. Ткалич С.А. Определение доминирующих параметров риска в системах прогнозирования аварийных ситуаций/ С.А. Ткалич // Вестник Воронежского государственного технического университета. -2010. -Т. 6. - № 1. -С. 81-84.

16. Ткалич С.А. Реализация композиционной модели прогнозирования аварийных ситуаций в промышленных системах безаварийного управления/ С.А. Ткалич, В.Л. Бурковский // Системы управления и информационные технологии. -2010. -Т. 40.- № 2. -С. 91-94.

Воронежский государственный педагогический университет
Воронежский государственный технический университет

THE ANALYSIS OF THE CURRENT STATUS OF THE ERGODIC ELEMENT IN CONTROL SYSTEMS OF THE POTENTIALLY-DANGEROUS PRODUCTIONS

Yu.V. Klepach¹, S.A. Tkachik², V.L. Burkovskiy³

¹PhD, Associate Professor, Voronezh State Pedagogical University, Voronezh, Russian Federation
ph. (473) 253-32-67, e-mail: y-klepach@mail.ru

² PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
ph. (473) 243-77-20, e-mail: sergeytkalich@mail.ru

³ PhD, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
ph. (473) 243-77-20, e-mail: Bvl@vorstu.ru

Paper analyzes the current state of the ergodic element in the systems of safety control of complex technical systems. The determinative psychological aspects of personnel performance managing potentially dangerous technological processes are reviewed. The emphasis is placed on such factors as human factor, emotional state, motivation, psychological susceptibility of the means designed for forecasting emergency situations. Special attention is paid to the initial reasons for emotional tension and, in particular, excessive motivation, which generates the syndrome of professional burnout.

New method for reducing the 'working stress factors' due to the rational labor organization is suggested by creating automated means for forecasting contingencies that can anticipate operator actions and minimize the risk of panic. Eliminating the possibility of influencing the course of the process by the personnel error minimizes the impact of the human factor on the probability of an accident. Both technical and economic assessment of the reduction of technical risk for the forecasting system was made by minimizing the influence of the human factor.

The article provides an example of calculation of expected economic effect of introducing the system for forecasting of emergency situations in the chemical, pharmaceutical and nuclear industry. Peculiarities of the psychological susceptibility of forecasting means taking into account the 'sectoral orientation' of the training provided to the specialists are reviewed. The priority task of the forecasting system is identified as forecasting possible psychological protest by the personnel of the operating at the emergency systems. The predominant principles for the positive psychological perception of a person's resources employed within the emergency prediction system are formulated: trust in resources, convenient interface, simplicity of process mapping, organic sound and light support, restricted access for the incompetent personnel

Key words: human factor, emotionality, motivation, psychological susceptibility, emergency situation, forecasting system

References

1. Tkalic S.A., Povarov V.P., Burkovskij A.V. "Decision making models in control systems of potential-dangerous productions", *Bulletin of the Voronezh State Technical University (Vestnik Voronezhskogo Gosudarstvennogo Technicheskogo Universiteta)*, 2014, vol. 10, no. 5-1, pp. 129-132.
2. Jurkov N.K. "On the problem of safety in a complex systems", *Penza State University Newsletter (Vestnik Penzenskogo Gosudarstvennogo Universiteta)*, 2011, vol. 1, pp. 104-106.
3. Klepach Ju.V., Kozhanova V.A. "Social and psychological climate in group of students psychologists as a factor of effective educational activity", *Voronezh region educational department materials (Materialy departamenta obrazovaniya voronezhskoi oblasti)*, 2016, pp. 192-194.
4. Klepach Ju.V., Razuvaeva O.O. "Features of competitiveness and educational motivation of students of various specialties", *IN SITU Psychological sciences section (IN SITU Sektsiya psichologicheskikh nauk)*, 2016, no. 6 pp. 68-70.
5. Klepach Ju.V., Gridjaeva L.N., Sergeeva E.D. "Features of emotional burning out of teachers", *Voronezh State Pedagogical Univesity News (Novosti Voronezhskogo Gosudarstvennogo Pedagogicheskogo Universiteta)*, 2015, no. 1 (266), pp. 258-262.
6. Akimov Ju.A., Lapin V.L., Popov V.M., Puchkov V.A., Tomakov V.I., Faleev M.I. "Reliability of technical systems and technogenic risk" ("Nadezhnost' tehnikeskikh sistem i tehnogennyj risk"), Moscow, 2005, p. 500.
7. Berzin' I.Je., Kalinin V.P. "Economy of machinery production" ("Jekonomika mashinostroitel'nogo proizvodstva"), Moscow, 1988, p. 304.
8. Abramov O.V. "On the problem of accident prevention at the technical objects of high responsibility", *Security and quality of the complex systems newsletter (Bezopasnost' i kachestvo kompleksnykh sistem)*, 2013, no. 1, pp. 11-16.
9. Tkalic S.A. "Thermodynamic approach to forecasting emergency situations", *Control Systems and Information Technology, (Sistemy kontrolya i informatyionnye tehnologii)*, 2008, vol. 33, no. 3.1, pp. 200-204.
10. Tkalic S.A., Vasiliev E.M. "Base and possibilities of using artificial neural networks in forecasting systems", *Electrotechnical complexes and control systems (Elektrotehnicheskie komplekxy i sistemy kontrolya)*, 2008, no. 2, pp. 37-38.
11. Tkalic S.A. "Linguistic system of prediction of contingency situations in production of synthetic rubbers", *Bulletin of Voronezh State Technological University*, 2009, vol. 5, no. 8, pp. 103-112.
12. Tkalic S.A., Moiseev S.A. "Designing a system for identification and prediction of emergency situations of the vulcanization process on the basis of the fuzzy inference model", *Bulletin of Voronezh State Technical University*, 2011, vol. 7, no. , pp. 38-46.
13. Tkalic S.A., Burkovskiy A.V., Kotov D.V. "Investigation of neural network model of forecasting of emergency situations of vulcanization process", *Bulletin of Voronezh State Technical University*, 2010, vol. 6, no. 7, pp. 15-19.
14. Tkalic S.A. "Research of system of prediction of contingency situations on the basis of thermodynamic model" ("Issledovanie sistemy prognozirovaniya avariynih situacij na baze termodinamicheskoy modeli"), *Control systems and informational technology*, 2008, vol. 33, no. 3.3, pp. 399-403.
15. Tkalic S.A. "Determination of the dominating risk parameters in systems of prediction of contingency situations", *Bulletin of Voronezh State Technical University*, 2010, vol. 6, no. 1, pp. 81-84.
16. Tkalic S.A., Burkovskij V.L. "Implementation of composition model of prediction of contingency situations in the production systems of accident-free management", *Control systems and informational technology (Sistemy kontrolya i informatyionnye tehnologii)*, 2010, vol. 40, no. 2, pp. 91-94.

**ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ УДАРНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ
НА ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАДИОЭЛЕКТРОННЫХ МОДУЛЕЙ
ТРЕТЬЕГО УРОВНЯ**

П.В. Иевлев

Проведены систематические исследования механических воздействий в виде знакопостоянных одиночных ударных импульсов различной формы на радиоэлектронные модули третьего уровня моделированием в программном комплексе CREO. Для этого была использована верифицированная модель малогабаритного радиоэлектронного шкафа, в котором предусмотрены направляющие различного типа для размещения разъемных и неразъемных вставных модулей более низкого иерархического уровня. Установлен характер зависимости интенсивности отклика конструкции от формы импульса, пикового ускорения, длительности импульса и скорости нарастания ударного ускорения. Показано определяющее влияние крутизны фронта ударного импульса на характер установленных зависимостей и на «жесткость» удара. Установлено, что «жесткость» удара в случае многомодальной системы радиоэлектронного модуля третьего уровня, в основном, определяется крутизной фронта, при этом крутизна среза вносит в процесс незначительные коррективы в тех случаях, когда длительность среза становится сравнимой с длительностью фронта.

Полученные результаты положены в основу создания базы данных для моделирования механических нагрузок на радиоэлектронные модули более низкого уровня (блоки, панели)

Ключевые слова: моделирование, ударные воздействия, радиоэлектронные модули

Введение

Радиоэлектронные устройства, применяемые в военной, авиационной, космической, автомобильной и морской технике, испытывают воздействия статических и динамических нагрузок при работе даже в штатных режимах. Кроме того, различные внешние воздействия могут возникать и в результате неправильной эксплуатации или транспортировки электронной техники. Однократные и многократные ударные воздействия на радиоэлектронные модули (РЭМ) третьего уровня могут быть вызваны неровностями дороги и стыками рельсов при транспортировке оборудования, порывами ветра в случае эксплуатации оборудования вне помещений, одиночными артиллерийскими выстрелами, взрывами, землетрясениями, а также падением в результате небрежного обращения с модулем [1-4].

Результаты исследований

Для моделирования ударных воздействий на РЭМ третьего уровня средствами CREO был сконструирован малогабаритный радиоэлектронный шкаф, в котором предусмотрены направляющие различного типа для размещения разъемных и неразъемных вставных модулей более низкого иерархического уровня.

При конструировании шкафа использованы три вида материалов: каркас и направляю-

щие изготовлены из алюминиевого сплава Д16 (ГОСТ 4784-97), верхняя и нижняя панели - из алюминиевого сплава АМг2, линейные опоры – из углеродистой качественной конструкционной стали марки 10 (ГОСТ 1050-88). Физические свойства материалов представлены в табл. 1.

Линейные размеры шкафа: высота – 211,6 мм, ширина – 365 мм, глубина – 271 мм, толщина верхней и нижней панелей – 2 мм; общая масса модуля - 4,6 кг. Для обеспечения дополнительной жесткости конструкции в качестве вертикальных рам использованы не открывающиеся боковые панели с вентиляционными отверстиями для обеспечения потоков воздушного охлаждения.

Нижняя/верхняя и задняя плоские панели являются быстросъемными, для их крепления используется болтовое соединение. Внутри шкафа расположены вертикальные и горизонтальные направляющие для размещения субмодулей второго уровня как в горизонтальном, так и в вертикальном положениях (рис. 1).

Перед проведением исследований реакции на ударные воздействия был проведен модальный анализ с заданными начальными условиями: опоры шкафа жестко закреплены. Полученные значения собственных частот приведены в табл. 2. Проведена верификация модели радиоэлектронного шкафа путем сопоставления модельных результатов модального анализа и результатов натурного эксперимента по выявлению собственных частот [5].

Таблица 1

Физические характеристики материалов, из которых изготовлен РЭМ 3 уровня

Физические характеристики	Алюминиевый сплав Д16	Алюминиевый сплав АМг2	Сталь конструкционная марки 10
Плотность, кг/м ³	$2,77 \cdot 10^3$	$2,69 \cdot 10^3$	$7,82 \cdot 10^3$
Предел текучести, МПа	294	205,8	205
Предел прочности, МПа	370	250	340
Модуль Юнга, ГПа	72	71	200
Коэффициент Пуассона	0,32	0,32	0,3
Коэффициент линейного расширения, 1/град	$2,29 \cdot 10^{-5}$	$2,42 \cdot 10^{-5}$	$1,16 \cdot 10^{-5}$

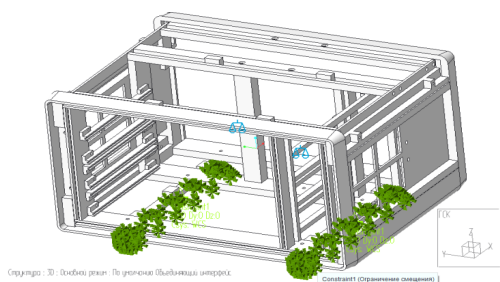


Рис. 1. Трехмерная модель сборочной конструкции РЭМ третьего уровня без верхней панели с измерителями и закрепленным основанием, созданная в CAD-комплексе CREO

Таблица 2

Собственные частоты РЭМ 3 уровня

f_1 , Гц	f_2 , Гц	f_3 , Гц	f_4 , Гц	f_5 , Гц	f_6 , Гц	f_7 , Гц	f_8 , Гц
152	221	232	260	274	310	336	349

На рис. 2 представлена схема моделирования ударного воздействия на конструкцию РЭМ третьего уровня с вязкоупругими связями.

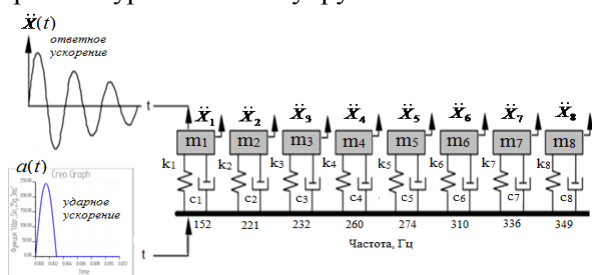


Рис. 2. Схема моделирования ударного воздействия на РЭМ третьего уровня

По результатам численного эксперимента при модальном анализе определены наиболее оптимальные места установки измерительных датчиков и их направления, там же были размещены измерители и при анализе ударных воздействий. Исследования проводили для слу-

чаев, когда ударное воздействие в вертикальном направлении осуществляется посредством возмущения основания конструкции. Измеряли максимальное напряжение в модели σ и максимальное ускорение $\ddot{x}$ горизонтальных направляющих относительно закрепленного основания, поскольку именно их динамические свойства определяют отклик на механические воздействия РЭМ второго уровня, установленных в радиоэлектронный шкаф.

Коэффициент демпфирования ζ определяется вязкими свойствами материала, обеспечивающего контакт модели и носителя воздействия, и зависит от частоты колебаний, но для колебаний сравнительно небольшой амплитуды, происходящих в воздушной среде, в диапазоне частот менее 2000 Гц этой зависимостью можно пренебречь. В исследуемой модели ножки РЭМ выполнены из стали, поэтому коэффициент демпфирования принят равным 3%, что эквивалентно добротности $Q = \frac{1}{2\zeta}$, приблизительно равной 17.

Тогда за время уменьшения амплитудного значения механического напряжения в e раз должно происходить 5÷6 колебаний.

Исходя из значения высшей частоты, которая может быть реализована в этом процессе (400 Гц), и для обеспечения необходимого уровня точности, был выбран шаг дискретизации измерений из расчета 1/25 периода составляющей высшей частоты: при длительности измерений 100 мс – 999 шагов.

При моделировании ударов использованы математические модели для трех простейших форм ударных импульсов¹: модель полусинусоидального импульса

¹ Реальные ударные воздействия всегда значительно сложнее, тем не менее простейшие импульсные воздействия часто оказываются эффективными в выявлении слабых мест в различных типах конструкций

$$a(t) = \begin{cases} a_{\max} \cdot \sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right), & \text{если } t \leq \tau, \\ 0, & \text{если } t > \tau, \end{cases}$$

модель треугольного импульса

$$a(t) = \begin{cases} a_{\max} \cdot \frac{t}{t_{\phi}}, & \text{если } t \leq t_{\phi}, \\ -a_{\max} \cdot \frac{(t - \tau)}{t - t_{\phi}}, & \text{если } t_{\phi} < t < \tau, \\ 0, & \text{если } t > \tau, \end{cases}$$

модель трапецеидального импульса

$$a(t) = \begin{cases} a_{\max} \cdot \frac{t}{t_{\phi}}, & \text{если } t \leq t_{\phi}; \\ a_{\max}, & \text{если } t_{\phi} < t < t_2 = \tau - t_c; \\ -a_{\max} \cdot \frac{(t - \tau)}{t_c}, & \text{если } t_2 < t < \tau, \\ 0, & \text{если } t > \tau. \end{cases}$$

Здесь t_{ϕ} – длительность фронта импульса, t_c – длительность среза импульса.

Зависимость интенсивности ударного воздействия от формы импульса

Для выявления зависимости отклика конструкции от формы ударного импульсного воздействия были смоделированы воздействия одиночных треугольного, полусинусоидального и трапецеидального импульсов одинаковой длительности τ и с одинаковой максимальной амплитудой ускорения $a = ng$ (g – ускорение свободного падения; n – перегрузка) в вертикальном направлении. Эксперимент проведен в двух вариантах: $\tau = 3$ мс, $a = 25g$ и $\tau = 3$ мс, $a = 60g$. Для треугольного импульса длительность фронта ударного ускорения выбрана равной длительности среза, для трапецеидального длительность фронта и длительность среза составляли $0,1 \tau$ каждая (симметричные импульсы).

На рис. 3 представлены временные зависимости отклика для трех форм импульсов длительностью $\tau = 3$ мс и ударным ускорением $a = 25g$. Для максимального ускорения $a = 60g$ характер спектров аналогичен, но амплитудные значения несколько выше.

Значения максимального ускорения горизонтальной составляющей и максимального напряжения в конструкции во время и после ударных воздействий $\tau = 3$ мс, $a = 25g$ ($60g$) приведены в табл. 3. В таблице также приведены значения импульсов действующих ударных сил, которые численно равны интегралу удар-

ной силы за время, равное длительности ее действия:

$$I = \int_0^{\tau} ma(t) dt.$$

Эта величина равна приращению импульса, который получает конструкция и ее элементы во время удара и определяется площадью под кривой $a(t)$. Значения энергии воздействия, представленные в табл. 3, определены по найденному приращению скорости конструкции для каждого типа импульса.

Установлено, что динамический отклик во всех случаях представляет собой быстропротекающий затухающий колебательный процесс, распространяющийся по конструкции. При этом зарегистрированы наибольшие напряжения в модели и во время удара ($t < \tau$), и после него ($t > \tau$) при воздействии трапецеидального импульса, минимальные – при воздействии треугольного импульса, и промежуточное положение занимает полусинусоидальный импульс. Максимальное напряжение в конструкции шкафа при испытаниях трапецеидальным ударом длительностью 3 мс и пиковым ускорением $60 g$ составило $9,4 \cdot 10^7$ Па при пределе прочности алюминиевого сплава АМг2 – $25 \cdot 10^7$ Па. Такая же закономерность в зависимости от формы импульса характерна и для ускорения элементов конструкции во время удара, а также для времени релаксации (уменьшения в e раз) напряжений в модуле, которое составляет для трапецеидального воздействия 20 мс ($\approx 7\tau$), для полусинусоидального – 18 мс ($\approx 6\tau$) и для треугольного – 16 мс ($\approx 5\tau$).

Эти эффекты являются закономерными и объясняются соотношениями значений ударного импульса и ударной энергии для различных форм импульсов: они максимальны для трапецеидального и минимальны для треугольного импульса.

Ответное ускорение достигает максимальных значений синфазно с ускорением ударного импульса и для отдельных фрагментов элементов конструкции значительно его превышает. Например, для полусинусоидального импульса с пиковым ускорением $25g$ и длительностью 3 мс зафиксированы максимальные значения ответного ускорения в модели $60g$. На рис. 4 показаны цветовые поля ускорений и напряжений отклика через $0,7\tau$ после начала воздействия. Максимальные значения напряжения ($34,9$ МПа) зарегистрированы в местах крепления горизонтального фронтального профиля к каркасу, в то

время как напряжения в другой части конструкции в 10 раз меньше.

В то же время после воздействия, когда в системе начинаются релаксационные процессы, значения максимального ускорения значительно уменьшаются для всех форм, при этом для трапецидального импульса становятся меньшими по сравнению со значениями для треугольного и полусинусоидального импульсов. Для объяснения этого эффекта проведена сравнительная оценка действия удара по его спектру. Для всех форм импульсов заданной длительности и пикового ускорения были построены начальный и

остаточный ударные спектры ускорений, а также определены максимальные ускорения, характерные для собственных частот исследуемой конструкции. Схематически спектры ускорений для всех форм воздействий представлены на рис. 5.

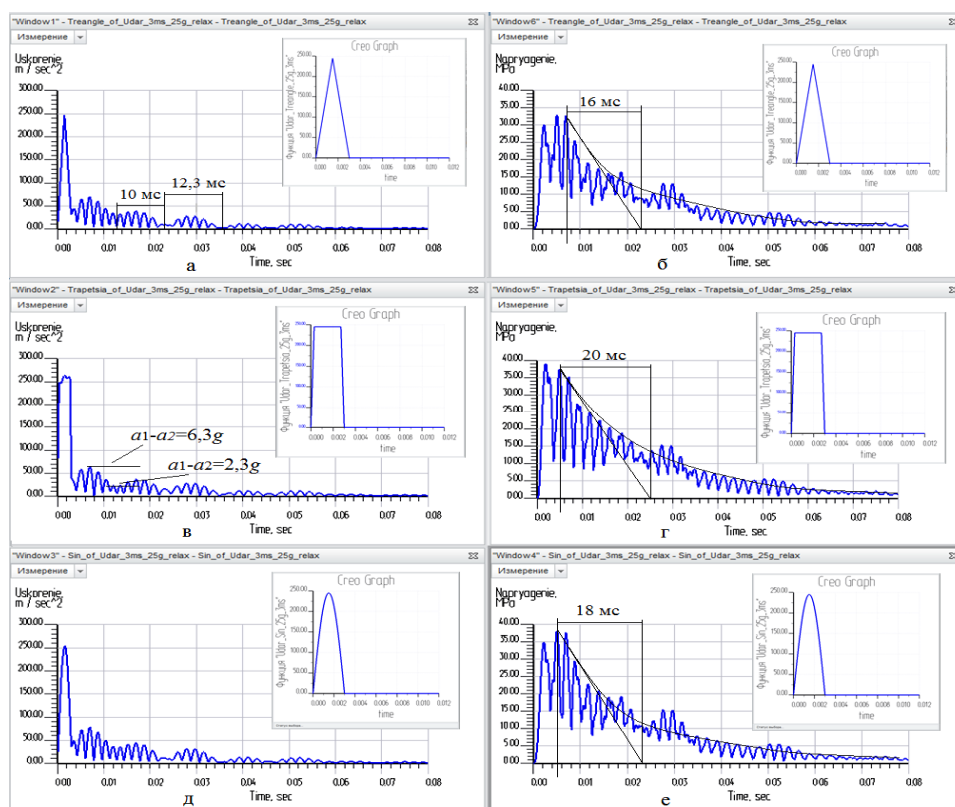


Рис. 3. Временные зависимости ускорения горизонтальной направляющей и максимального напряжения в конструкции РЭМ третьего уровня на ударные воздействия треугольного (а, б) трапецидального (в, г) и полусинусоидального (д, е) импульсов с пиковым ускорением 25g и длительностью 3 мс

Таблица 3

Механические характеристики конструкции после ударных воздействий различной формы

Механические характеристики		Ударный импульс длительностью 3 мс и пиковым ускорением 25 g (60 g)		
		треугольный	полусинусоидальный	трапецидальный
воздействия	ударный импульс, кг·м/с	1,69 (4,1)	2,15 (5,16)	3,04 (7,3)
	ударная энергия, Дж	0,31 (1,8)	0,53 (3,1)	1,00 (5,76)
отклика	максимальное ускорение во время удара, ng	25g (60g)	25,8g (62g)	26,7g (65g)
	максимальное ускорение после удара, ng	7g (17g)	7,5g (18g)	6,5g (14,5g)
	максимальное напряжение во время удара, МПа	30 (67)	35 (83)	40 (94)
	максимальное напряжение после удара, МПа	33 (76)	37,5 (90)	37,5 (96)

Из рис. 5 видно, что в фазе воздействия (во время удара) трапецеидальный ударный импульс сообщает наибольшие ускорения осцилляторам, соответствующим всем собственным частотам конструкции, далее в порядке убывания следуют полусинусоидальный и треугольный импульсы (на рис. 5 спектры для $t < \tau$). Поэтому во время действия трапецеидальный импульс оказывается самым «жестким», по сравнению с импульсами другой формы. После действия трапецеидального импульса ($t > \tau$) сообщаемые ускорения становятся значительно ниже для всех собственных частот, более того, для частот превышающих 232 Гц его воздействие становится меньше, чем действие синусоидального импульса, и для частот выше 274 Гц, - меньше, чем и треугольного импульса.

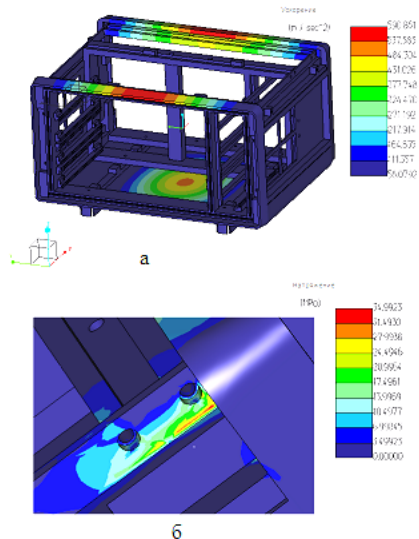


Рис. 4. Цветовое поле ответных ускорений (а) и фрагмент поля напряжений (б) в конструкции в результате воздействия полусинусоидального ударного импульса $\tau = 3$ мс, $a = 25$ g через время $0,7\tau$ после начала воздействия

Таким образом, после действия удара задействованными в процессе остаются только 3 ÷ 4 моды колебаний из восьми, первоначально вовлеченных в процесс. В то же время для треугольного импульса разница между реакцией во время действия и после действия импульса незначительна во всем диапазоне собственных частот, для синусоидального она пренебрежимо мала для частот ниже 310 Гц и незначительна для остальных собственных частот. Поэтому измеренные значения максимальных ускорений для треугольного и полусинусоидального импульсов после удара превышают значения, полученные при трапецеидальном воздействии.

Так как конструкция РЭМ третьего уровня является полимодальной, причем частоты собственных колебаний сравнительно близки меж-

ду собой (табл. 2), то для всех форм воздействий на временных зависимостях максимального ускорения от времени (рис. 3а, в, д) наблюдаются биения. Этот эффект является следствием суперпозиции возбуждаемых ударом колебаний в конструкции и выражается в периодическом увеличении и уменьшении амплитуды максимального ускорения горизонтальных направляющих и других элементов конструкции.

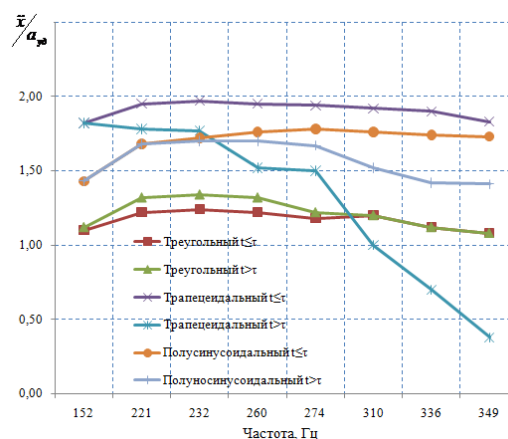


Рис. 5. Начальный и остаточный ударные спектры для треугольного, полусинусоидального и трапецеидального ударных импульсов длительностью $\tau = 3$ мс и ударным ускорением $a = 25$ g

В те моменты времени, когда накладывающиеся колебания происходят синфазно, суммарное ускорение оказывается максимальным, когда колебания оказываются в противофазе, - минимальным. По характеру биений установлено, что после удара происходит наложение колебаний с частотами, попадающими в диапазон собственных частот $f_1 = 162,7 \div 200$ Гц и $f_2 = 244 \div 300$ Гц. При этом с увеличением времени после удара происходит смещение из области более высоких частот в область более низких частот. Этот результат хорошо согласуется с построенными ударными спектрами для всех форм импульсов: если в начальных спектрах отклик примерно одинаков на всех частотах, то в остаточных преобладают отклики на более низких частотах.

Зависимость интенсивности ударного воздействия от пикового ускорения

Для выявления влияния ударного пикового ускорения на механический отклик конструкции были смоделированы симметричные трапецеидальные импульсы ударного воздействия одинаковой длительности $\tau = 3$ мс (время фронта и спада составляло $t_\phi = t_c = 0,1\tau$) с мак-

симальными значениями ускорений 4g, 10g, 25g и 60g.

Установлен линейный характер зависимости механических параметров отклика (рис. 6) от величины пикового ускорения ударного воздействия. Аналогичные результаты получены и для других форм импульсов при таких же параметрах удара. Полученный результат объясняется линейной зависимостью величины ударного импульса от пикового ускорения.

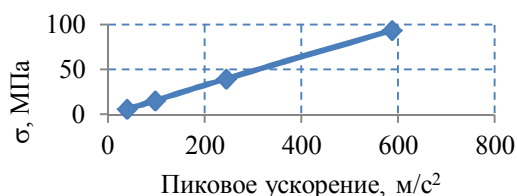


Рис. 6. Зависимость максимального напряжения в конструкции от пикового ускорения ударного трапециoidalного воздействия длительностью 3 мс

Зависимость интенсивности ударного воздействия от его длительности

Характер зависимости возникающих напряжений от длительности импульса установлен по результатам исследования откликов конструкции на полусинусоидальные ударные воздействия с одинаковым пиковым ускорением 25g и различной длительностью: 3, 5, 6 и 11 мс (рис. 7).

Показано, что ударные воздействия при длительностях 6 и 11 мс характеризуются минимальными значениями механических параметров после удара и никакой опасности для РЭМ не представляют. При длительности $\tau = 3$ мс время релаксации составляет приблизительно 7τ и начальные после удара напряжения значительно меньше предельных значений.

Из графика зависимости максимального напряжения в конструкции от длительности воздействия, представленного на рис. 7, видно, что, несмотря на увеличение ударного импульса и энергии воздействия с увеличением длительности импульса, максимальное напряжение в модуле уменьшается.

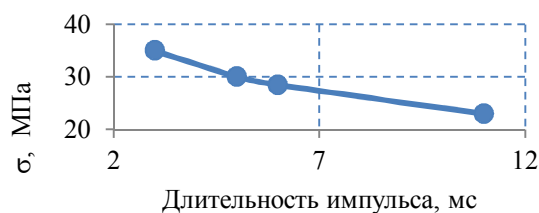


Рис. 7. Зависимость максимального напряжения в конструкции от длительности ударного полусинусоидального воздействия

Для объяснения такой зависимости были построены начальный и остаточный ударные спектры ускорений для полусинусоидальных импульсов различной длительности, схематично представленные на рис. 8.

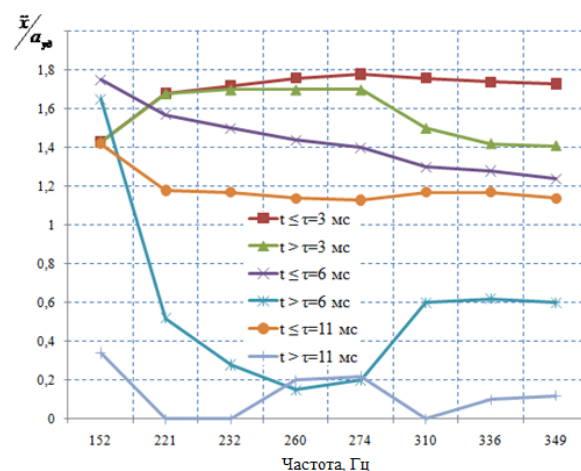


Рис. 8. Начальный и остаточный ударные спектры для полусинусоидальных ударных импульсов различной длительности

Анализ начальных спектров показывает, что уровень отклика во время удара ($t < \tau$) уменьшается с увеличением времени ударного воздействия, а остаточные спектры свидетельствуют об очень низком уровне послеударного отклика полимодальной структуры РЭМ третьего уровня на удары с длительностями 6 и 11 мс. Таким образом, характер зависимости на рис. 8 отражает спектральные особенности ударных воздействий и является закономерным.

Зависимость интенсивности ударного воздействия от скорости нарастания ударного ускорения

Для объяснения зависимости на рис. 7 также проведены исследования влияния скорости нагружения $da_{уд}/dt$ во время его нарастания до величины ng , а значит и скорости нарастания энергии удара, на механические характеристики радиоэлектронного шкафа для ударных импульсов треугольной формы с различными соотношениями длительности фронта и среза. Пиковое ускорение для всех ударных импульсов составляло 12g и длительность 3 мс. Изменением соотношения длительности фронта и длительности среза можно варьировать скоростью нарастания ударного ускорения $\frac{ng}{t_\phi}$ (n - максимальная величина перегрузки).

Скорость нарастания ускорения равна тангенсу угла наклона линии фронта импульса к оси времени (крутизна фронта):

$$\frac{da_{y0}}{dt} = \frac{ng}{\tau_\phi} = tg\alpha = \frac{k \cdot ng}{\tau}.$$

На рис. 9 представлен график зависимости максимальных напряжений в модели во время и после удара от коэффициента формы k импульса треугольной формы.

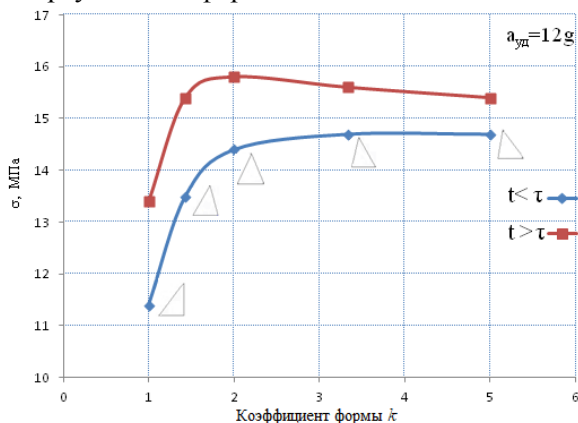


Рис. 9. График зависимости максимальных напряжений в модели во время и после удара от коэффициента формы треугольного импульса

При $t < \tau$ с увеличением коэффициента k , а вместе с ним и тангенса угла наклона линии фронта импульса к оси времени, напряжения в модели возрастают достаточно быстро при переходе от пилообразного импульса ($t_\phi = \tau$, $t_C = 0$) к симметричному ($t_\phi = t_C = 0,5\tau$), далее рост замедляется. При $t > \tau$ при увеличении k до значения, соответствующего симметричному импульсу наблюдается рост максимального напряжения в модели, а после перехода области симметричного импульса, начинается незначительное уменьшение этой величины. По-видимому, при значениях $k > 2$, т.е. при переходе к импульсам, в которых длительность среза превышает длительность фронта, начинает незначительно сказываться крутизна среза импульса.

Таким образом, «жесткость» удара в случае многомодальной системы РЭМ третьего уровня, в основном, определяется нарастанием переднего фронта импульса (крутизной фронта), при этом скорость уменьшения ударного ускорения во время среза (крутизна среза) вносит в процесс незначительные коррективы.

Подобный анализ проведен и для различных форм импульсов (треугольный, полусинусоидальный и трапецеидальный) при одинаковых пиковом ускорении $25g$ и длительности $\tau =$

3 мс. Крутизна фронта составляет для симметричного треугольного импульса:

$$tg\alpha = \frac{ng}{0,5\tau}$$

для полусинусоидального импульса средняя скорость роста ускорения такая же, как для треугольного, а в начальный момент времени она равна

$$\left. \frac{da_{y0}}{dt} \right|_{t=0} = \left. \frac{d}{dt} \left(ng \cdot \sin \frac{\pi t}{\tau} \right) \right|_{t=0} = \frac{\pi \cdot ng}{\tau} \cdot \cos \frac{\pi t}{\tau} \Big|_{t=0} = \frac{\pi \cdot ng}{\tau};$$

для трапецеидального симметричного импульса $t_\phi = t_C = 0,1\tau$

$$\frac{ng}{0,1\tau} = \frac{10 \cdot ng}{\tau}.$$

Таким образом, в ряду импульсов треугольный – полусинусоидальный – трапецеидальный крутизна фронта увеличивается.

На рис. 10 приведен график зависимости максимального напряжения в исследуемой конструкции от коэффициента формы для треугольного, полусинусоидального и трапецеидального импульсов. Полученная зависимость хорошо согласуется с результатами, полученными на основании анализа ударных спектров.

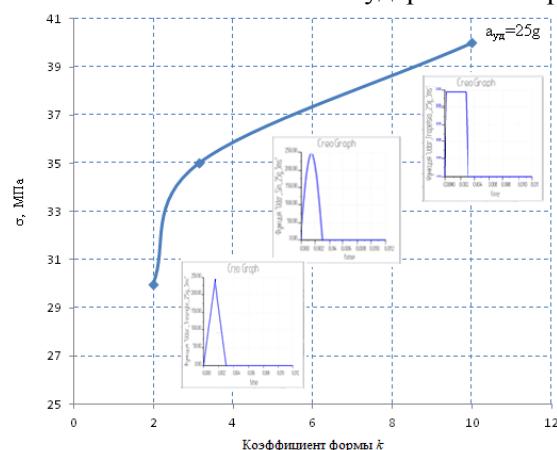


Рис. 10. Зависимость максимального напряжения в исследуемой конструкции от коэффициента формы для треугольного, полусинусоидального и трапецеидального импульсов с пиковым ускорением $25g$ и длительностью 3 мс

Закключение

Впервые проведены систематические исследования механических воздействий в виде знакопостоянных одиночных ударных импульсов различной формы на РЭМ третьего уровня моделированием в программном комплексе CREO.

Установлено, что динамический отклик во всех случаях представляет собой быстропротекающий затухающий колебательный процесс, распространяющийся по конструкции. При этом напряжения в модели и во время удара ($t < \tau$), и после него ($t > \tau$) наибольшие при воз-

действии трапецеидального импульса, минимальные – при воздействии треугольного импульса, и промежуточное положение занимает полусинусоидальный импульс. Выявлены области элементов конструкции, в которых возникают максимальные напряжения.

Получена прямая линейная зависимость механических параметров отклика конструкции от величины пикового ускорения ударного воздействия и обратная нелинейная – от длительности ударного импульса. Показано определяющее влияние крутизны фронта ударного импульса на характер установленных зависимостей и на «жесткость» удара. Установлено, что «жесткость» удара в случае многомодальной системы РЭМ третьего уровня, в основном, определяется крутизной фронта, при этом крутизна среза вносит в процесс незначительные коррективы в тех случаях, когда длительность среза становится сравнимой с длительностью фронта.

Воронежский государственный технический университет

INFLUENCE OF APPLIED SHOCK PARAMETERS ON THE DYNAMIC CHARACTERISTICS OF THE THIRD LEVEL ELECTRONIC MODULES

P.V. Ievlev

Graduate student, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: ievlev92@mail.ru

Systematic studies of mechanical impacts in the form of direct single shock impulses of various forms on the radio-electronic modules of the third level by modeling in the CREO program complex are carried out. For this purpose, a verified model of a small-sized radioelectronic cabinet was used, in which guide ways of various types are provided to accommodate detachable and integral plug-in modules of a lower hierarchical level. The dependence of the structure response intensity on the form of the impulse, peak acceleration, duration of the impulse, and the rate of increase of the shock acceleration are established. The determining effect of the steepness of the shock impulse front on the character of the established dependences and on the "stiffness" of the impact is shown. It is established that the "stiffness" of the impact in the case of the multimodal system of the third level radio-electronic module is mainly determined by the steepness of the front, while the slope of the cut introduces minor corrections to the process in those cases when the duration of the cut becomes comparable with the duration of the front.

The obtained results are the basis for creating a database for modeling mechanical loads on lower-level radio modules (blocks, panels)

Key words: modelling, applied shock, electronic modules

References

1. Karpushin V.B. "Vibrations and shocks in radio" ("Vibratsii i udary v radioapparature"), Moscow, Sovetskoe radio, 1971, 344 p.
2. Harris C.M., Piersol A.G. "Harris' shock and vibration", New York, McGraw – Hill, 2002, 1461 p.
3. Zukas J.A., Nicholas T., Swift H., Greszczuk L., Curran D. "Impact Dynamics" ("Dinamika udara") Russ. ed., Moscow, Mir, 1985, 296 p.
4. Raouf A. Ibrahim "Vibro-Impact Dynamics, Modeling, Mapping and Applications", Berlin, Springer – Verlag, 2009, 301p.
5. Ievlev P.V. "Verification of finite element model of third level radio-electronic module, created by means of CREO program complex" (Verifikatsiya konechno-ehlementnoy modeli radioelektronnogo modulya tret'ego urovnya, sozdannoy sredstvami programmnoy kompleksa CREO), *The Bulletin of Voronezh State Technical University*, 2017, vol. 13, no. 6, pp. 79-86.

Полученные результаты положены в основу создания базы данных для моделирования механических нагрузок на РЭМ более низкого уровня (блоки, панели).

Литература

1. Карпушин В.Б. Вибрации и удары в радиоаппаратуре / В.Б. Карпушин. - М.: Советское радио, 1971. - 344 с.
2. Harris C.M. Harris' shock and vibration / C.M. Harris, A.G. Piersol // New York: McGraw – Hill, 2002. - 1461 p.
3. Динамика удара / Дж.А. Зукас, Т. Николас, Х.Ф. Свифт, Л.Б. Грещук, Д.Р. Курран. - М.: Мир, 1985. - 296 с.
4. Raouf A. Ibrahim. Vibro-Impact Dynamics, Modeling, Mapping and Applications. Springer – Verlag Berlin, 2009, 301 p. Код доступа: bookfi.net/book/727742, дата обращения 09.08.2017.
5. Верификация конечно-элементной модели радиоэлектронного модуля третьего уровня, созданной средствами программного комплекса CREO / В.И. Борисов, П.В. Иевлев, А.В. Муратов, Т.Л. Тураева, А.В. Турецкий // Вестник Воронежского государственного технического университета. - 2017. - Т. 13. - № 3. - С. 79-86.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНЫХ ИСПЫТАНИЙ В РАДИОЭЛЕКТРОНИКЕ В СООТВЕТСТВИИ С ГОСУДАРСТВЕННЫМИ СТАНДАРТАМИ

В.И. Борисов, П.В. Иевлев, А.В. Муратов, Т.Л. Тураева, А.В. Турецкий

Рассмотрены требования, предъявляемые к физическим и математическим расчетным моделям конструкций, а также возможные варианты упрощения моделей. Приведен краткий обзор физических и математических моделей ударного воздействия, представляющих наибольший практический интерес. Рассмотрены классическая модель ударного воздействия Ньютона, вязко-упругие модели ударной силы Кельвина – Фойгта, Бингема, Максвелла, Герца в исходном и модифицированном вариантах с учетом нелинейности упругой и вязкой составляющих. Приведены примеры эффективного использования вязко-упругих моделей для решения практических задач ударных воздействий на радиоэлектронные изделия. Названы основные причины несоответствия результатов конечно-элементного моделирования с результатами натурных испытаний.

Представлены результаты модельных испытаний радиоэлектронного модуля (РЭМ) третьего уровня на этапе конструирования тремя последовательными ударами с пиковым ускорением 25g и длительностью 11 мс в соответствии с актуальным государственным стандартом

Ключевые слова: моделирование, ударные воздействия, радиоэлектронные модули

Введение

Исследование динамических характеристик радиоэлектронных модулей (РЭМ) третьего уровня при ударных и вибрационных воздействиях является важнейшим направлением исследований современной радиоэлектроники [1-10]. Механические воздействия вызывают ослабление соединений (резьбовых, сварных, заклепочных, клеевых и т.д.), деформацию и поломку отдельных составляющих конструкции, перемещение частей конструкции друг относительно друга, в результате чего может быть нарушена регулировка и изменена настройка модулей более низкого уровня, размещенных в радиоэлектронном шкафу или стойке.

К РЭМ третьего уровня предъявляются определенные требования по ударопрочности и удароустойчивости. Конструкция должна не только выдерживать заданный уровень ударных нагрузок без разрушения, но и сохранять свои параметры как во время, так и после ударного воздействия для обеспечения штатного функционирования модулей всех уровней, установленных в конструкцию. Поэтому существуют требования и стандарты на испытания

аппаратуры [11-14], и радиоэлектронные устройства тестируют на ударные воздействия и падения, даже если они не предназначены для эксплуатации в динамичных условиях.

В то же время с ударными механическими воздействиями связаны наибольшие трудности при стендовом воспроизведении из-за скорости процесса, из-за проблемы его адекватного воспроизведения и несовершенства измерительных средств. Поэтому в последние годы все чаще тестирование проводят на этапе проектирования с использованием программных средств, в основу которых положен метод конечных элементов. В работах [3, 15-16] представлены результаты сопоставления аналитического и численного анализа отклика конструкций на ударные воздействия, свидетельствующие об адекватности применяемых моделей.

Постановка задачи

Цель данного исследования – анализ существующих математических моделей ударных воздействий и моделирование стандартных тестовых испытаний РЭМ третьего уровня в соответствии с действующими государственными стандартами на этапе конструирования. Моделирование проводили в программном комплексе CREO, позволяющем проводить анализ с учетом физической нелинейности различной степени как упругой, так и вязкой составляющих ударной силы [17].

Наиболее важная и сложная часть задачи динамического расчета РЭМ третьего уровня заключается в создании адекватной физической и математической расчетной модели конструкции, т.е. в выборе динамической схемы и со-

Борисов Василий Иванович – АО «Концерн «Созвездие», д-р техн. наук, профессор, e-mail: bvi@sozvezdie.ru

Иевлев Павел Валерьевич – ВГТУ, аспирант, e-mail: ievlev92@mail.ru

Муратов Александр Васильевич – ВГТУ, д-р техн. наук, профессор, e-mail: kipr@vorstu.ru

Тураева Татьяна Леонидовна – ВГТУ, канд. физ.-мат. наук, доцент, e-mail: tlturaeva@mail.ru

Турецкий Андрей Владимирович – ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, e-mail: tav7@mail.ru

ставлении системы уравнений, описывающей условия динамического равновесия конструкции под действием ударных нагрузок. Динамическая модель должна, с одной стороны, соответствовать реальной сложной конструкции РЭМ, с другой стороны, быть достаточно простой, так как динамический расчет – высокозатратный процесс в части вычислительных ресурсов. В связи с этим применяют упрощения модели: рассматривают системы с сосредоточенными параметрами, по результатам модального анализа выбирают конечное число низших форм собственных колебаний. Этот выбор делается для каждого конкретного воздействия в зависимости от условий нагружения, динамических характеристик конструкции и требуемой точности расчетов. В случае расчета отклика на механические воздействия упрощения оправданы тем, что время приложения и снятия всех внешних воздействий на РЭМ третьего уровня, обычно сравнимо с периодами первых тонов собственных колебаний конструкции. Поэтому внутренние напряжения, обусловленные влиянием высших тонов этих колебаний, незначительны и ими можно пренебречь.

В начальный момент ударного воздействия в конструкции начинают действовать силы, обусловленные ее механическими свойствами. Поэтому контактную силу при ударе можно представить в виде суммы трех составляющих:

$$F = F_{ynp}(x) + F_{vd}(x, \dot{x}) + F_{pd}(x, \dot{x}).$$

Упругая консервативная компонента $F_{ynp}(x)$ является функцией только деформации. В случаях небольших деформаций упругую составляющую можно задать линейной зависимостью от абсолютной деформации в соответствии с законом Гука

$$F_{ynp}(x) = kx(t),$$

где k – коэффициент жесткости, в других случаях – степенной функцией

$$F_{ynp}(x) = k_h x^n(t),$$

где n в зависимости от свойств материалов может принимать значения в интервале от 1/4 до 2, при этом в модели Герца используется промежуточное значение $n = 3/2$ [18].

Компонента вязкого демпфирования $F_{vd}(x, \dot{x})$ в простейших моделях является линейной

$$F_{vd}(x, \dot{x}) = c\dot{x},$$

где c – коэффициент вязкого трения (демпфирования). В этом случае задача сводится к решению классического уравнения затухающих колебаний. В некоторых программных продук-

тах используют незначительные модификации этой зависимости. Так, в ADAMS (Automated Dynamic Analysis of Mechanical Systems – CAE продукт компании MSC Software) для предотвращения критического и закритического затухания введено ограничение для коэффициента c , который возрастает от нуля в начале механического воздействия до максимального значения при определенной деформации, задаваемой пользователем [19].

Учет нелинейности вязкой компоненты силы ударного воздействия приводит к выражению

$$F_{vd}(x, \dot{x}) = \lambda x^\gamma \dot{x},$$

где λ и γ – константы, определяемые опытным путем. В этом случае характерными становятся гистерезисные явления.

Компонента $F_{pd}(x, \dot{x})$ связана с пластической диссипацией (аналог сухого трения) и ее зависимость от скорости деформации $\dot{x}$ является кусочно – постоянной

$$F(t) = P \operatorname{sign}(\dot{x}).$$

В работах [1, 20] рассмотрены некоторые критерии применения линейного и нелинейного подходов к решению проблемы. Выделены практические задачи, в которых применение упрощенного линейного подхода позволило получить важные результаты. Установлено, что амплитуда колебаний нелинейной системы менее чувствительна к динамической природе кратковременной приложенной нагрузки, чем линейной системы. В то же время для линейных ускорений ситуация обратная: они могут оказаться существенно больше, чем линейные.

Математические модели ударных воздействий

Классическая модель ударного воздействия Ньютона создана в предположении, что длительность ударного воздействия стремится к нулю, перемещения тел в процессе удара можно пренебречь, деформации не рассматриваются и учитываются только интегральные характеристики ударных сил (импульсы этих сил). В основу модели положено применение фундаментальных законов динамики – законов сохранения энергии и импульса. Процесс удара разделен на две фазы – фаза деформации и фаза восстановления [21]. Потери энергии учитываются с помощью коэффициента восстановления η , который зависит от материала тела и определяется отношением импульсов ударной силы в фазах деформации и восстановления, причем при коллинеарном ударе эта величина совпада-

ет с отношением абсолютных значений скоростей после удара и до удара. Значение коэффициента восстановления удовлетворяет двойному неравенству $0 \leq \eta \leq 1$, предельные значения отвечают абсолютно неупругому удару ($\eta = 0$) и абсолютно упругому ($\eta = 1$).

Основные положения модели накладывают ограничения на ее практическое применение. Проведенные экспериментальные и теоретические исследования показывают, что значение η не является постоянным и монотонно убывает с увеличением начальной ударной скорости. Поэтому эта модель применима в достаточно узком диапазоне скоростей соударения для компактных тел, изготовленных из достаточно жестких материалов. Кроме того, в рамках этой модели невозможно определить важнейшие количественные параметры удара: деформации и механические напряжения, продолжительность, максимальную силу воздействия (формально она получается бесконечно большой). Таким образом, использование этой модели является нецелесообразным при расчетах отклика сложных РЭМ третьего уровня на ударное воздействие.

Многие практические задачи могут быть решены на основе упрощенного подхода, когда испытываемая конструкция может быть представлена в виде линейной колебательной системы с одной степенью свободы. В этом случае коэффициент жесткости k_1 , являющийся коэффициентом пропорциональности между ударной силой $F(t)$ и величиной деформации $x(t)$, не зависит от величины деформации:

$$F(t) = k_1 x(t).$$

Учет нелинейности характеристик конструкции приводит к изменению функциональной зависимости ударной силы от деформации из-за зависимости коэффициента жесткости от величины деформации:

$$F(t) = F_1(x(t)).$$

Модель Кельвина – Фойгта

В модели ударной силы Кельвина – Фойгта учитываются линейная упругая сила, удовлетворяющая закону Гука, и линейная характеристика вязкости. Тогда ударная сила представляет собой сумму линейной силы упругости и силы вязкого сопротивления

$$F(t) = F(x, \dot{x}) = k_k x(t) + c_k \dot{x}(t),$$

где k_k – коэффициент упругости системы, $\dot{x}(t)$ – относительная скорость деформированного элемента в момент времени t , c_k – коэффициент вязкого трения. Поведение конструкции моде-

лируется линейным дифференциальным уравнением второго порядка с постоянными коэффициентами

$$m\ddot{x} = -k_k x(t) - c_k \dot{x}(t).$$

Коэффициент восстановления η при ударе для модели не зависит от скорости в начальный момент удара, но зависит от коэффициента упругости системы и от масс соударяющихся тел. Если известны параметры деформированной среды, то можно определить коэффициент восстановления:

$$\eta = \exp\left(\frac{-\pi \cdot c_k}{\sqrt{4m_{np} \cdot k_k - c_k^2}}\right),$$

где $m_{np} = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ – приведенная масса системы соударяющихся тел.

Недостатки модели:

1) в начальный и конечный моменты воздействия ударная сила равна силе сопротивления и отлична от нуля, т.е. к окончанию воздействия возникают растягивающие силы (имеет место эффект «прилипания»), что противоречит физическим основам процесса;

2) в начальный момент соударения ударная сила изменяется скачкообразно. Это происходит из-за того, что вязкая компонента силы в момент начала удара уже не равна нулю.

Для устранения эффекта «прилипания» модель была незначительно модифицирована Комодромосом в 2007 г. и ударная сила для последующего временного интервала задана следующим образом:

$$F(t + \Delta t) = \begin{cases} k_k x(t) + c_k \dot{x}(t), & \text{если } F(t) > 0, \\ 0, & \text{если } F(t) \leq 0. \end{cases}$$

Для устранения второго недостатка вводится запаздывание для вязкой компоненты силы (Пент, 2010 г.):

$$F(t + \Delta t) = \begin{cases} k_k x(t) + c_k \dot{x}(t), & \text{если } x > 0 \text{ и } \dot{x} > 0, \\ k_k x(t), & \text{если } x > 0 \text{ и } \dot{x} \leq 0, \\ 0, & \text{если } x \leq 0. \end{cases}$$

В этом случае значение коэффициента вязкости отличается от аналогичного в исходной модели Кельвина – Фойгта и определяется следующим образом

$$c_k = \frac{3 \cdot k_k (1 - r^2)}{2r^2 \cdot \dot{x}_0} \cdot x,$$

где r – коэффициент восстановления, $\dot{x}_0$ – относительная скорость непосредственно перед ударом. При одинаковой продолжительности воздействия в обоих случаях коэффициенты

восстановления η и r будут различными. Уравнение движения приобретает вид:

$$m\ddot{x} = -k_k x(t) - c_{k1} x(t) \dot{x}(t).$$

Если статическая характеристика воздействия при ударе близка к линейной, отмеченные недостатки несущественны, и модель может использоваться и в исходном варианте. Это условие выполняется в следующих случаях:

- точечный удар по упругой конструкции (например, падение небольшого тяжелого предмета на РЭМ третьего уровня);
- удар по конструкции через амортизатор;
- случаи ударов, при которых площадь контакта во время воздействия изменяется очень незначительно.

Вязкоупругая модель Бингема с учетом сухого трения

Модель Бингема отличается от модели Кельвина – Фойгта учетом влияния силы сухого трения, направление которой зависит от направления скорости смещающихся частиц. В уравнение эта компонента силы входит со знаком, противоположным относительной скорости. В этом случае контактная сила и уравнение движения имеют вид:

$$F(t) = k_k x(t) + c_k \dot{x}(t) + P \operatorname{sign}(\dot{x}),$$

$$m\ddot{x} = -k_k x(t) - c_k \dot{x}(t) - P \operatorname{sign}(\dot{x}).$$

В этой модели также появляется растягивающая сила, которую можно устранить введением дополнительного условия, умножив вязкую составляющую на величину смещения $x(t)$:

$$m\ddot{x} = -k_k x(t) - c_{k1} x(t) \dot{x}(t) - P \operatorname{sign}(\dot{x}).$$

Если в рамках этой модели силу сухого демпфирования считать постоянной только в фазе сжатия и не учитывать силы вязкого демпфирования, то растягивающих напряжений (эффекта «прилипания») не будет. В этом случае дифференциальное уравнение, описывающее движение во время удара, станет условным и будет иметь вид

$$m\ddot{x} = -k_k x(t) - P \cdot \operatorname{if}(\dot{x} \leq 0, 0, 1).$$

Модель Максвелла

Модель деформируемой среды в этом случае составлена из упругого и вязкого элементов, соединенных последовательно, и применима для определенных материалов. В этом случае сила и смещение связаны между собой уравнением:

$$\frac{c_k}{k_k} \dot{F} + F = c_k \cdot \dot{x}.$$

Ударная сила может быть найдена из уравнения:

$$\frac{m}{k_k} \ddot{F} + \frac{m}{c_k} \dot{F} + F = 0$$

и закон движения смещающихся элементов имеет вид:

$$\frac{m}{k_k} \ddot{x} + \frac{m}{c_k} \dot{x} + x = 0.$$

В этой модели, как и в предыдущих, коэффициент восстановления не зависит от предударной скорости и может быть определен из соотношения

$$\eta = \exp\left(\frac{-\pi \cdot k_k}{\sqrt{4 \cdot c_k^2 - k_k m_{np}}}\right).$$

Модель Герца

В рамках этой модели можно получить адекватные результаты для случаев ударного воздействия однородных сплошных тел, когда пластическими деформациями можно пренебречь. В литературных источниках отмечено хорошее соответствие экспериментальных и теоретических данных для стальных и латунных литых конструкций, и значительно худшие результаты – для свинцовых [18].

В соответствии с моделью Герца в условиях статического нагружения упругая компонента силы определяется следующим образом

$$F(t) = \begin{cases} k_h x^{3/2}(t), & \text{если } x(t) > 0, \\ 0, & \text{если } x(t) \leq 0. \end{cases}$$

Коэффициент k_h зависит от свойств материалов и формы их поверхностей в области ударного воздействия. Для сферических поверхностей

$$k_h = \frac{4}{3\pi(h_1 + h_2)} \sqrt{\frac{R_1 \cdot R_2}{R_1 + R_2}}, \quad h_i = \frac{1 - \mu_i}{\pi E_i}, \quad R_i = \sqrt{\frac{3m_i}{4\pi\rho}},$$

где E_i и μ_i – модуль Юнга и коэффициент Пуассона; h_i – параметр, определяемый упругими свойствами материала; ρ – плотность материала; $i = 1, 2$; R_i – радиус кривизны поверхностей (для плоских поверхностей $R \rightarrow 0$).

Уравнение движения смещающихся элементов в рамках этой модели имеет вид:

$$m\ddot{x} = -k_h x^{3/2}(t) - c_k \dot{x}(t).$$

Модифицированная модель Герца

В модифицированном варианте учтена затухающая нелинейная часть силы:

$$F(t) = \begin{cases} k_h x^{3/2}(t) \left[1 + \frac{3(1-\eta^2)}{4(v_1 - v_2)} \dot{x}(t) \right], & \text{если } x(t) > 0, \\ 0, & \text{если } x(t) \leq 0, \end{cases}$$

где $(v_1 - v_2)$ – относительная скорость контактирующих тел во время воздействия, в момент максимального сближения контактирующих тел эта величина равна нулю.

После устранения «прилипания» путем умножения вязкой компоненты силы на перемещение уравнение движения приобретает вид:

$$m\ddot{x} = -k_h x^{3/2}(t) - c_{k1} x(t) \dot{x}(t).$$

Нелинейная вязкоупругая модель

Еще одна улучшенная версия модели Герца была создана Янковским в 2006 г. В этой модели учтена нелинейность вязкой компоненты, устранено «прилипание», и коэффициент восстановления не зависит от скорости в момент удара.

Ударная сила в рамках этой модели определяется следующим образом:

$$F(t) = \begin{cases} k_\beta x^{3/2}(t) + \bar{c}(t) \dot{x}(t), & \text{если } x > 0 \text{ и } \dot{x} > 0, \\ & (\text{фаза деформации}), \\ k_\beta x^{3/2}(t), & \text{если } x > 0 \text{ и } \dot{x} \leq 0, \\ & (\text{фаза восстановления}), \\ 0, & \text{если } x \leq 0, \end{cases}$$

здесь k_β – параметр упругости, $\bar{c}(t) = cx^{1/4}$ – коэффициент затухания, связанный с коэффициентом восстановления соотношением:

$$\bar{c}(t) = 9\sqrt{5} \frac{1 - \eta^2}{\eta(\eta(9\pi - 16) + 16)} \sqrt{k_\beta m_{np} \sqrt{x(t)}}.$$

В ряде работ показана эффективность использования вязко – упругих моделей для численного решения практических задач ударных воздействий. В работе [22] рассмотрены основные принципы моделирования ударных воздействий и рекомендации по их применению при решении практических задач в программном комплексе автоматизированного динамического анализа многокомпонентных механических систем ЭЙЛЕР (EULER). Авторы работы [23] провели сравнительный анализ эффективности различных моделей, применяемых для оценки ударных воздействий при землетрясениях. Сформулированы рекомендации для выбора наиболее эффективных и точных моделей для моделирования отклика сложной многозвенной системы, испытывающей воздействие.

В процессе моделирования наилучшие результаты были достигнуты при использовании модифицированной вязко – упругой модели Кельвина – Фойгта и нелинейной вязкоупругой модели Янковского, представляющей собой современную улучшенную версию модели Герца. В работе [20] представлены результаты мо-

дельных исследований ударных механических воздействий на системы с одной и многими степенями свободы с использованием решателя MATLAB и программного обеспечения SAP 2000 NL. Показано, что все вязко – упругие модели ударной силы находятся в хорошем согласии друг с другом, при этом для получения качественных результатов достаточно использования упрощенной модели с одной степенью свободы, в то же время для более детального анализа следует использовать системы со многими степенями свободы. На основании сопоставления результатов аналитических расчетов и результатов моделирования с помощью конечно – элементного алгоритма программного пакета Ansys/Multiphysics сделан вывод об эквивалентности используемых CAE моделей математическим моделям Герца и Максвелла [24]. Получены результаты [25], свидетельствующие о хорошем согласовании (максимальное несоответствие составляло 5 %) экспериментальных и модельных (ANSYS) параметров ударных воздействий на демпферы, используемые для защиты от ударных воздействий (рис. 1).

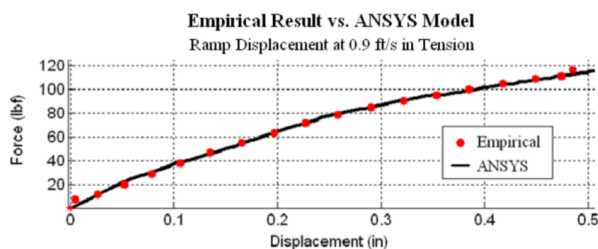


Рис. 1. Экспериментальные и модельные результаты зависимости ударной силы от величины смещения контактирующих элементов; смещение указано в дюймах [25]

В ряде работ представлены результаты успешного моделирования механических воздействий, в том числе ударных, на радиоэлектронные устройства [26, 27]. Показана возможность конструирования РЭМ 2 уровня, представляющего собой сложную, часто нелинейную динамическую структуру, содержащую внутренние РЭМ 1 уровня, в рамках упрощенной линейной модели системы с 2 степенями свободы [5, 6]. Однако при анализе отклика на нагрузки с большими деформациями, более адекватные результаты дает применение нелинейных моделей [28].

Моделирование одиночных ударов на РЭМ 1 уровня успешно проведено в программном комплексе ANSYS [8]. В работах [7, 29] показана перспективность проведения расчетов отклика конструкций радиоэлектронной аппаратуры на механические воздействия методом

конечных элементов в программных пакетах инженерного анализа.

В то же время результаты численного моделирования ударных воздействий на РЭМ 3 уровня в литературных источниках не выявлены.

Экспериментальное и численное исследование проблем воздействия вибраций и ударов на радиоэлектронную аппаратуру при трехуровневом подходе (отдельные компоненты, модули и направляющие на различных уровнях) позволяет выделить основные причины несоответствия результатов конечно-элементного моделирования с результатами натурных испытаний:

1) граничные условия не соответствуют реальной ситуации;

2) неправильно заданы типы материалов;

3) общая масса модели не соответствует общей массе системы;

4) частотные и временные диапазоны воздействий отличаются в натурных и модельных испытаниях.

Моделирование ударных испытаний в соответствии с государственными стандартами

Радиоэлектронные шкафы и стойки должны выдерживать перемещения при производстве, хранении, установке и эксплуатации, а также воздействие внешних механических факторов. Поэтому испытания на механические воздействия должны проводиться согласно требованиям государственных стандартов [11-14], определяющих перечень испытаний для базовых несущих конструкций радиоэлектронных средств (шкафов и стоек) и оборудования военного назначения, представленных в табл. 1 и 2 соответственно.

Таблица 1

Обозначение характеристики	Предназначенная область применения	Испытание Еа: на ударное воздействие, только по вертикальной оси, полупериод волны согласно МЭК 60068-2-27		
		Максимальное ускорение, м/с ²	Продолжительность, мс	Количество ударных воздействий
DL4	Низкий уровень подверженности ударному воздействию. Нагруженный шкаф для стационарного применения на промышленных предприятиях и в офисах	40	18	3
DL5	Средний уровень ударного воздействия для стационарного и возможного применения. Нагруженный шкаф для ж/д транспорта, автомобилей, систем сигнализации, расположенный рядом с вращающимися механизмами	100	11	3
DL6	Высший уровень ударного воздействия. Области применения: торговые суда, требования низкого уровня к военному оборудованию	250	11	3

Таблица 2

Область применения	Максимальное ускорение, м/с ²	Продолжительность удара, мс
Бортовая аппаратура наземной техники	750	1÷5
Бортовая аппаратура морской техники	150	5÷15
Бортовая аппаратура авиационной техники	150	По ТЗ
Бортовая аппаратура ракетной техники	600 ÷ 1000	1÷6
Бортовая аппаратура космической техники	1500	0,3÷1

Спроектированный РЭМ третьего уровня был испытан тремя последовательными ударами с пиковым ускорением $25g$ и длительностью 11 мс трапецидальными и треугольными импульсами с частотой следования $2,5$ удара в секунду и скважностью $Q = 36,4$, а также полусинусоидальными - с частотой 3 удара в секунду и скважностью $Q = 30$. Максимальные напряжения отклика в конструкции в зависимости от времени показаны на рис. 2. При наиболее «жестких» трапецидальных ударах элементы конструкции возвращаются практически полностью в предупредное состояние через $0,1$ секунды, задолго до наступления следующего воздействия, возникающие напряжения значительно меньше предельных значений. При воздействии импульсов треугольной и полусинусоидальной формы система возвращается в состояние, близкое к исходному, через 40 мс, при этом уровень механических напряжений еще ниже. Таким образом, разработанный РЭМ третьего уровня успешно прошел модельные стандартные ударные испытания.

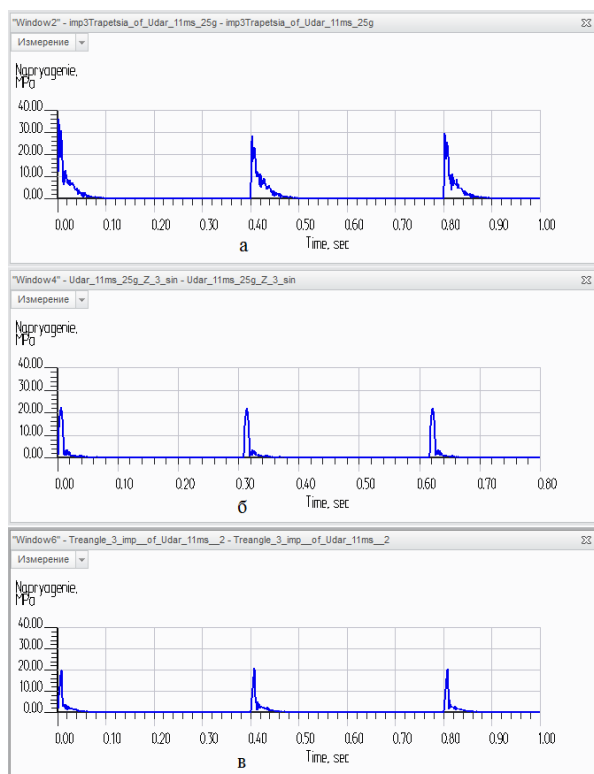


Рис. 2. Результаты испытаний РЭМ третьего уровня тремя последовательными ударными воздействиями $a_{y0} = 25g$ и $\tau = 11$ мс в соответствии с государственным стандартом [11] импульсами различной формы: а – трапецидальные; б – полусинусоидальные; в – треугольные

Заключение

Проведен сравнительный анализ математических моделей, перспективных при модели-

ровании ударных воздействий на радиоэлектронные модули. Показана принципиальная возможность использования программного комплекса CREO для моделирования стандартных испытаний на этапе конструирования.

Литература

1. Suhir E. Dynamic response of electronic systems to shocks and vibration: Application of analytical (mathematical) modeling. EPJ Web of Conferences 26, 05002 (2012). Код доступа: https://www.researchgate.net/publication/258643196_Dynamic_response_of_electronic_systems_to_shocks_and_vibrations_Application_of_analytical_mathematical_modeling. Дата обращения 08.07.2017.
2. Steinberg D. Vibration Analysis for Electronic Equipment. New York 2000. 458 p.
3. Mathew S. Virtual Remaining Life Assessment of Electronic Hardware Subjected to Shock and Random Vibration Life Cycle Loads / S. Mathew, D. Das, M. Osterman, M. Pecht, J. Clayton, Ferebee R. // Journal of the IEST. 2007. V. 50. N. 1. P. 86-97.
4. Комплексный подход при определении и оптимизации характеристик РЭС в процессе проектирования / О.Ю. Макаров, А.В. Турецкий, Н.В. Ципина, В.А. Шуваев // Радиотехника. 2016. № 6. С. 50-54.
5. Autekin B. Vibration analysis of pcbs and electronic components. 2008. P.135. Код доступа: etd.lib.metu.edu.tr/upload/3/12609444/index.pdf.
6. Veprik A.M. Vibration Protection of Critical Components of Electronic Equipment in Harsh Environmental Conditions. Journal of Sound and Vibration. 2003. V. 259 (1). P. 161-175.
7. Бовсуновский А.Б. Механический анализ конструкции бортовой радиоэлектронной аппаратуры космических аппаратов: автореферат дис. ... канд. физ.-мат. наук. Томск, 2013. 26 с.
8. Апарников А.Н. Моделирование воздействия внешних механических нагрузок на конструкцию электронного модуля первого уровня в программной системе ANSYS/ А.Н. Апарников // Молодежный научно-технический вестник. 2015. № 11. Код доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/823297.html>.
9. Карпушин В.Б. Вибрации и удары в радиоаппаратуре / В.Б. Карпушин. М.: Советское радио, 1971. 344 с.
10. McKeown. Mechanical Analysis of Electronic Packaging Systems, Marcel Dekker, Inc., 1999.
11. ГОСТ Р МЭК 61587.1-2013. Конструкции несущие базовые радиоэлектронных средств. Часть 1. Климатические, механические испытания и виды безопасности для шкафов, стоек, блочных каркасов и шасси. М.: Стандартинформ. 2014. 24 с.
12. ГОСТ 28213-89. Основные методы испытаний на воздействие внешних факторов. Часть 2. Испытания. Испытание Еа и руководство: Одиночный удар. М.: Стандартинформ. 2006. 23 с.
13. ГОСТ РВ 20.57.305-98 Аппаратура, приборы, устройства и оборудование военного назначения. Методы испытаний на воздействие механических факторов. М.: Госстандарт России. 1998. 62 с.
14. ГОСТ РВ 20.39.304-98 Аппаратура, приборы, устройства и оборудование военного назначения. Требования стойкости к внешним воздействующим факторам. М.: Госстандарт России. 1995. 56 с.
15. Luan J.E. Analytical and Numerical Analysis of Impact Pulse Parameters on Consistency of Drop Impact Re-

sults / J.E. Luan, T.Y. Tee // 6-th Electronics Packaging Technology Conference, IEEE Cat. No. 04EX971. 2004.

16. Advanced Experimental and Simulation Techniques for Analysis of Dynamic Responses During Drop Impact / T.Y. Tee, J.E. Luan, E. Pek, C.T. Lim, Z.W. Zhong // 54-th ECTC Proc. 2004. P.1088-1094.

17. Современные средства дизайна и комплексного анализа конструкций радиоэлектронных модулей третьего уровня / П.В. Иевлев, А.В. Муратов, Т.Л. Тураева, А.В. Турецкий // Радиотехника. 2017. № 6. С. 153-159.

18. Динамика удара / Дж.А. Зукас, Т. Николас, Х.Ф. Свифт, Л.Б. Грешук, Д.Р. Курран. М.: Мир, 1985. 296 с.

19. Mechanical Dynamics Inc., Using ADAMS/Solver, Version 9.0.1, Ann Arbor, MI.1997. P. 327-329.

20. Mate N. U. Comparative Study of Impact Simulation Models for Linear Elastic Structures in Seismic Pounding / N.U. Mate, S. V. Bakre, O. R. Jaiswal // 15 WCEE, Lisboa, 2012. Код доступа:

http://www.iitk.ac.in/nicee/wcee/article/WCEE2012_1764.pdf
. Дата обращения 10.08.2017.

21. Пановко Я.Г. Введение в теорию механического удара. М.: Наука, 1977. 224 с.

22. Бойков В.Г. Ударные взаимодействия Код доступа: euler.ru/distr/euler/simulation/impacts.pdf. Дата обращения 10.08.2017.

23. Chanda A. The Application of the most suitable Impact Model(s) for simulating the Seismic Response of a Straight Bridge under Impact due to Pounding / A. Chanda, A. Banerjee, R. Das // International Journal of Scientific & Engineering Research. 2016. V. 7, Issue 2.

24. Numerical analysis of relaxation test based on Prony series material model / M. Mottahedi, A. Dadalau, A. Hafla, A. Verl // Preprint Series Issue N. 2009-1 Stuttgart Research Centre for Simulation Technology (SRC SimTech). P. 79-91.

25. Haupt N., Hildebrand M., Holmberg J., Kornis B., Newbauer S. Characterization of Elastomeric Isolators for Shock. 2009. V. 1. Код доступа: http://www.me.umn.edu/courses/me4054/archives/Examples_of_well_written_reports/SHOCK_Volume_I.pdf. Дата обращения 19.08.2017.

26. Electronic Box-level Reliability Assessment Using Computer Modeling and Simulation / A. C. Chiang, D. B. Barker, J. G. Krolewski, M. J. Cushing // Proceedings of Annual Reliability and Maintainability Symposium, 1995.

27. Zampino M.A. Vibration Analysis of an Electronic Enclosure Using Finite Element Method Conference. 1995. Код доступа:

https://www.researchgate.net/publication/3647766_Vibration_analysis_of_an_electronic_enclosure_using_finite_element_analysis
s. Дата обращения: 13.07.2017.

28. Veprik A.M., Babitsky V.I. Vibration protection of Sensitive Electronic Equipment from Harsh Harmonic Vibration. Код доступа: <http://booksc.org/g/Veprik>. Дата обращения: 13.07.2017.

29. He X. Modeling and Simulation of the Dynamic Response of the Electronic Packaging / X. He, R. Fulton // Electronic Components and Technology Conference. 2000.

Воронежский государственный технический университет
АО «Концерн «Созвездие», Воронеж

SIMULATION OF IMPACT TESTS IN ELECTRONICS IN ACCORDANCE WITH STATE STANDARDS

V.I. Borisov¹, P.V. Ievlev², A.V. Muratov³, T.L. Turaeva⁴, A.V. Turetskiy⁵

¹Full Doctor, Professor, Concern «Sozvezdie», Voronezh, Russian Federation
e-mail: bvi@sozvezdie.su

²Graduate Student, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: ievlev92@mail.ru

³Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: kipr@vorstu.ru

⁴PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: lturaeva@mail.ru

⁵PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: tav7@mail.ru

The requirements for physical and mathematical design models of structures are considered, as well as possible options for simplifying the models. A brief review of physical and mathematical shock impact models, which are of the greatest practical interest, is given. The classical Newton impact model, Kelvin - Voigt, Bingham, Maxwell and Hertz viscous-elastic models of impact force in the initial and modified versions are considered taking into account nonlinearity of the elastic and viscous components. Examples of the effective use of viscous-elastic models for solving practical problems of shock actions on radio electronic products are given. The main reasons for the discrepancy between the results of finite element modeling and the results of full-scale tests are named.

The results of model tests of the radio-electronic module (REM) of the third level in the design phase by three successive impacts with the peak acceleration of 25g and the duration of 11 msec are presented in accordance with the current state standard

Key words: modelling, impact, electronic modules

References

1. Suhir E. "Dynamic response of electronic systems to shocks and vibration: Application of analytical (mathematical) modeling", EPJ Web of Conferences 26, 05002 (2012), available at https://www.researchgate.net/publication/258643196_Dynamic_response_of_electronic_systems_to_shocks_and_vibrations_Application_of_analytical_mathematical_modeling
2. Steinberg D. "Vibration Analysis for Electronic Equipment", New York, 2000, 458 p.
3. Mathew S., Das D., Osterman M., Pecht M., Clayton J., Ferebee R.. "Virtual Remaining Life Assessment of Electronic Hardware Subjected to Shock and Random Vibration Life Cycle Loads", *Journal of the IEST*, April 2007, vol. 50, no. 1
4. Makarov O.Yu., Turetskiy A.V., Tsipina N.V., Shuvaev V.A. "Comprehensive approach in determining and optimizing the characteristics of RES in the design process", *Radiotekhnika*, 2016, no. 6, pp. 50-54.
5. Autekin B. "Vibration analysis of pcbs and electronic components", 2008, 135 p., available at etd.lib.metu.edu.tr/upload/3/12609444/index.pdf
6. Veprik A.M. "Vibration Protection of Critical Components of Electronic Equipment in Harsh Environmental Conditions", *Journal of Sound and Vibration*, 2003, vol. 259 (1), pp.161-175.
7. Bovsunovskiy A.B. "Mechanical analysis of the design of the on-board radioelectronic apparatus of space crafts. Abstract of a thesis of Doc. phys. sci. diss" ("Mekhanicheskiy analiz konstruktssii bortovoy radioelektronnoy apparatury kosmicheskikh apparatov. Avtoreferat diss. na soisk. uch. st. kand. fiz.-mat. nauk"), Tomsk, 2013, 26 p.
8. Aparnikov A.N. "Simulation of the effect of external mechanical loads on the design of the electronic module of the first level in the ANSYS software system" ("Modelirovaniye vozdeystviya vneshnikh mekhanicheskikh nagruzok na konstruktssiyu elektronnoy modulya pervogo urovnya v programmnoy sisteme ANSYS"), *Molodezhnyy nauchno – tekhnicheskyy vestnik*, 2015, no. 11, available at <http://sntbul.bmstu.ru/doc/823297.html>
9. Karpushin V.B. "Vibrations and impacts in radio equipment" ("Vibratsii i udary v radioapparature"), Moscow, Sovetskoye radio, 1971, 344 p.
10. McKeown S.A. "Mechanical Analysis of Electronic Packaging Systems", Marcel Dekker, Inc., 1999.
11. GOST R MEK 61587.1-2013. "Bearing basic constructions radio of electronic means. Part 1. Climatic, mechanical tests and types of safety for cabinets, racks, block frames and chassis", Moscow, Standartinform, 2014, 24 p., in Russian
12. GOST 28213-89. "Basic methods of testing for external factors. Part 2. Tests. Examination of Ea and manual: Single shick.", Moscow, Standartinform, 2006, 23 p., in Russian
13. GOST RV 20.57.305-98 "Equipment and devices for military use. Methods of testing for mechanical factors", Moscow, Gosstandart Rossii, 1998, 62 p., in Russian
14. GOST RV 20.39.304-98 "Equipment and devices for military use. Requirements for resistance to external factors", Moscow, Gosstandart Rossii, 1995, 56 p., in Russian
15. Luan J.E., Tee T.Y. "Analytical and Numerical Analysis of Impact Pulse Parameters on Consistency of Drop Impact Results", *6-th Electronics Packaging Technology Conference*, IEEE Cat., no. 04EX971, 2004.
16. Tee T.Y., Luan J.E., Pek E., Lim C.T., Zhong Z.W. "Advanced Experimental and Simulation Techniques for Analysis of Dynamic Responses During Drop Impact", *54-th ECTC Proc*, 2004, pp.1088-1094.
17. Ievlev P.V., Muratov A.V., Turaeva T.L., Turetskiy A.V. "Modern means of design and complex analysis of constructions of radio-electronic modules of the third level", *Radiotekhnika*, 2017, no. 6, pp. 153-159.
18. Zukas J.A., Nicholas T., Swift H., Greszczuk L., Curran D. "Impact Dynamics" ("Dinamika udara") Russ. ed., Moscow, Mir, 1985, 296 p.
19. Arbor A. "Mechanical Dynamics Inc., Using ADAMS/Solver, Version 9.0.", MI, 1997, pp. 327-329.
20. Mate N.U., Bakre S.V., Jaiswal O.R. "Comparative Study of Impact Simulation Models for Linear Elastic Structures in Seismic Pounding", 15 WCEE, Lisboa, 2012, available at http://www.iitk.ac.in/nicee/wcee/article/WCEE2012_1764.pdf
21. Panovko Ya.G. "Introduction into mechanical impact theory" ("Vvedeniye v teoriyu mekhanicheskogo udara"), Moscow, Nauka, 1977, 224 p.
22. Boykov V.G. "Shock interactions" ("Udarnyye vzaimodeystviya"), available at Euler.ru/distr/euler/simulation/impacts.pdf
23. Chanda A., Banerjee A., Das R. "The Application of the most suitable Impact Model(s) for simulating the Seismic Response of a Straight Bridge under Impact due to Pounding", *International Journal of Scientific & Engineering Research*, 2016, vol. 7, Issue 2.
24. Mottahedi M., Dadalau A., Hafila A., Verl A. "Numerical analysis of relaxation test based on Prony series material model", Preprint Series Issue no. 2009-1, Stuttgart Research Centre for Simulation Technology (SRC SimTech), pp. 79-91.
25. Haupt N., Hildebrand M., Holmberg J., Kornis B., Newbauer S. "Characterization of Elastomeric Isolators for Shock", 2009, vol. 1, available at http://www.me.umn.edu/courses/me4054/archives/Examples_of_well_written_reports/SHOCK_Volume_I.pdf
26. Chiang A.C., Barker D. B., Krolewski J. G., Cushing M. J. "Electronic Box-level Reliability Assessment Using Computer Modeling and Simulation", *Proceedings of Annual Reliability and Maintainability Symposium*, 1995.
27. Zampino M.A. "Vibration Analysis of an Electronic Enclosure Using Finite Element Method", *Conference*, 1995, available at https://www.researchgate.net/publication/3647766_Vibration_analysis_of_an_electronic_enclosure_using_finite_element_analysis
28. Veprik A.M., Babitsky V.I. "Vibration protection of Sensitive Electronic Equipment from Harsh Harmonic Vibration", available at <http://booksc.org/g/Veprik>
29. He X., Fulton R. "Modeling and Simulation of the Dynamic Response of the Electronic Packaging", *Electronic Components and Technology Conference*, 2000.

АЛГОРИТМ ЦИФРОВОЙ КОГЕРЕНТНОЙ ДЕМОДУЛЯЦИИ ДВОИЧНЫХ СИГНАЛОВ С ОФМ И ЕГО ПОМЕХОУСТОЙЧИВОСТЬ

А.Н. Глушков, Е.С. Герасименко

В статье рассмотрена проблема обработки сигналов и создания помехоустойчивой связи. Устойчивость к различным видам искажений, увеличение быстродействия и повышение помехозащищенности являются важными задачами, которые ставят перед разработчиками аппаратуры приема и обработки сигналов. В рамках исследования и предложения решения проблемы рассмотрен модернизированный алгоритм когерентной демодуляции сигналов. В тексте приведена структурная схема и рассмотрен принцип работы предлагаемого алгоритма цифровой когерентной демодуляции двоичных сигналов с относительной фазовой манипуляцией, обозначены его преимущества и недостатки относительно других известных алгоритмов. Произведено статистическое имитационное моделирование устройства, которое будет работать на основе предлагаемого алгоритма цифровой когерентной демодуляции двоичных сигналов с относительной фазовой манипуляцией. Для создания помехоустойчивой связи возможно использовать разработанные алгоритмы и соответствующее устройства когерентной цифровой демодуляции сигналов с двоичной фазовой манипуляцией и относительной фазовой манипуляцией. В результате моделирования проведена оценка помехоустойчивости когерентной демодуляции двоичных сигналов с относительной фазовой манипуляцией, доказано, что предлагаемый цифровой алгоритм демодуляции оказывается оптимальным. Определена вероятность ошибки цифровой демодуляции сигналов с четырехпозиционной относительной фазовой манипуляцией, показана высокая эффективность демодулятора при отсутствии явления «обратной работы»

Ключевые слова: алгоритм, когерентная демодуляция, относительная фазовая манипуляция

Введение. Проблема обработки сигналов и создание помехоустойчивой связи актуальна в системах радиосвязи. Устойчивость к различным видам искажений, увеличение быстродействия и повышение помехозащищенности являются важными задачами, которые ставят перед разработчиками аппаратуры приема и обработки сигналов.

Содержание работы. Структурная схема алгоритма когерентной демодуляции сигнала с относительной фазовой манипуляцией (ОФМ) показана на рис. 1. Информационный символ передается за счет разности фаз принимаемого и предшествующего элементов, равной 0 или π

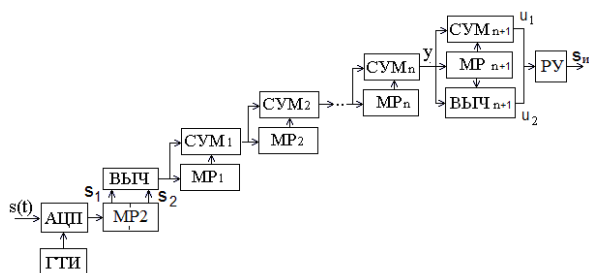


Рис. 1. Структурная схема алгоритма когерентной демодуляции сигнала с относительной фазовой манипуляцией

Основой демодулятора является базовый

алгоритм когерентной обработки сигнала с ОФМ. Значения его отклика y_i для принятого элемента длительностью N периодов складываются в блоке СУМ_{n+1} и вычитаются в блоке ВБГЧ_{n+1} со значением y_{i-N} для предшествующего элемента, записанным в многоразрядном регистре сдвига МР_{n+1} емкостью $(N-1)$ отсчетов. В результате

$$u_{1i} = y_{0i} + y_{0(i-N)} = \sum_{k=0}^{2N-1} (s_{1(i-k)} - s_{2(i-k)}), \quad (1)$$

$$u_{2i} = y_{0i} - y_{0(i-N)} = \sum_{k=0}^{N-1} (s_{1(i-k)} - s_{2(i-k)}) - \sum_{k=N}^{2N-1} (s_{1(i-k)} - s_{2(i-k)}) \quad (2)$$

Если фазы этих элементов одинаковы, на выходе сумматора СУМ_{n+1} в момент окончания символа накопится величина $u_1 = \pm 4NS$ (знак определяется значением обеих фаз 0 или π), а на выходе вычитателя ВБГЧ_{n+1} получим $u_2 = 0$. Если соседние элементы противофазны, то $u_1 = 0$ и $u_2 = \pm 4NS$ (фазы чередуются 0, π или π , 0). Зависимости нормированных значений u_1 и u_2 от номера символа k при отсутствии помех показаны на рис. 2, сплошная линия относится к u_1 , точечная линия — к u_2 , пунктиром показаны начальные фазы элементов, а точками отмечены моменты принятия решения.

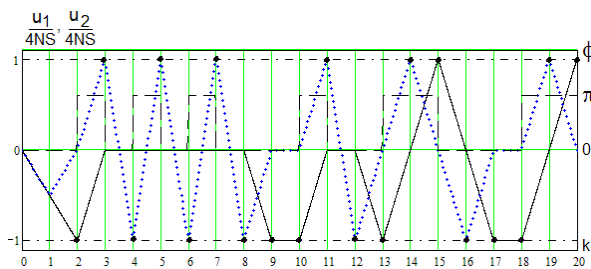


Рис. 2. Зависимости нормированных значений u_1 и u_2 от номера символа k при отсутствии помех

Разработанный алгоритм когерентной демодуляции позволяет различать все четыре возможных варианта изменения фазы для двух соседних символов, фактически реализуя их прием «в целом» [1]. В этом случае алгоритм работы решающего устройства (РУ) заключается в следующем: сравниваются модули u_1 и u_2 , и если $|u_1| \geq |u_2|$, то при $u_1 \geq 0$ фазы двух принятых равны 00, а иначе $\pi\pi$, а если $|u_1| < |u_2|$, то при $u_2 \geq 0$ фазы двух принятых равны 0 π , а иначе $\pi 0$.

Сигналы с ОФМ были предложены [2–4] как средство борьбы с обратной работой фазового демодулятора, и в этом случае необходимо определять модули величин u_1 и u_2 для формирования в РУ решения о наличии или отсутствии изменения фазы соседних элементов: если $|u_2| > |u_1|$, то принимается решение об изменении фазы на π , а в противном случае – об одинаковых фазах соседних информационных элементов.

На рис. 3 показаны полученные в результате статистического имитационного моделирования временные диаграммы u_1 и u_2 , аналогичные приведенным на рис. 2, при наличии шумовой помехи. Как видно из этих зависимостей, демодулятор оптимально сглаживает демодулированный сигнал и фильтрует шумовую помеху, что благоприятно сказывается на помехоустойчивости демодуляции.

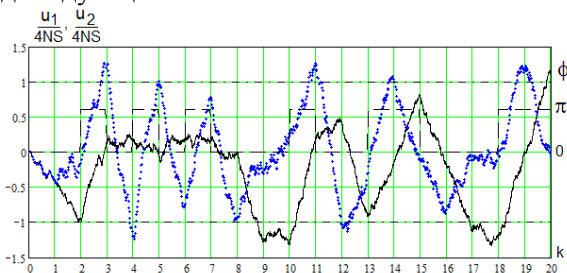


Рис. 3. Временные диаграммы результатов статистического имитационного моделирования u_1 и u_2

Определим помехоустойчивость алгоритма когерентной демодуляции двоичных сигналов с ОФМ, показанного на рис. 1. Как уже отмечалось, в демодуляторе имеется возможность принимать решения о фазах сразу двух принимаемых элементов. Для устранения явления обратной работы фазового демодулятора сигналов с ОФМ необходимо выявлять только совпадение или несовпадение фаз принятого и предшествующего элементов. Для этого необходимо определять модули величин u_1 и u_2 для формирования в решающем устройстве (РУ) (рис. 1) решения о наличии или отсутствии изменения фазы соседних элементов: если $|u_2| > |u_1|$, то принимается решение об изменении фазы на π , а в противном случае – об одинаковых фазах соседних информационных элементов.

При отсутствии сигнальной составляющей плотность вероятностей модуля отклика канала $z = |u|$ имеет вид

$$w_{III}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sigma} \cdot \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right], \quad z \geq 0, \quad (3)$$

а при ее наличии

$$w_0(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-\alpha)^2}{2\sigma^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+\alpha)^2}{2\sigma^2}\right] \right\}, \quad z \geq 0, \quad \alpha \geq 0, \quad (4)$$

при $a = 4NS$ и $\sigma = \sqrt{4N}\sigma_{III}$. В результате получим выражение для вероятности правильного определения наличия или отсутствия изменения фазы двух соседних информационных элементов

$$q_1 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + [\Phi(h)]^2 \right\} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + [\Phi(\sqrt{2}g)]^2 \right\}, \quad (5)$$

тогда вероятность ошибки приема элемента сигнала с ОФМ равна

$$P_{OШ \text{ ОФМ}} = 1 - \frac{1}{2} \left\{ 1 + [\Phi(\sqrt{2}g)]^2 \right\}. \quad (6)$$

Функции Крампа

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^x \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt \quad (7)$$

и Лапласа $F(x)$

$$F(h) = \int_{-\infty}^h \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{t^2}{2}\right] dt \quad (8)$$

связаны соотношением

$$\Phi(x) = 2F(x) - 1, \quad (9)$$

в результате для вероятности ошибки $P_{\text{ош оФМ}}$ приема сигнала с ОФМ с учетом выражения

$$P_{\text{ош}} = 1 - F(\sqrt{2}h), \quad (10)$$

для вероятности ошибки $P_{\text{ош фМ}}$ приема сигнала с двоичной ФМ получим:

$$P_{\text{ош оФМ}} = 2F(\sqrt{2}g)[1 - F(\sqrt{2}g)] \approx 2[1 - F(\sqrt{2}g)] = 2P_{\text{ош фМ}}. \quad (11)$$

Когерентный прием сигналов с ОФМ проигрывает сигналам с ФМ по вероятности ошибки примерно в два раза. Это известный результат, например [5], соответствующий оптимальной обработке сигнала с ОФМ, что свидетельствует об **оптимальности** предложенного алгоритма демодуляции.

Зависимость $P_{\text{ош оФМ}}$ от отношения сигнал/шум h (дБ) показана на рис. 4, пунктиром показана кривая $P_{\text{ош фМ}}$. Как видно, помехоустойчивость алгоритма демодуляции сигнала с ОФМ мало отличается от аналогичной характеристики для ФМ сигнала, но при этом у ОФМ отсутствует возможность обратной работы демодулятора.

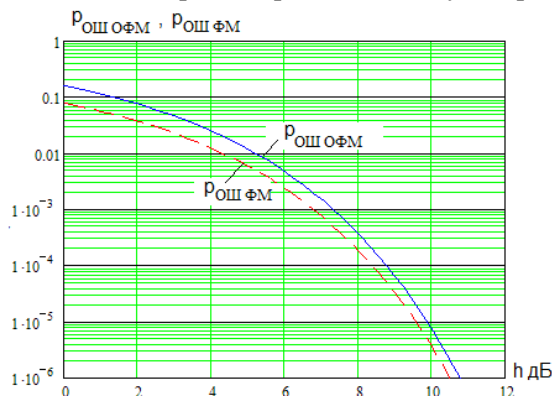


Рис. 4. Зависимость $P_{\text{ош оФМ}}$ от отношения сигнал/шум h

Базовый алгоритм когерентной обработки сигналов позволяет реализовать алгоритмы

демодуляции различных сигналов с фазовой манипуляцией. Он является универсальной алгоритмической основой для реализации демодуляторов на программной и аппаратной основе.

В качестве аппаратной основы для реализации предлагаемого алгоритма можно использовать:

- заказные специализированные цифровые сверхбольшие интегральные схемы (СБИС), спроектированные под конкретный алгоритм демодуляции;

- процессор цифровой обработки сигналов (цифровой сигнальный процессор – Digital Signal Processor – DSP) [6, 7] – микропроцессор, обеспечивающий поточный характер обработки данных в реальном времени, например процессоры серий TMS320;

- программируемые логические интегральные схемы (ПЛИС), например фирм Xilinx и Altera.

Заказные СБИС цифровой обработки сигналов имеют высокую стоимость, и их применение целесообразно при высокой серийности.

При использовании сигнальных процессоров алгоритм обработки реализуется программно в виде последовательности операций, что требует высокой скорости их выполнения. Процессоры TMS320C54xx имеют быстродействие до 200 MIPS при невысокой стоимости. Серия TMS320C6000 имеет высокое быстродействие как с фиксированной, так и с плавающей точкой. Примером могут служить процессоры TMS320C62x с фиксированной точкой и быстродействием 1600 MIPS и TMS320C67x с плавающей точкой и производительностью от 1000 MIPS. Разрядность обрабатываемых данных 32–48 бит, имеется возможность параллельной организации вычислений, однако они имеют высокую стоимость. Несмотря на высокую производительность сигнальных процессоров, программная реализация алгоритма обработки существенно ограничивает возможности процедур когерентной демодуляции в реальном времени на высоких частотах (до нескольких мегагерц).

Широкие возможности обеспечивает аппаратная реализация предлагаемого быстрого алгоритма цифровой обработки сигналов на современных ПЛИС [8-10], например фирмы Xilinx.

Заключение. Для создания помехоустойчивой связи возможно

использовать разработанные алгоритмы и соответствующее устройства когерентной цифровой демодуляции сигналов с двоичной ФМ и ОФМ. В результате моделирования проведена оценка помехоустойчивости когерентной демодуляции двоичных сигналов с ОФМ, доказано, что предлагаемый цифровой алгоритм демодуляции оказывается оптимальным. Определена вероятность ошибки цифровой демодуляции сигналов с четырехпозиционной ОФМ, показана высокая эффективность демодулятора при отсутствии явления «обратной работы».

Литература

1. Финк Л.М. Теория передачи дискретных сообщений / Л.М. Финк. – М.: Советское радио, 1970. – 728 с.
2. Окунев Ю.Б. Теория фазоразностной модуляции / Ю.Б. Окунев. – М.: Связь, 1979. – 216 с.
3. Петрович Н.Т. Передача дискретной информации в каналах с фазовой манипуляцией / Н.Т. Петрович. – М.: Сов радио, 1965. – 263 с.
4. Окунев Ю.Б. Цифровая передача информации фазомодулированными сигналами / Ю.Б. Окунев. – М.: Радио и связь, 1991. – 296 с.
5. Информационные технологии в радиотехнических системах: учеб. пособие / под ред. И.Б. Федорова. – Изд. 3-е, перераб. и доп. – М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. – 846 с.
6. Круг П.Г. Процессоры цифровой обработки сигналов: учеб. пособие / П.Г. Круг. – М.: Издательство МЭИ, 2001. – 128 с.
7. Богатырев Е.А. Энциклопедия электронных компонентов / Е.А. Богатырев, В.Ю. Ларин, А.Е. Лякин. – Т. 1. – М.: МАКРО ТИМ, 2003. – 224 с.
8. Максфилд К. Проектирование на ПЛИС / К. Максфилд. – М.: Издательский дом Додэка XXI, 2007. – 408 с.
9. Стещенко В.Б. ПЛИС фирмы Altera: элементная база, система проектирования и языки описания аппаратуры / В.Б. Стещенко. – М.: Издательский дом Додэка XXI, 2007. – 576 с.
10. Тарасов И.Е. Разработка цифровых устройств на основе ПЛИС Xilinx с применением языка VHDL / И.Е. Тарасов. – М.: Горячая линия – Телеком, 2005. – 252 с.
11. Герасименко Е.С. Алгоритм цифровой когерентной демодуляции фазоманипулированных сигналов и его характеристики / Е.С. Герасименко // Вестник Воронежского института МВД России. – 2017. – № 1. – С. 137-143.

Воронежский институт МВД России

ALGORITHM OF DIGITAL COHERENT DEMODULATION OF BINARY SIGNALS WITH DIFFERENTIAL PHASE KEYING AND ITS INTERFERENCE IMMUNITY

A.N. Glushkov¹, E.S. Gerasimenko²

¹PhD, Associate Professor, Voronezh Institute of the Ministry of Internal Affairs of the Russian Federation
e-mail: anglush@rambler.ru

²Post-graduate cadet, Voronezh Institute of the Ministry of Internal Affairs of the Russian Federation
e-mail: jenya35353@yandex.ru

The article deals with the problem of signal processing and creation of noise-immune communication. Proofness to various types of distortion, increase in speed and increase of noise immunity are important tasks that are put before the developers of the equipment for signals receiving and processing. Within the framework of the research and solving the problem, a modernized algorithm of coherent signal demodulation is considered. The text shows the block diagram and discusses the operation principle of the proposed algorithm for digital coherent demodulation of binary signals with differential phase-shift keying, its advantages and disadvantages are indicated with respect to other known algorithms. A statistical simulation of the device has been made, which will work on the basis of the proposed algorithm for digital coherent demodulation of binary signals with differential phase-shift keying. The developed algorithms and the corresponding device for coherent digital demodulation of signals with binary phase-shift keying and differential phase-shift keying can be used to create an interference-proof connection. As a result of the simulation, an estimation of noise immunity of coherent demodulation of binary signals with differential phase-shift keying has been carried out, it is shown that the proposed digital demodulation algorithm proves to be optimal. The probability of an error of the digital demodulation of signals with four-position differential phase-shift keying is determined, the high efficiency of the demodulator is shown in the absence of the phenomenon of "sign ambiguity"

Key words: algorithm, coherent demodulation, differential phase-shift keying

References

1. Fink L.M. "Theory of transmission of discrete messages" ("Teoriya peredachi diskretnykh soobshcheniy"), Moscow, Sovetskoe radio, 1970, 728 p.
2. Okunev Yu.B. "Theory of phase-difference modulation" ("Teoriya fazoraznostnoy modulyatsii"), Moscow, Svyaz', 1979, 216 p.

3. Petrovich N.T. "Transmission of discrete information in channels with phase-shift keying" ("Peredacha diskretnoy informatsii v kanalakh s fazovoy manipulyatsiey"), Moscow, Sov. Radio, 1965, 263 p.
4. Okunev, Yu.B. "Digital transmission of information with phase-modulated signals" ("Tsifrovaya peredacha informatsii fazomodulirovannymi signalami"), Moscow, Radio i Svyaz', 1991, 296 p.
5. Fedorov I.B. "Information technology in radio engineering systems: Manual" ("Informatsionnye tekhnologii v radiotekhnicheskikh sistemakh: ucheb. posobie"), Moscow, Bauman MSTU, 2011, 846 p.
6. Krug P.G. "Processors of digital signal processing: Manual" ("Protsessory tsifrovoy obrabotki signalov: ucheb. posobie"), Moscow, Publishing house MEI, 2001, 128 p.
7. Bogatyrev E.A., Larin V.Yu., Lyakin A.E. "Encyclopedia of electronic components" ("Entsiklopediya elektronnykh komponentov"), vol. 1, Moscow, MACRO TEAM, 2003, 224 p.
8. Maxfield C. "The Design Warrior's Guide to FPGA's" ("Proektirovanie na PLIS"), Moscow, Publishing house Dodeka XXI, 2007, 408 p.
9. Steshenko V.B. "FPGA Alterra: element base, system design languages and hardware description" ("PLIS firmy Alterra: elementnaya baza, sistema proektirovaniya i yazyki opisaniya apparatury"), Moscow, Publishing house Dodeka XXI, 2007, 576 p.
10. Tarasov I.E. "Development of digital devices based on FPGA Xilinx using VHDL language" ("Razrabotka tsifrovyykh ustroystv na osnove PLIS Xilinx s primeneniym yazyka VHDL"), Hotline–Telecom, 2005, 252 p.
11. Gerasimenko E.S. "Algorithm for digital coherent demodulation of phase-shift keyed signals and its characteristics", *Vestnik of Voronezh Institute of the Ministry of Internal Affairs of the Russian Federation*, 2017, no. 1, pp. 137-143.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАНГОВОГО АЛГОРИТМА ОБНАРУЖЕНИЯ СИГНАЛА С ППРЧ

П.Е. Бизюков, В.П. Литвиненко, Ю.В. Литвиненко

Рассматриваются ранговый алгоритм обнаружения сигнала с псевдослучайной перестройкой рабочей частоты (ППРЧ) и влияние параметров сигнала на его характеристики. Предлагаемый алгоритм является непараметрическим, базируется на критерии среднего ранга и требует минимальной априорной информации о параметрах обнаруживаемого сигнала. Определены статистические характеристики рангов. В пакете MATLAB разработана программа статистического имитационного моделирования, позволяющая исследовать свойства алгоритма обнаружения и оценивать вероятности ложной тревоги и пропуска сигнала. Приведены графики, иллюстрирующие процедуру нахождения общего минимального среднего ранга. Получены рекомендации по нахождению значения оптимального порога обнаружения сигнала, исследована его зависимость от параметров сигнала. Определено влияние длительности сигнала с ППРЧ на достоверность его обнаружения, показано, что увеличение времени обнаружения приводит к уменьшению вероятности ошибки. Рассмотрено влияние длительности отдельного элемента сигнала с ППРЧ на значения вероятностей ошибок и на величину порога принятия решения. Показано, что ее уменьшение приводит к возрастанию вероятности ошибки и уменьшению величины оптимального порога

Ключевые слова: ранговый алгоритм, псевдослучайная перестройка рабочей частоты (ППРЧ), обнаружение сигналов, моделирование, MATLAB

Введение. В современных системах передачи информации (СПИ) применяются сигналы с псевдослучайной перестройкой рабочей частоты (ППРЧ или FHSS) [1-4]. Такие сигналы позволяют добиться высокой энергетической скрытности за счет использования большого числа M несущих частот, между которыми передатчик переключается в соответствии с псевдослучайной последовательностью, известной как на приемной, так и на передающей стороне.

Актуальной является задача установления факта появления такого сигнала в заданной группе частот. Применение известных [5] параметрических методов энергетического обнаружения для сигнала с ППРЧ практически ограничено в силу кратковременности его нахождения на одной из несущих частот и отсутствия информации о параметрах сигнала и помех. Поэтому целесообразно использовать непараметрический ранговый алгоритм обнаружения [4].

Ранговый алгоритм обнаружения. Для обнаружения сигналов с ППРЧ используется M -канальный приемник, структурная схема которого показана на рис. 1.

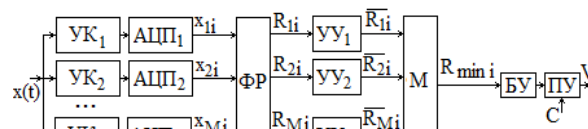


Рис. 1. Структурная схема обнаружителя

Смесь сигнала с ППРЧ и помехи $x(t)$ поступает параллельно на входы узкополосных частотных каналов ($УК_1 - УК_M$), на выходах которых выделяются отклики частотных позиций сигнала с ППРЧ, поступающие на входы аналого-цифровых преобразователей ($АЦП_1 - АЦП_M$), формирующих с частотой квантования $f_{кв}$ отсчеты x_{mi} , $m = \overline{1, M}$ - номер канала, i - номер отсчета в выборке объема N , $i = \overline{1, N}$.

В формирователе рангов (ФР) в i -й момент времени модули отсчетов $|x_{mi}|$ ранжируются (располагаются по мере уменьшения). Первому (максимальному) из них присваивается ранг 0, следующему – ранг 1, а последнему – ранг $(M - 1)$. В результате формируется вектор рангов R_{mi} .

В устройствах усреднения вычисляются средние значения $\overline{R_{mi}}$ рангов для N_1 последних принятых отсчетов:

$$\overline{R_{mi}} = \frac{1}{N_1} \sum_{k=0}^{N_1-1} R_{m(i-k)} \quad (1)$$

Малые значения среднего ранга $\overline{R_{mi}}$ являются признаком наличия сигнала с ППРЧ в m -м частотном канале в i -й момент времени. Величина N_1 должна согласовываться с числом отсчетов N_0 , которое укладывается на интер-

Бизюков Павел Евгеньевич - ВГТУ, студент, тел. 8-915-589-17-53, e-mail: bpe.work@gmail.com
Литвиненко Владимир Петрович – ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, тел. 473 271-44-57, e-mail: litvinvp@gmail.com
Литвиненко Юлия Владимировна – ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, тел. 8-920-210-24-61, e-mail: jvlitvinenko@yandex.ru

вале времени t_0 нахождения сигнала на частотной позиции

$$t_0 = N_0 / f_{\text{кв}}, \quad (2)$$

величина $1/t_0$ определяет скорость перестройки сигнала.

Для уверенного обнаружения сигнала с ППРЧ требуемое для этого время $T_{\text{обн}} \gg t_0$ и необходимо объединять минимальные значения средних рейтингов (1) по всем рабочим частотам. В результате получим минимальный средний ранг по выборке из N отсчетов в виде

$$R_{\min} = \frac{1}{N} \sum_i \min \{R_{mi}\}, \quad (3)$$

$$T_{\text{обн}} = N \cdot t_0. \quad (4)$$

Решение о наличии сигнала с ППРЧ принимается при условии

$$R_{\min} < C, \quad (5)$$

где C - порог, определяющий вероятности ложной тревоги $P_{\text{лт}}$ и пропуска сигнала $P_{\text{пр}}$.

Положим, что в каждом из M частотных каналов присутствует аддитивная шумовая помеха с плотностью вероятностей $w_{\text{ш}}(x)$ и функцией распределения вероятностей $F_{\text{ш}}(x)$. Пусть в данный момент времени сигнал в виде случайного процесса присутствует в k -м частотном канале и имеет одномерную плотность вероятностей $w_c(x)$ (функцию распределения вероятностей $F_c(x)$).

Свойства рангов. Распределение вероятностей $P_k(R)$ рангов R в k -м канале при наличии сигнала определяется следующим выражением

$$P_k(R) = \binom{M-1}{R} \cdot \int_0^\infty F_{\text{ш}}(x)^{M-R-1} \times \\ \times (1 - F_{\text{ш}}(x))^R \cdot w_c(x) dx. \quad (6)$$

Распределение вероятностей рангов $P_j(R)$ для j -го канала без сигнала ($k \neq j$) имеет вид

$$P_j(R) = \int_0^\infty (F_{\text{ш}}(x))^{M-1} \cdot F_c(x) \cdot w_{\text{ш}}(x) dx. \quad (7)$$

В случае отсутствия сигнала с ППРЧ каналы находятся в равных условиях, а значит, значение ранга в каждом канале равновероятно:

$$P_k(R) = P_j(R) = \frac{1}{M}. \quad (8)$$

На рис. 2 и рис. 3 показаны распределения вероятностей рангов в канале с сигналом и без сигнала соответственно при $M = 16$ и отношении сигнал/шум $h^2 = 10$, пунктиром показано

распределение вероятностей рангов при отсутствии сигнала с ППРЧ.

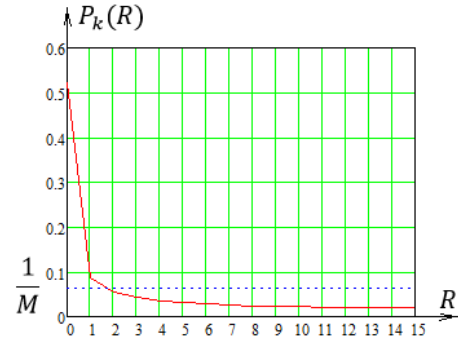


Рис. 2. Распределение вероятностей рангов в частотном канале при наличии сигнала

Наличие сигнала в каком-либо канале приводит к повышению вероятности малых рангов, что и используется для обнаружения сигналов с ППРЧ.

В соответствии с [4] порог решающей статистики удовлетворяет условию

$$R_{k_{\text{cp}}} < C < R_{j_{\text{cp}}}, \quad (9)$$

где

$$R_{k_{\text{cp}}} = (M-1) \cdot \int_0^\infty (1 - F_{\text{ш}}(x)) \cdot w_c(x) dx, \quad (10)$$

$$R_{j_{\text{cp}}} \approx \frac{M-1}{2}. \quad (11)$$

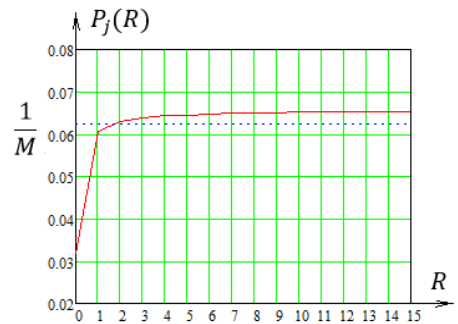


Рис. 3. Распределение вероятностей рангов в частотном канале при отсутствии сигнала

Как видно, значение среднего ранга $R_{j_{\text{cp}}}$ (11) практически не зависит от параметров сигнала и помехи. На рис. 4 показаны зависимости средних значений рангов $R_{k_{\text{cp}}}$ и $R_{j_{\text{cp}}}$ от отношения сигнал/шум h^2 при $M = 256$.

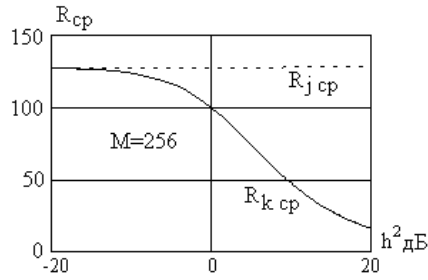


Рис. 4. Зависимость средних рангов от отношения сигнал/шум

Как видно, имеется возможность принимать достоверные решения при $h^2 > 15 \div 20$ дБ.

Оптимальное значение порога C может быть найдено с помощью критерия идеального наблюдателя, приняв в качестве меры достоверности обнаружения вероятность ошибки P , определяемую из равенства вероятности пропуска сигнала $P_{\text{пр}}$ и вероятности ложной тревоги $P_{\text{лт}}$:

$$P = P_{\text{пр}} = P_{\text{лт}}. \quad (12)$$

Моделирование рангового алгоритма обнаружения. В математическом пакете MATLAB [6] разработана программа статистического имитационного моделирования рангового алгоритма обнаружения сигнала с ППРЧ. Для модели входными данными являются отношение сигнал/шум, длительность элемента сигнала с ППРЧ в числе отсчетов N_0 , число моделируемых каналов M . На рис. 5 представлен пример работы моделирующей программы.

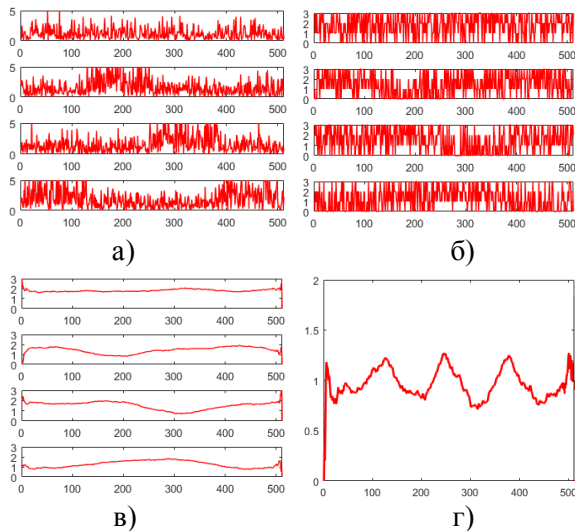


Рис. 5. Пример моделирования рангового алгоритма обнаружения

На рис. 5а показаны зависимости модулей смеси сигнала и шума в виде гауссовских случайных процессов с различной дисперсией от номера отсчета для $M = 4$ частотных каналов,

на рис. 5б изображена зависимость мгновенных значений ранга в каждом из моделируемых каналов, на рис. 5в представлены зависимости усредненных рангов в каждом канале, а на рис. 5г показан объединённый по всем каналам минимальный средний ранг R_{min} . Как видно, появление сигнала в частотном канале приводит к снижению среднего ранга, а величина R_{min} позволяет принимать решение о присутствии сигнала с ППРЧ.

Для определения оптимального порога C обнаружения рангового алгоритма использовались следующие параметры модели: число каналов M равное 32, 128, отношение сигнал/шум $h^2 = 24$, длительность одного элемента ППРЧ $N_0 = 32$ отсчета, число повторений 2000. Полученные зависимости показаны на рис. 6 при времени обнаружения $T_{\text{обн}} = M \cdot N_0$.

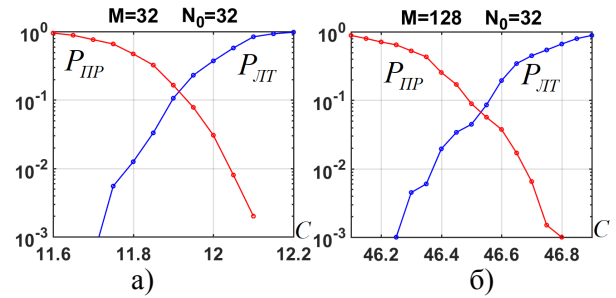


Рис. 6. Вероятности $P_{\text{пр}}$ и $P_{\text{лт}}$

Сравнивая зависимости на рис. 6, можно увидеть, что значение порога обнаружения, определяемое точкой пересечения $P_{\text{пр}}$ и $P_{\text{лт}}$, пропорционально верхней границе условия (9)

$$C = \alpha \cdot \frac{M-1}{2}, \quad (13)$$

где множитель $\alpha \approx 0,755$ определен по результатам моделирования.

Результаты моделирования для увеличенного времени обнаружения $T_{\text{обн}} = 4M \cdot N_0$ при $N_0 = 32$, $M = 32$ и $M = 128$ для отношения сигнал/шум $h^2 = 24$ представлены на рис. 7.

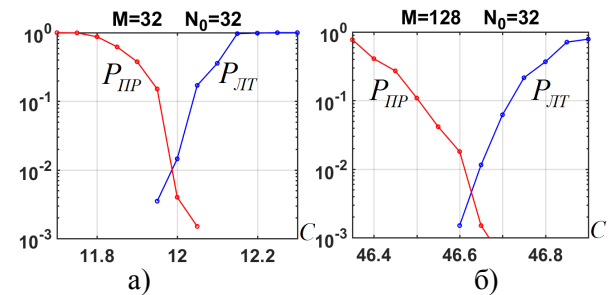


Рис. 7. Исследование влияния длительности обнаружения $T_{\text{обн}}$ сигнала

Из сравнения рис. 6 и рис. 7 следует, что увеличение времени обнаружения сигнала с ППРЧ приводит к значительному уменьшению вероятности ошибки.

Проведен анализ влияния длительности N_0 элемента сигнала с ППРЧ на величины порога и вероятности ошибки при $N_0 = 32$ и $N_0 = 64$ отсчета и числе каналов равном $M = 128$, отношении сигнал/шум $h^2 = 24$, полученные зависимости приведены на рис. 6б и рис. 8а. Как видно, при увеличении длительности отдельного элемента вероятность ошибки P (12) уменьшается, а величина оптимального порога увеличивается. Выбранные значения N_0 соответствуют быстрой ППРЧ, при уменьшении скорости перестройки эффективность рангового алгоритма обнаружения существенно повышается.

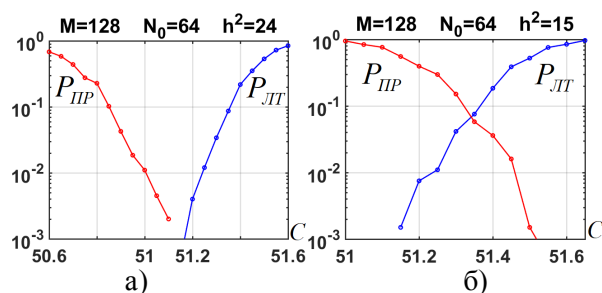


Рис. 8. Исследование влияния отношения сигнал/шум h^2

Рассмотрено влияние на характеристики обнаружения отношения сигнал/шум h^2 . На рис. 8б показаны зависимости P_{PP} и P_{LT} от порога C при $M = 128$, $N_0 = 64$ и $h^2 = 15$. Как видно на рис. 8, наблюдается повышение вероятности ошибки и небольшое увеличение оп-

тимального порога, при этом остается справедливой оценка (13).

Вывод. В ходе исследования была разработана программа, которая моделирует ранговый алгоритм обнаружения сигнала с ППРЧ. Определен коэффициент α , позволяющий при применении данного алгоритма на практике выбрать оптимальное значение порога, в соответствии с которым и будет приниматься решение о наличии или отсутствии сигнала. Проведено исследование влияния увеличения длительности обнаружения сигнала при различном числе каналов, которое приводит к уменьшению вероятности ошибки P . Также было показано, что с уменьшением длительности ППРЧ элемента и отношения сигнал/шум вероятность ошибки P возрастает.

Литература

1. Борисов В.И. Помехозащищенность систем радиосвязи с расширением спектра сигналов методом псевдослучайной перестройки рабочей частоты / В.И. Борисов. - М.: Радио и связь, 2000. - 384 с.
2. Обухов А.Н. Частотно-временные аспекты защиты информации в системах радиосвязи / А.Н. Обухов. - М.: Экслибрис-Пресс, 2008. - 212 с.
3. Макаренко С.И. Помехозащищенность систем связи с псевдослучайной перестройкой рабочей частоты: монография / С.И. Макаренко, М.С. Иванов, С.А. Попов. - СПб.: Свое издательство, 2013. - 166 с.
4. Литвиненко В.П. Энергетическая скрытность сигналов и защищенность радиопередачи: учеб. пособие / В.П. Литвиненко. - Воронеж: ВГТУ, 2009. - 166 с.
5. Обнаружение радиосигналов/ под ред. А.А. Колосова. - М.: Радио и связь, 1989. - 288 с.
6. Дьяконов В.П. MATLAB и SIMULINK для радиоинженеров / В.П. Дьяконов. - М.: ДМК Пресс, 2011. - 976 с.

Воронежский государственный технический университет

INVESTIGATION OF THE RANK-ALGORITHM OF FHSS DETECTION

P.E. Bizyukov¹, V.P. Litvinenko², Yu.V. Litvinenko³

¹Student, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: bpe.work@gmail.com

²PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: litvinvp@gmail.com

³PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: jvilitvinenko@yandex.ru

The article considers the ranking algorithm for detecting a signal with frequency-hopping spread spectrum (FHSS) and the effect of signal parameters on its characteristics. The proposed algorithm is non-parametric, bases on a criterion of average rank and requires minimal a priori information about the parameters of the detected signal. The statistical characteristics of

ranks are determined. A program of statistical simulation is developed using the package MATLAB, which allows to research the properties of the detection algorithm and to estimate the probabilities of false alarm and signal skipping. The graphs illustrating the procedure for finding the common minimum average rank are given. Recommendations for finding the value of the optimal threshold of signal detection are obtained; and the threshold's dependence on the signal parameters is investigated. The influence of the duration of the signal with FHSS on the reliability of its detection is determined; it is shown that increasing the detection time leads to a decrease in the probability of an error. The effect of the duration of an individual element of a signal with FHSS on the values of error probabilities and on the value of the decision threshold is considered. It is shown that its decrease leads to an increase in the error probability and a decrease in the value of the optimal threshold

Key words: ranking algorithm, frequency-hopping spread spectrum (FHSS), signal detection, modeling, MATLAB

References

1. Borisov V.I. "The noise immunity of radio communication systems with expansion of the range of signals by the method FHSS" ("Pomekhozashchishchennost' sistem radiosvyazi s rasshireniyem spektra signalov metodom psevdosluchaynoy perestroyki rabochey chastoty"), Moscow, Radio i svyaz', 2000, 384 p.
2. Obukhov A.N. "Time-frequency aspects of information protection in telecommunication systems" ("Chastotno-vremennyye aspekty zashchity informatsii v sistemakh radiosvyazi"), Moscow, Ekslibris-Press, 2008, 212 p.
3. Makarenko S.I. "Noise immunity of communication systems with FHSS. Monograph" ("Pomekhozashchishchennost' sistem svyazi s psevdosluchaynoy perestroykoy rabochey chastoty. Monografiya"), Saint-Petersburg, Svoye Izdatel'stvo, 2013, 166 p.
4. Litvinenko V.P. "Energy security of signals and protection of radio lines: manual." ("Energeticheskaya skrytnost' signalov i zashchishchennost' radioliny: ucheb. posobiye"), Voronezh, VSTU, 2009, 166 p.
5. Kolosov A.A. "Detection of radio signals" ("Obnaruzheniye radiosignalov"), Moscow, Radio i svyaz', 1989, 288 p.
6. D'yakonov V.P. "MATLAB and SIMULINK for radio engineers" ("MATLAB i SIMULINK dlya radioinzhenerov"), Moscow, DMK Press, 2011, 976 p.

МОДЕЛЬ СОСТОЯНИЙ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ ПРИ ОЦЕНКЕ ОПТИЧЕСКОЙ ЗАМЕТНОСТИ НАЗЕМНЫХ ОБЪЕКТОВ В ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНЕ ДЛИН ВОЛН

В.Г. Керков, В.Д. Мочалин, Г.Л. Тюрин

Статья посвящена исследованию и выявлению закономерностей влияния различных состояний внешней среды на оценку оптической заметности наземных объектов в инфракрасном диапазоне длин волн и обоснованию модели состояний внешней среды, позволяющей проводить оценку максимальных значений абсолютного теплового контраста объекта по совокупности возможных состояний внешней среды.

Разработка данной модели определена необходимостью сокращения объема измерений, обусловленных большим количеством учитываемых параметров и характеристик внешней среды, изменяющихся в зависимости от состояния атмосферы, времени суток и времени года.

Для обоснования минимального количества состояний внешней среды, в которых наблюдаются экстремальные значения разности радиационных температур независимо от значений характеристик объектов, исследованы закономерности влияния различных состояний внешней среды на оптическую заметность наземных объектов в инфракрасном диапазоне длин волн. Выделены четыре группы состояний внешней среды, гарантирующих отыскание экстремумов контраста элементов поверхности объектов на множестве состояний внешней среды. Эта гарантия обеспечивается максимальным, при прочих равных условиях, отличием контраста элементов поверхности объекта при максимальной и минимальной облачности и учетом всех возможных качественных соотношений характеристик внешней среды.

Рассчитаны значения характеристик внешней среды, обеспечивающие оценки экстремальных по совокупности ее состояний величин контрастов элементов поверхности объекта

Ключевые слова: модель состояний внешней среды, оптическая заметность, тепловой контраст, распределение температур

Введение. Оценка оптической заметности (ОЗ) наземных объектов в инфракрасном диапазоне длин волн в различных условиях наблюдения часто затруднена большим количеством учитываемых параметров и характеристик внешней среды, изменяющихся в зависимости от состояния атмосферы, времени суток, года [1-3]. Декомпозиция возможных состояний внешней среды позволяет оценивать ОЗ объектов не на всем множестве ее возможных состояний, а в наименее благоприятных для скрытия образцов условиях их наблюдения [4]. При таком подходе обеспечивается получение гарантированных оценок ОЗ по совокупности возможных состояний внешней среды.

Традиционными методами оптимизации эту задачу решить невозможно, так как значения параметров внешней среды взаимозависимы, а описание этой зависимости ограничено небольшим объемом экспериментальных данных. Одним из путей ее решения является обоснование минимального количества состояний внешней

среды, в которых наблюдаются экстремальные значения разности радиационных температур независимо от значений характеристик объектов.

Целью настоящей работы является разработка модели состояний внешней среды, позволяющей получать оценки максимальных значений абсолютного теплового контраста объекта по совокупности возможных состояний внешней среды.

Основное содержание работы. Для обоснования способа разбиения множества всех возможных состояний внешней среды рассмотрим ее с позиций системотехники. В соответствии со сложившейся в системотехнике терминологией внешняя среда является сложной системой, имеющей автономную пространственно-временную метрику, которая, в свою очередь, определяет возможные способы декомпозиции системы [5,6].

Система «подстилающая поверхность-атмосфера» в полном объеме может быть описана в реальном времени и пространстве. Однако в данном случае нас интересует относительно небольшая часть параметров внешней среды, что обуславливает возможность перехода от реального к функциональному пространству. Физический смысл такого перехода состоит в следующем.

Из метрологии известно, что интересующие нас характеристики периодически изменя-

Керков Владимир Георгиевич – ВУНЦ ВВС «ВВА им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», канд. техн. наук, старший научный сотрудник, тел. 8-980-556-19-71

Мочалин Виктор Дмитриевич – ГНИИИ ПТЗИ ФСТЭК России, старший научный сотрудник, тел. 8-980-345-57-20
Тюрин Герман Леонидович – ВУНЦ ВВС «ВВА им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», канд. техн. наук, начальник отдела, тел. 8-908-139-57-58, e-mail: gertyr@yandex.ru

ются во времени (в течение времени суток, года) и зависят от состояния атмосферы. Используя тот факт, что различные состояния атмосферы (наличие туманов, облачности и т.п.) случайны во времени, будем рассматривать временную зависимость характеристик внешней среды при фиксированных состояниях атмосферы. Такое представление, очевидно, не позволяет исследовать динамику изменения состояния внешней среды, что в данном случае и не требуется, но значительно упрощает решение поставленной задачи.

Наличие облачности, туманов, дымки и т.д. в атмосфере формально можно описать ее прозрачностью для солнечного излучения и собственного излучения подстилающей поверхности. Наиболее существенное влияние на прозрачность атмосферы в этом смысле оказывает облачность, поэтому для установления метрики функционального пространства состояния атмосферы целесообразно характеризовать количеством облаков, т.е. долей обозреваемой площади, занятой облаками. Наиболее часто оно оценивается в баллах [7].

Таким образом, внешнюю среду, применительно к решаемой задаче, целесообразно исследовать в реальном времени и функциональном пространстве, представляющем собой совокупность возможных состояний атмосферы, характеризующихся ее облачностью.

В соответствии с предложенной метрикой системы очевидны возможные способы ее декомпозиции: по времени суток, года и по состоянию облачности в баллах (n). В этом случае для каждого значения облачности (в баллах) множество состояний внешней среды разбивается на подмножества, характеризующихся качественно однородными в пределах каждого из них соотношениями ее параметров (рис. 1).

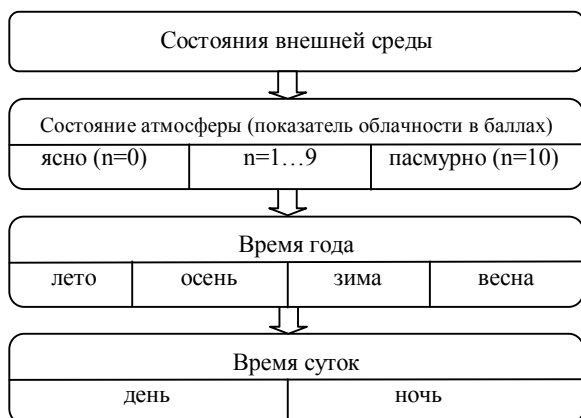


Рис. 1. Возможные состояния внешней среды

Поведем анализ влияния характеристик внешней среды на контраст объектов (ΔT) в зависимости от состояния атмосферы, времени

суток, года. Значения коэффициента теплоотдачи (α) для неподвижных объектов примем равным $\alpha=10 \text{ Вт/м}^2\text{К}$, что соответствует отсутствию ветра и обеспечивает пессимистическую оценку экстремумов контраста поверхностей объекта. Средние значения коэффициента излучения фона (подстилающей поверхности) $\epsilon_{\text{ф}}=0,95$ [8]. На основе этого анализа сформулированы следующие выводы.

1. На состояния внешней среды, с точки зрения качественных соотношений ее параметров, наиболее существенно влияет количество облаков. При сплошной облачности ($n=10$), солнечная радиация в значительной степени экранируется облаками, причем между подстилающей поверхностью и слоем облаков образуется частично замкнутая система, характеризующаяся примерно равномерным распределением в ней температуры. При этом характеристики внешней среды определяются значением температуры фона ($T_{\text{ф}}$) независимо от времени суток и года, т.е. $T_{\text{ф}} \cong T_{\text{а}}$, где $T_{\text{а}}$ – температура атмосферы.

2. Уменьшение количества облаков $n \leq 9$ сопровождается снижением их экранирующего эффекта, что обуславливает нарушение указанных выше качественных соотношений между параметрами внешней среды, причем наибольшие их количественные отличия, при прочих равных условиях, имеют место при ясной погоде ($n=0$). В этом случае в дневное время суток поток солнечной радиации $E_{\text{с}} > 0$ максимален, а разность температур атмосферы и фона $\Delta T < 0$ и облученность элементов поверхности объекта (ЭПО) и фона в ИК диапазоне длин волн максимальны. В ночное время суток $E_{\text{с}} = 0$, разность температур атмосферы и фона $\Delta T > 0$ максимальна, а облученность в ИК диапазоне спектра минимальна. Снижение облученности ЭПО и фона в ИК диапазоне длин волн при ясной погоде ($n=0$) обусловлено отсутствием облаков, являющихся достаточно мощным источником ИК излучения. Перечисленные изменения характеристик внешней среды при уменьшении n воздействуют на контраст ЭПО в противоположных направлениях: возрастание $E_{\text{с}}$ и ΔT увеличивают его, а уменьшение облученности внешней среды E – уменьшают, причем преобладание той или иной тенденции зависит от значения коэффициента излучения (ϵ) ЭПО. Однако при любом ϵ максимальное отличие контраста ЭПО при прочих равных условиях наблюдается при $n=0$ и $n=10$, а значения коэффициента ϵ влияют на абсолютное значение и

знак разности контрастов поверхности объекта в этих условиях: при небольшом ε контраст ЭПО при $n=0$ меньше, чем при $n=10$, при большом – наоборот. Это обусловлено тем, что при $\varepsilon \rightarrow 0$ основное влияние на контраст ЭПО оказывает их облученность E_i в исследуемых спектральных диапазонах, а при $\varepsilon \rightarrow 1$ – изменение температуры ЭПО.

3. При $n < 10$ особенностью с точки зрения качественного соотношения параметров внешней среды обладает период таяния снега и льда весной, когда при наличии значительного потока солнечной радиации $E_c > 0$ температура фона и атмосферы примерно одинаковы и равны 273 К. Вследствие этого указанное состояние внешней среды целесообразно рассматривать отдельно.

Таким образом, в интересах оценки оптической заметности наземных объектов ВВТ в ИК диапазоне длин волн, целесообразно выделить 4 группы состояний внешней среды, гарантирующих отыскание экстремумов контраста ЭПО на множестве состояний внешней среды (рис. 2). Эта гарантия обеспечивается максимальным, при прочих равных условиях, отличием контраста ЭПО при $n=0$ и $n=10$ и учетом всех возможных качественных соотношений характеристик внешней среды. Постоянство этих соотношений в каждом из выделенных подмножеств обеспечивает, в свою очередь, постоянство тенденций изменения контраста ЭПО при изменении их характеристик, что существенно упрощает поиск состояний внешней среды, дающих экстремальные значения контраста ЭПО в каждой группе ее состояний. С этой целью рассмотрим более подробно каждое выделенное из подмножеств состояний внешней среды (V_k).

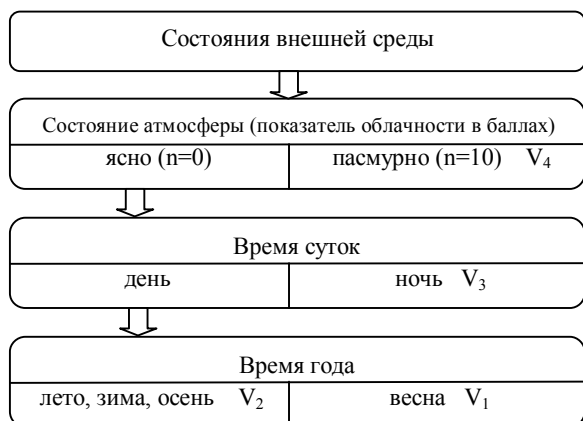


Рис. 2. Ограничение числа возможных состояний внешней среды

При сплошной облачности (V_4) контраст ЭПО зависит в основном от мощности внутренних источников теплоты. В этом случае уравнение теплового баланса элемента поверхности объекта можно представить в виде

$$\alpha(T_o - T_\phi) + \varepsilon_o \sigma(T_o^4 - \varepsilon_\phi T_\phi^4) = P_{вн}, \quad (1)$$

где α – коэффициент конвективной теплоотдачи, T_o , T_ϕ – температуры объекта и фона, ε_o , ε_ϕ – коэффициенты излучения объекта и фона, $P_{вн}$ – тепловой поток через поверхность ЭПО, обусловленный внутренними источниками, σ – постоянная Стефана – Больцмана.

Если не учитывать нелинейный член в уравнении (1), температурный (а значит, и радиационный) контраст объекта $\Delta T = T_a - T_\phi$ при изменении температуры фона и неизменном потоке $P_{вн}$ мощности внутренних источников теплоты остается постоянным. Наличие нелинейного члена приводит к тому, что при сохранении постоянства левой части уравнения (при увеличении температуры фона), температура объекта должна увеличиваться в меньшей степени. Следовательно, максимальный и минимальный контраст ЭПО будут иметь место, соответственно, при минимальной ($T_\phi \approx 258$ К) и максимальной ($T_\phi \approx 293$ К) температуре фона в рассматриваемых условиях.

В ночное время суток при безоблачной атмосфере (V_3) разность температур атмосферы и фона $\Delta T = T_a - T_\phi$ после захода солнца изменяется примерно от нуля до максимального значения, а облученность ЭПО излучением атмосферы, вследствие ее более низкой излучательной способности, меньше энергетической светимости фона. Рост температуры фона сопровождается увеличением максимальной разности температур ΔT и облученности ЭПО излучением атмосферы.

Предположим, что значение коэффициента излучения ЭПО ε близко к нулю, т.е. контраст определяется только облученностью поверхности ЭПО и радиационной температурой фона. В этом случае с ростом температуры фона контраст ЭПО уменьшается, т.е. излучательная способность атмосферы в окнах ее прозрачности (спектральных диапазонах работы ИК-камер) в 2...2,5 раза ниже излучательной способности фона [4]. Следовательно, максимум контраста ЭПО наблюдается при минимальной ($T_\phi \approx 243$ К), а минимум – при максимальной ($T_\phi \approx 288$ К) температуре фона в рассматриваемых условиях, причем значения разности тем-

ператур атмосферы и фона $\Delta T = 0 \dots 7$ К в данном случае практически не влияют на контраст ЭПО.

Допустим теперь, что коэффициент излучения ЭПО $\varepsilon \rightarrow 1$, т.е. контраст определяется только температурой ЭПО и фона. В этом случае направление и степень изменения контраста зависит от нескольких факторов. В частности, если рассматривать время непосредственно после захода солнца, когда $\Delta T = 0$, с ростом температуры фона контраст ЭПО из-за нелинейности уравнения теплового баланса и низкой излучательной способности атмосферы уменьшается. Однако это уменьшение не превышает погрешности вычисления контраста ($1 \dots 1,7$ К) и становится еще менее значительным при увеличении интенсивности конвективного теплообмена с атмосферой. Если рассматривать интервалы времени, соответствующие максимальной разности температур атмосферы и фона, то с ростом температуры фона контраст ЭПО увеличивается тем значительнее, чем выше интенсивность их конвективного теплообмена. Наиболее существенное увеличение контраста наблюдается при одновременном росте температуры фона и разности температур $\Delta T = T_a - T_\phi$ от нуля до ее максимального для средней полосы значения $\Delta T_{\max} = 7$ К [9]. Следовательно, минимум и максимум контраста ЭПО можно определить при минимальных ($T_\phi \approx 243$ К, $\Delta T \approx 0$) и максимальных ($T_\phi \approx 288$ К, $\Delta T \approx 7$ К) значениях температуры фона и разности температур атмосферы и фона в рассматриваемых условиях.

Так как степень влияния собственного излучения (температуры) и облученности ЭПО на контраст монотонно зависит от значения коэффициента излучения ЭПО ε [1], рассмотренные случаи определяют диапазон возможных изменений контраста в ночное время суток при безоблачной атмосфере и могут быть использованы для оценки в этих условиях как экстремальных значений контраста ЭПО, так и наземных объектов в целом.

В дневное время суток при ясной погоде ($n=0$), (V_2 , V_1) доминирующей характеристикой внешней среды с точки зрения влияния на контраст ЭПО является солнечная радиация, что подтверждается многочисленными экспериментами в натурных условиях. Поэтому максимальный контраст ЭПО соответствует максимуму облученности их поверхности солнечной радиацией (летний полдень), а минимальный – ее минимуму. Уменьшение облученности поверхности объекта солнечной радиацией

наблюдается в утренние и вечерние часы, а также при изменении пространственной ориентации ЭПО (в вертикальной, либо горизонтальной плоскостях). В подмножестве V_2 минимальный контраст достигается в летний полдень для затененных поверхностей ЭПО, так как смещение времени суток относительно полудня сопровождается увеличением разности температур атмосферы и фона, что в значительной степени компенсирует уменьшение облученности ЭПО солнечной радиацией. Наоборот, в подмножестве V_1 (период таяния) разность температур атмосферы и фона в течение суток не изменяется, поэтому минимальный контраст ЭПО достигается в часы захода ($E_c \approx 0$).

Рассчитанные значения характеристик внешней среды, обеспечивающие оценки экстремальных по совокупности ее состояний величин контрастов ЭПО, приведены в таблице. Для их определения использовались известные из метеорологии экспериментальные данные, а также эмпирические зависимости, полученные на основе их анализа. В частности, для оценки облученности поверхностей объектов излучением внешней среды при отсутствии облачности применялись выражения, полученные на основе анализа экспериментальных данных, приведенных в работах [4, 9], а также аналитические выражения, полученные в [2, 3].

Наименование величины, ед. измерения	Ясно, день, весна (период таяния снега) /V1/		Ясно, день, лето /V2/		Ясно, ночь, лето /V3/		Сплошная облачность /V4/	
	макс. контраст	мин. контраст	макс. контраст	мин. контраст	макс. контраст	мин. контраст	макс. контраст	мин. контраст
E_c , Вт/м ²	660	195	910	225	0	0	0	0
T_ϕ , К	273	273	314	314	288	243	258	293
ΔT , К	0	0	11	11	7	0	0	0
E , Вт/м ²	273	248	366	440	350	162	251	416

Ориентация ЭПО в пространстве (горизонтальная или вертикальная) выбиралась из условия «усиления» экстремальных значений величин контрастов.

Выводы. Таким образом, разработанная модель обладает достаточной для практического использования точностью и позволяет про-

водить оценку максимума абсолютного контраста объекта по совокупности возможных состояний внешней среды.

Литература

1. Мочалин В.Д. Прогнозирование радиационного контраста объектов в спектральных диапазонах 3,5...5 и 8...14 мкм / В.Д. Мочалин // ОМП - 1991.- № 6.
2. Мочалин В.Д. Оценка температуры тел, находящихся в естественных условиях теплообмена с внешней средой / В.Д. Мочалин, Г.Л. Тюрин // Радиотехника и система связи: межвузовский вестник. - Воронеж: ВГТУ, 2002. - Вып. 4.2. - С. 31-33.
3. Керков В.Г. Моделирование и анализ эффективности средств снижения теплового контраста с учетом формы и рельефа их поверхности / В.Г. Керков, В.Д. Мочалин, Г.Л. Тюрин // Вестник Воронежского госу-

дарственного технического университета. – 2015. – Том 11. – № 2. – С. 107-112.

4. Беляев Н.М. Методы теории теплопроводности / Н.М. Беляев, А.А. Рядно. - М.: Высшая школа, 1982.
5. Прозоров А.В. Декомпозиция системы. Критерии декомпозиции на подсистемы / А.В. Прозоров. - СПб.: Питер, 1991.
6. Таненбаум Э. Распределенные системы / Э. Таненбаум, М. Свен. - СПб.: Питер, 1999.
7. Зуев В.Е. Прозрачность атмосферы для видимых и инфракрасных лучей / В.Е. Зуев. - М.: Советское радио, 1966.
8. Криксунов Л.З. Справочник по основам инфракрасной техники / Л.З. Криксунов. - М.: Советское радио, 1978.
9. Матвеев Л.Т. Курс общей метрологии. Физика атмосферы / Л.Т. Матвеев. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1976.

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина» (г. Воронеж)
Государственный научно-исследовательский испытательный институт проблем технической защиты информации Федеральной службы по техническому и экспортному контролю (г. Воронеж)

MODEL OF EXTERNAL ENVIRONMENT STATES IN ASSESSING THE OPTICAL VISIBILITY OF GROUND OBJECTS IN THE INFRARED WAVELENGTHS RANGE

V.G. Kerkov¹, V.D. Mochalin², G.L. Tyurin³

¹PhD, Senior Staff Scientist, Military scientific educational center of Military-Air forces “N.E.Zhukovsky and JU.A. Gagarin Military-Air academy, Voronezh, Russian Federation
e-mail: vaiu@mil.ru

²Senior Staff Scientist, FSTEC of Russia, Voronezh, Russian Federation
e-mail: gniii@fstec.ru

³PhD, Head of department, Military scientific educational center of Military-Air forces “N.E.Zhukovsky and JU.A. Gagarin Military-Air academy, Voronezh, Russian Federation
e-mail: germtyr@yandex.ru

The article is devoted to investigation and revealing the regularities of the influence of various external environment states on the evaluation of the ground objects optical visibility in the infrared wavelength range and justification of the model of external environment states that allows to estimate the maximum values of the absolute thermal contrast of an object according to the set of possible external environment states.

Development of this model is determined by the need to reduce the quantity of measurements provided by a large number of parameters and environmental characteristics that are taken into account, varying depending on the state of the atmosphere, time of day and season.

To substantiate the minimum number of the environment states in which the extreme values of difference in radiation temperatures are observed, regardless of the characteristic values of objects, the influence patterns of various environment states on the optical visibility of ground objects in the infrared wavelength range are studied. Four groups of external environment states that guarantee finding for contrast extremes of surface object elements in a set of external environment states are defined. This guarantee is ensured, with other things being equal, by the maximum difference in the contrast of the surface object elements in the maximum and minimum cloudiness and taking into account all possible qualitative relations of the external environment characteristics.

The values of the external environment characteristics that provide assessment of the extreme values of the contrasts of the surface object elements are calculated.

Key words: model of the external environment states, optical visibility, thermal contrast, temperature distribution

References

1. Mochalin V.D. “Forecasting the radiation contrast of objects in the spectral ranges 3.5...5 and 8...14 μm ”, *WMD*, 1991, no. 6.
2. Mochalin V.D., Tyurin G.L. “Estimation of the temperature of bodies in natural conditions of heat exchange with the external environment”, *Radiotekhnika i Sistema svyazi, Mezhvuzovskiy vestnik*, VSTU, 2002, vol. 4.2, pp.31-33

3. Kerkov V.G., Mochalin V.D., Tyurin G.L. "Modeling and analysis of the effectiveness of means to reduce the heat contrast, taking into account the shape and topography of their surface", *The Bulletin of Voronezh State Technical University*, 2015, vol. 11, no. 2, pp. 107-112.
4. Belyaev N.M., Ryadno A.A. "Methods of the heat conductivity theory" ("Metody teorii teploprovodnosti"), Moscow, Vysshaya shkola, 1982.
5. Prozorov A.V. "Decomposition of a system. Criteria for decomposition into subsystems" ("Dekompozitsiya sistemy. Kriterii dekompozitsii na podsistemy"), Saint Petersburg, Piter, 1991.
6. Tanenbaum E., Sven M. "Distributed Systems" ("Raspredelyennye sistemy"), Saint Petersburg, Piter, 1999.
7. Zuev V.E. "Transparency of the Atmosphere for Visible and Infrared Rays" ("Prozrachnost' atmosfery dlya vidimyykh i infrakrasnykh luchey"), Moscow, Sovetskoe radio, 1966.
8. Kriksunov L.Z. "Handbook on the basics of infrared technology" ("Spravochnik po osnovam infrakrasnoy tekhniki"), Moscow, Sovetskoe radio, 1978.
9. Matveev L.T. "The course of general metrology" ("Kurs obshchey metrologii"), Fizika atmosfery, Gidrometeoizdat, Leningrad, 1976.

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАЛОЖЕНИЯ ВИБРАЦИИ
НА ПРОЦЕСС ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ РАЗМЕРНОЙ ОБРАБОТКИ**

А.И. Болдырев, А.А. Болдырев, В.В. Григораш

При электрохимической размерной обработке вследствие засоров межэлектродного промежутка довольно часто возникают короткие замыкания, которые ведут к разрушению рабочей части электрода-инструмента. Для стабилизации анодного растворения в промышленном производстве применяются различные технические решения. Однако они не всегда достаточно эффективны, т.к. нередко ведут к снижению производительности и точности обработки.

В работе рассмотрены результаты экспериментальных исследований по устранению засоров межэлектродного промежутка при электрохимической размерной обработке. Предложено уменьшить образование засоров путем наложения на электроды вибрации, которая способствовала бы устранению неоднородности среды, разрывов потока, удалению прианодной пленки из рабочей зоны. Исследования осуществлялись в электрохимической ячейке на экспериментальной установке, где имелась возможность накладывать на электрод-инструмент колебания частотой 20, 40, 80 Гц с амплитудой 0,15 мм. Сравнительные исследования проводились без наложения вибрации на электрод-инструмент.

В результате исследований установлено, что вибрации, наложенные на электрод-инструмент при электрохимической размерной обработке, существенно уменьшают возможность образования засоров в межэлектродном промежутке. Наложение вибрации ведет к некоторому повышению производительности процесса по сравнению с обработкой без вибрации. При этом какого-либо существенного влияния на точность не обнаружено.

Ключевые слова: электрохимическая обработка, вибрация, устранение засоров

Введение

Как известно, при электрохимической размерной обработке нередко происходят засоры межэлектродного промежутка и, как следствие, короткие замыкания, приводящие в конечном итоге к разрушению электродов [1]. Причинами, вызывающими их разрушение, являются разрыв потока электролита из-за несовершенства гидравлического тракта, прерывание процесса анодного растворения в зонах разрыва потока электролита и др. [2].

В промышленном производстве применяются различные способы устранения короткого замыкания. Одним из способов является изменение давления электролита в рабочей камере: повышение давления на входе в рабочую камеру или подавливание на выходе. В ряде случаев применяется и то, и другое [3,4].

Другим способом стабилизации процесса анодного растворения является увеличение рабочего зазора между электродами. Однако это влечет за собой снижение производительности и точности обработки [5].

Ранее теоретически было предложено уменьшить образование засоров путем наложе-

ния на электроды вибрации, которая способствовала бы устранению неоднородности среды, разрывов потока, удалению прианодной пленки из рабочей зоны [6]. Результаты экспериментальных исследований, выполненных на Воронежском механическом заводе, подтвердили эффективность предложенного технического решения.

Условия проведения эксперимента

Экспериментальные исследования осуществлялись в электрохимической ячейке на специальной установке, созданной на базе станка СЭХО-901, где имелась возможность накладывать на электрод-инструмент колебания частотой 20, 40, 80 Гц с амплитудой 0,15 мм. Сравнительные исследования проводились без наложения вибрации на электрод-инструмент.

Рабочая поверхность электрода-инструмента имела ступенчатую форму с высотой ступенек 1,5 мм, а рабочая поверхность исследуемого образца – плоскую (рис. 1,а). Электрод-инструмент и исследуемый образец выполнялись из высоколегированной стали 12Х18Н9Т (ГОСТ 5632-72).

Экспериментальные исследования выполнялись на следующих режимах:

электролит – водный раствор 16 % $NaCl$ + 9 % $NaNO_3$;

температура электролита – 25-30° С;

давление электролита – 120 кПа;

Болдырев Александр Иванович – ВГТУ, д-р техн. наук, профессор, e-mail: aiboldyrev@mail.ru

Болдырев Александр Александрович – ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, e-mail: alexboldyrev@yandex.ru

Григораш Владимир Васильевич – ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, e-mail: svarka@vgasu.vrn.ru

напряжение источника питания – 12 В;
 начальный межэлектродный зазор на центральной площадке – 0,3 мм;
 время обработки с наложением вибрации определенной частоты и амплитуды – 30 мин.

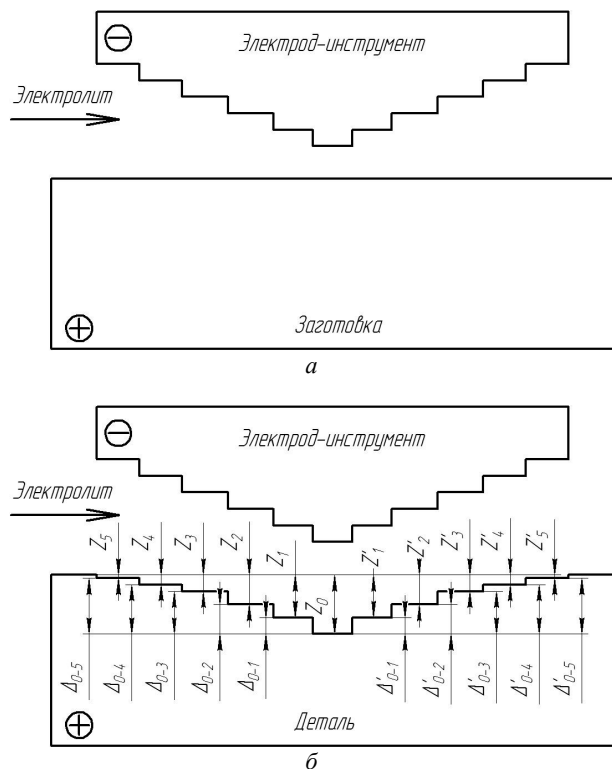


Рис. 1. Форма рабочих поверхностей электродов:
 а – до обработки; б – после обработки

На каждом режиме с интервалом 3 мин обработка прекращалась, и производились измерения величин удаленного припуска z с исследуемого образца по каждой площадке, т.е. за время полного цикла обработки осуществлялось по 10 измерений снятого припуска по каждой площадке. По полученным результатам измерений определялись значения образовавшихся на образце ступенек Δ . В ходе проведения исследований установлено, что во всех случаях обработки с наложением вибрации на электрод-инструмент засоров межэлектродного промежутка не наблюдалось.

Контрольный образец обрабатывался на тех же режимах, но без наложения на электрод-инструмент вибрации. Однако обработать исследуемый образец до конца не удалось, т.к. на 27 минуте на площадках, расположенных на выходе электролита, стали появляться засоры.

Результаты эксперимента

Изменение во времени съема металла z_0 с площадки центральной ступени в зависимости

от частоты вибрации представлено на рис. 2. Все зависимости за исключением обработки при $f = 80$ Гц практически носят прямолинейный характер. Это свидетельствует о том, что скорость подачи электрода-инструмента была установлена достаточно точно, и межэлектродный зазор 0,3 мм являлся установившимся.

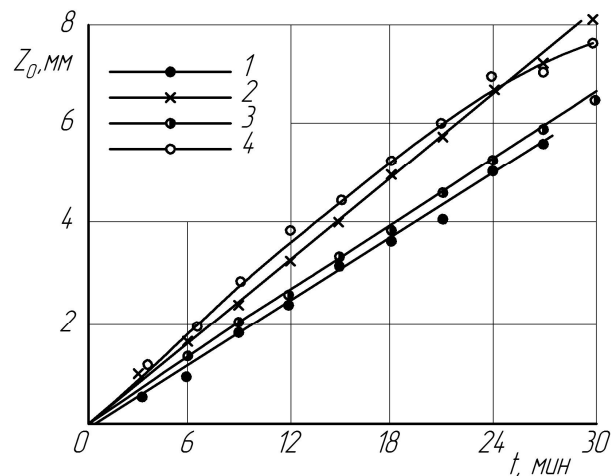


Рис. 2. Съем металла с центральной ступеньки:
 1 – 0 Гц; 2 – 20 Гц; 3 – 40 Гц; 4 – 80 Гц

Зависимости, характеризующие наложение вибрации, располагаются выше линии $f = 0$ Гц, что свидетельствует о повышении производительности электрохимического процесса с вибрацией электрода-инструмента, чем без нее. Это наиболее заметно для частоты колебаний 20 Гц. Такое повышение производительности объясняется разрушающим действием вибрации на прианодную окисную пленку и прикатодный газовый слой, ведущим к уменьшению электрического сопротивления и повышению рабочей силы тока.

Изменение во времени съема металла z_l и z_l' с площадок, расположенных симметрично слева и справа от центральной, в зависимости от частоты вибрации представлено на рис. 3. Как видно из графика, съем металла с этих площадок при $f = 0$ Гц неодинаков ($z_l > z_l'$), что объясняется увеличением загазованности межэлектродного пространства по ходу движения электролита. При наложении вибрации любой частоты съем металла по площадкам ступенек, расположенным симметрично центральной ступеньке, одинаков (зависимости на рис. 3 сливаются в одну линию для каждой частоты). Аналогично центральной ступеньке, съем металла на боковых площадках выше при обра-

ботке с наложением вибрации, чем без вибрации.

Наряду с изменением производительности при электрохимической размерной обработке с наложением вибрации на электрод-инструмент и без наложения вибрации определялась точность формообразования ступенек на исследуемом образце. Формообразование оценивалось по величине образующейся ступеньки как функции снятого припуска.

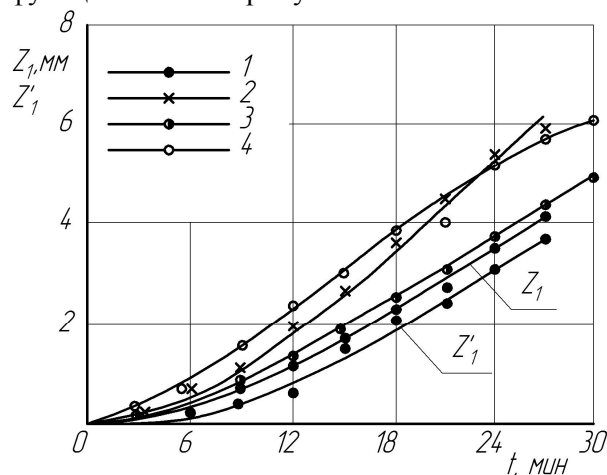


Рис. 3. Съем металла с боковых ступенек: 1 – 0 Гц; 2 – 20 Гц; 3 – 40 Гц; 4 – 80 Гц

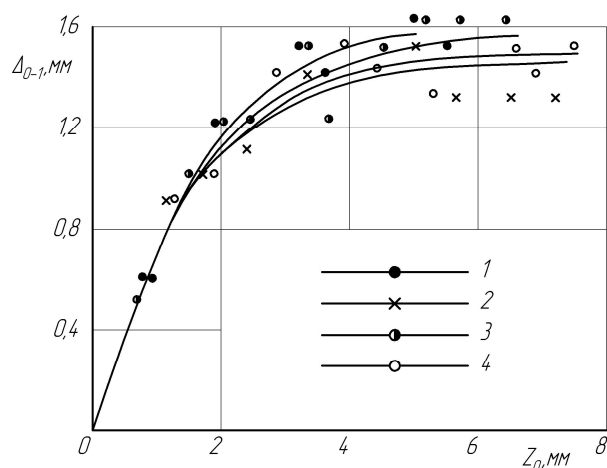


Рис. 4. Изменение величины ступеньки Δ_{1-0} от снятого припуска z_0 : 1 – 0 Гц; 2 – 20 Гц; 3 – 40 Гц; 4 – 80 Гц

На рис. 4 представлена зависимость изменения величины ступеньки Δ_{1-0} (центральной и соседней левой ступеньками) от снятого припуска z_0 . Из графика видно, что все кривые, характеризующие разные частоты вибрации, с

некоторым разбросом по мере «внедрения» электрода-инструмента в образец асимптотически приближаются к значению $\Delta_{1-0} = 1,5$ мм, т.е. к величине ступеньки, заданной чертежом электрода-инструмента.

Разброс кривых для всех частот вибрации, в том числе и при $f = 0$ Гц, не превышает погрешности эксперимента. В связи с этим нет никаких оснований делать вывод о каком-либо влиянии вибрации на точность формообразования.

Выводы

1. Вибрации, наложенные на электрод-инструмент при электрохимической размерной обработке, существенно уменьшают возможность образования засоров в межэлектродном промежутке.

2. Наложение вибрации ведет к некоторому повышению производительности процесса по сравнению с обработкой без вибрации.

3. Какого-либо существенного влияния на точность формообразования не обнаружено.

Литература

1. Технология электрических методов обработки / В.П. Смоленцев, А.В. Кузовкин, А.И. Болдырев и др. Воронеж: ВГУ, 2001. 310 с.
2. Теория электрических и физико-химических методов обработки. Обработка материалов с применением инструмента / В.П. Смоленцев, А.И. Болдырев, Е.В. Смоленцев и др.; под ред. В.П. Смоленцева. Воронеж: ВГТУ, 2008. Ч. 1. 248 с.
3. Экспериментальные исследования технологических возможностей электрохимического формообразования / А.И. Болдырев, С.В. Усов, А.А. Болдырев и др. // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2014. Т. 10. № 3.1. С. 120-122.
4. Болдырев А.И. Моделирование процесса комбинированной электрохимикомеханической обработки / А.И. Болдырев // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2010. Т. 6. № 2. С. 141-145.
5. Болдырев А.И. Достижение заданного качества материала управлением технологическими условиями комбинированной обработки / А.И. Болдырев // Вестник Саратовского государственного технического университета. 2010. Т. 3. № 1 (46). С. 27-31.
6. Болдырев А.А. Способы очистки электролита при электрохимической и комбинированной обработке / А.А. Болдырев, А.И. Болдырев // Проблемы и перспективы развития машиностроения: сб. науч. тр. междунар. науч.-техн. конф. Липецк: ЛГТУ, 2016. С. 51-56.

Воронежский государственный технический университет

EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF VIBRATION APPLICATION ON THE ELECTROCHEMICAL DIMENSIONAL PROCESSING

A.I. Boldyrev¹, A.A. Boldyrev², V.V. Grigorash³

¹Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: aiboldyrev@mail.ru

²PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: alexboldyrev@yandex.ru

³PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: svarka@vgasu.vrn.ru

During electrochemical dimensional processing due to clogging of the inter-electrode gaps, short circuits often occur, which lead to destruction of the working part of a tool electrode. To stabilize anodic dissolution in industrial production, various technical solutions are used. However, they are not always effective enough, because they often lead to a decrease in productivity and accuracy of processing.

In the paper, the results of experimental studies on eliminating the clogging of the inter-electrode gaps during electrochemical dimensional processing are considered. It is suggested to reduce the formation of clogs by applying vibration to the electrodes, which would help eliminate the inhomogeneity of the medium, the flow disruption, and remove the near-anode film from the working zone. The studies were carried out in an electrochemical cell using an experimental unit, where it was possible to apply oscillations of the frequency 20, 40, 80 Hz with the amplitude of 0.15 mm to the tool electrode. Comparative studies were conducted without applying vibration to the electrode tool.

As a result of the research, it was established that the vibrations applied to a tool electrode during electrochemical dimensional processing significantly reduce the possibility of clogs in the inter-electrode gap. Superimposed vibrations lead to a certain increase in the productivity of the process compared to the treatment without vibration. At the same time, there was no significant effect on the accuracy

Key words: electrochemical treatment, vibration, elimination of blockages

References

1. Smolentsev V.P., Kuzovkin A.V., Boldyrev A.I. "Electrical processing methods technology" ("Tekhnologiya elektricheskikh metodov obrabotki"), Voronezh, VSU, 2001, 310 p.
2. Smolentsev V.P., Boldyrev A.I., Smolentsev E.V. "The theory of electrical, chemical and physical processing methods. Processing materials using tools" ("Teoriya elektricheskikh i fiziko-khimicheskikh metodov obrabotki. Obrabotka materialov s primeneniem instrumenta"), Voronezh, VSTU, 2008, part 1, 248 p.
3. Boldyrev A.I., Usov S.V., Boldyrev A.A. "Experimental studies of technological possibilities of electrochemical formation", *Bulletin of Voronezh State Technical University*, 2014, vol.10, no. 3-1, pp. 120-122
4. Boldyrev A.I. "Simulation of combined electrochemical mechanical processing", *The Bulletin of Voronezh State Technical University*, 2010, vol.6, no. 2, pp. 141-145.
5. Boldyrev A.I. "Achieving the given quality of the material by controlling the technological conditions of the combined treatment", *The Bulletin of SSTU*, 2010, vol.3, no. 1(46), pp. 27-31.
6. Boldyrev A.A., Boldyrev A.I. "Methods of electrolyte purification during electrochemical and combined treatment", *Proc. of the international scientific and technical conference "Problems and prospects of the mechanical engineering development"*, Lipetsk, LSTU, 2016, pp. 51-56.

ДОЗИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ УДАРА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ИЗ СТРУЖКИ БРИКЕТОВ ЗАРАНЕЕ НАЗНАЧЕННОЙ ПЛОТНОСТИ

И.А. Чечета, А.Е. Чечета

Показано, что заранее назначенная плотность брикетов, получаемых из металлической стружки высокоскоростным ударом, предопределяется исключительно соблюдением условия о равенстве величин истинной относительной деформации материала стружки и назначенной плотности создаваемого брикета. Упомянутое условие обусловлено сущностью полученного авторами патента на изобретение [4], патентообладателем которого является Воронежский государственный технический университет. Материалы названного патента в совокупности с материалами авторского свидетельства [3], полученного ранее и касающегося дозирования энергии для динамического деформирования образцов из сплошного материала, определили возможность вычислять не только количество требуемой энергии для создания брикета с заранее назначенной плотностью, но и уровень температуры, сопровождающей удар в процессе брикетирования. В свою очередь, в любом случае наличие удара обеспечило необходимость рассматривать процесс динамического деформирования как сложную многозвенную систему, способную к развитию и совершенствованию. В качестве основных составляющих этой системы представилось необходимым выделить три подсистемы: материал, энергия и техническое окружение, в котором реализуется взаимодействие между материалом и вводимой энергией. При этом принято во внимание, что сущность *технического окружения* проявляется тем или иным свойством матери: силовым полем, магнетизмом, температурой, интервалом времени, положительным или отрицательным катализатором

Ключевые слова: энергия, истинная относительная деформация, пористость

Введение. Исследованием приемов дозирования энергии при импульсном брикетировании металлической стружки наиболее обстоятельно занимались учёные Харьковского авиационного института [1, 2]. Сущность дозирования сведена к тому, что экспериментально варьируют величину заряда горючей газовой смеси. Газообразные продукты сгорания этой смеси преобразуют свою работу расширения в кинетическую энергию массы, наносящей удар. Измеряют начальную скорость удара и определяют пористость получаемого брикета. В назначенном диапазоне скорости наносят серию ударов. Этим накапливают базу данных, достаточную для составления графической зависимости между энергией удара и пористостью получаемых брикетов. Строят график и по нему определяют ту величину энергии, которая обеспечивает получение брикета с требуемой пористостью. Основные недостатки изложенного способа дозирования энергии брикетирующего удара следующие.

1) Сначала создают конструкцию брикетировочной машины, изготавливают её, потом экспериментально выявляют энергетические и технологические возможности этой машины и, наконец, выбирают ту скорость удара (и величину энергии, соответственно), при которой образуется требуемая пористость брикета.

2) Нет ответа на вопрос, как создавать работоспособные конструктивные силовосредоточивающие элементы машины, предназначенные для передачи удара, если отсутствует предварительно необходимая информация о величине динамических напряжений и сил, неизбежно возникающих под действием брикетирующего удара. Затем стал известным способ дозирования энергии для тарирования динамического воздействия на стандартные цилиндрические объекты (образцы) из сплошного материала [3]. Здесь сущность дозирования энергии для динамического деформирования (осаживания) цилиндрических образцов из сплошного материала состоит в следующем. На стандартный цилиндрический образец из сплошного материала оказывают ряд действий: наносят удар, фиксируют мгновенную скорость соударяющихся тел известной массы, определяют кинетическую энергию удара, а также – объём пластически деформируемого объекта и величину его истинной относительной деформации (ε), вычисляют величину удельной энергии ($e_{y\partial}$), то есть количество энергии, приходящейся на величину объёма деформируемого объекта. В результате находят, что величина возникающего в материале динамического напряжения (σ_T) равна частному от деления удельной энергии $e_{y\partial}$ на истинную относительную деформацию ε :

$$\sigma_T = e_{y\partial} / \varepsilon . \quad (1)$$

Чечета Иван Алексеевич – ВГТУ, д-р техн. наук, профессор, тел. 8(473) 222-53-85

Чечета Антон Евгеньевич – АО «Концерн «Созвездие», инженер, тел. 8(473) 272-26-77

1. Формирование брикета. Если на линии удара расположить дозированный объём стружки из того же материала, а боковые поверхности этого объёма жестко ограничить (см. рисунок), то истинная относительная деформация ε по высоте получаемого брикета предопределяется исключительно изменением степени α пористости брикета. То есть, безразмерные величины ε и α становятся эквивалентами между собой. Тогда из сопоставления удельной энергии сплошного материала

$$e_{yd} = E/V \quad (2)$$

и удельной энергией стружечного брикета

$$e_{yd.бр} = E/\alpha V \quad (3)$$

следует, что

$$e_{yd.бр} = \sigma_T. \quad (4)$$

Здесь σ_T вычислена по уравнению (1); α – степень пористости брикета; $E = 0,5Mv^2$ – энергия удара;

v – скорость удара, αV – объём деформируемой стружки.

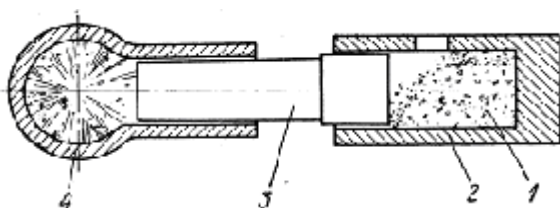


Схема импульсного брикетирования стружки:
1 – стружка; 2 – контейнер; 3 – пуансон; 4 – камера для сжигания заряда (имеющаяся жесткая связь между узлами 2 и 4 не показана)

Процесс брикетирования должен состоять из следующих основных этапов. Предназначенную для брикетирования стружку дробят, очищают с промывкой, сушат, термически обрабатывают для снятия наклёпа, полученного в процессе стружкообразования, и выборочно элементы стружки проверяют на твердость, формируя этим усредненное представление о твердости стружечного материала.

Затем из сплошного металла, такого же, как и стружечный металл, при такой же его твердости изготавливают стандартизованные объекты – цилиндрические образцы для динамических испытаний на сжатие. По результатам испытаний определяют динамическое напряжение σ_T , последовательно нанося на каждый такой образец удары с диапазоном скорости, соответствующим диапазону скоростей намечаемого импульсного брикетирования.

По результатам этого исследования составляют график « $e_{yd} - \varepsilon$ », на основании которого находят динамическое напряжение σ_T , возникающее в сплошном пластически деформируемом материале {см. уравнение (1)}.

После этого в контейнере 2 (см. рисунок) соосно с линией удара располагают дозированный объём подготовленной стружки. Боковые поверхности контейнера жестко ограничивают стружку цилиндрической поверхностью, как показано на рисунке. Этим обеспечивают условие, при котором истинная относительная деформация ε брикета по его длине предопределяется исключительно изменением степени α пористости получаемого брикета. Соответственно, это является основанием для сопоставления значений удельной энергии e_{yd} сплошного материала и удельной энергии $e_{yd.бр}$ брикета {см. уравнение (4)}.

Перечисленными действиями обоснован новый способ дозирования энергии для изготовления брикетов заданной пористости [4].

2. Выделение теплоты при брикетировании. Процесс пластического деформирования под воздействием удара сопровождается выделением тепла из-за появления сил внутреннего и внешнего трения в обрабатываемом объекте. Соотношение между этими силами существенно зависит от реализуемой схемы напряженно-деформированного состояния обрабатываемого материала и конструкции штампового инструмента. Но в любом случае при высокоскоростном ударе преобладает количество тепла, предопределяемого внутренним трением. При этом возникающая температура бывает достаточно высокой. Так, холодная динамическая осадка (в условиях комнатной температуры) цилиндрических образцов из магниевых сплавов при скорости удара порядка 40 м/с сопровождается воспламенением кромок образца и их оплавлением.

Это послужило основанием разработанной методики для определения прироста температуры T по аналогии с анализом свободной осесимметричной осадки цилиндрических образцов [5]. В результате уравнение теплопроводности для одноосной системы нагружения при динамическом брикетировании стружки получает вид:

$$\rho C dT/dt = -A \alpha \sigma v/h. \quad (5)$$

В этом уравнении:

ρ – плотность обрабатываемого материала;
 C – коэффициент удельной теплоёмкости;

T – температура, изменяющаяся при ударе;
 t – текущее время;
 $A = 1/427$ – термический эквивалент работы;
 α – степень пористости получаемого брикета;
 σ – напряжение в деформируемом теле;
 v – мгновенная скорость соударяющихся масс;
 h – текущая высота брикета.

С учётом того, что в каждый момент времени мгновенная скорость $v = dh / dt$, уравнение (5) получает вид:

$$dT = (A \alpha \sigma / \rho C) \times (dh / h). \quad (6)$$

Интегрирование уравнения (6) в пределах от T_0 до T и от h_0 до h приводит к уравнению для вычисления температуры T , возникающей в брикете в зависимости от начальной температуры T_0 и степени деформации брикета при конкретной степени его пористости α :

$$T = T_0 + [A \alpha \sigma \times \ln(h_0 / h)] / \rho C. \quad (7)$$

Так как $\varepsilon = \ln(h_0 / h)$ – истинная относительная деформация, $E_0 = 0,5M v_0^2$ – номинальная энергия удара, v_0 – начальная скорость удара, M – приведенная энергетически активная масса, $e_{уд.бр} = E_0 / \alpha V$ – удельная энергия брикетирования; αV – объём брикета, то уравнение (7) получает вид:

$$T = T_0 + A \alpha M v_0^2 / 2 \rho C V. \quad (8)$$

В результате, на основании измеренной скорости v_0 , известной величины массы M , заданной степени пористости и объёма брикета, есть возможность получать представление о требуемом количестве вводимой энергии и о максимальной величине температуры, которая возникает к концу удара.

3. Техническое окружение в технологических процессах. Техничко-экономический анализ технологических процессов, ориентированных на создание изделий из конструкционных материалов, ведут, как правило, исходя из затрат на материал, инструмент, энергию, производственную площадь, заработную плату основного рабочего. Однако такой анализ не формирует прямых необходимых и достаточных предпосылок для создания объектов (изделий) с новым уровнем свойств. Это явилось основанием для того, чтобы технологический процесс в целом рассматривать как сложную многосвязную систему, способную к развитию и совершенствованию. Тогда в этой системе представляется необходимым и возможным выделить в числе основных такие подсистемы, как *материал*, *энергия* и *техническое окружение*, в котором реализуется взаимодействие между материалом и вводимой в систему энергией.

При указанном выделении основных подсистем формирование нового эффективного технологического процесса связано с подробным анализом исходного материала, выбором вида энергии, а также с выявлением условий и характера технического окружения, достаточного для реализации проектируемого технологического процесса.

Краткая характеристика перечисленных подсистем сводится к следующему.

Подсистема «материал». В современном машиностроении исходным полуфабрикатом (заготовкой) для изготавливаемой детали может быть твёрдое тело в виде слитка или профилированной продукции металлургического производства, в том числе и в виде расплава; порошкообразное тело; комбинации различных компонент типа порошок+жидкость, порошок+газ, жидкость+газ и др. Всё это говорит о том, что подсистема «материал» представляет собой многофакторную составляющую системы «технология».

Подсистема «энергия». Традиционно доминирующим источником энергии является электричество для привода станков. Затем характерной особенностью технологических процессов явились многократные и многообразные переходы вводимой энергии из одного вида в другой. Так, при использовании для высокоскоростной штамповки энергоносителя в виде перекиси водорода возможны следующие этапы преобразования энергии. На первом этапе продуктом разложения перекиси является парогаз среднего давления в виде смеси кислорода с водным паром. Впрыск, например, этилового спирта сопровождается самовоспламенением и образованием газа при высоких значениях давления и температуры. Работа расширения этого газа может быть непосредственно преобразованной в работу деформации обрабатываемой заготовки, либо переданной бойку, кинетическая энергия которого затем преобразуется в работу деформации.

Подсистема «техническое окружение». По своей сути *техническое окружение* является необходимым и достаточным условием реализации любого технологического процесса и выступает в виде его своеобразной инфраструктуры. Анализ известных технологических процессов показывает, что *техническое окружение* предопределяется как конкретным явлением, так и материальным веществом или предметом, а сущность технического окружения проявляется тем или иным свойством матери: силовым полем, магнетизмом, температу-

рой, интервалом времени, положительным или отрицательным катализатором. Так, например, сущность прогрессивного процесса термоимпульсного удаления заусенцев, образующихся на пересечениях поверхностей при обработке резанием, состоит в том, что деталь с заусенцами помещают в герметизируемую камеру и сжигают там заряд горючей газовой смеси. Возникающий фронт пламени, омывая деталь, сжигает заусенцы. Но, как правило, горючая смесь сгорает быстрее, чем успевают заусенцы разогреться до температуры своего воспламенения: здесь временной период несоответствия скоростей указывает на отсутствие технического окружения, необходимого для реализации термоимпульсного процесса. Таким окружением является вводимый в камеру сгорания отрицательный катализатор, сдерживающий темп горения топливной смеси (например, дополнительно вводимый в камеру сгорания азот).

При магнитно-импульсной штамповке техническим окружением являются условия для возникновения вихревых токов, то есть высокая электропроводность заготовки. Если электропроводность мала, что характерно для углеродистых и нержавеющей сталей, то на поверхность заготовки со стороны индуктора укладывают тонкий слой металла с высокой электропроводностью (алюминий или медь). Этим в систему вводят дополнительный элемент для

создания необходимого технического окружения.

Выводы. Изложенное даёт возможность считать, что анализ перечисленных подсистем технологических процессов и уточнение понятия о *техническом окружении*, в котором осуществляется передача энергии, способствуют созданию объектов (технологий) с новым уровнем свойств.

Литература

1. Определение энергетических параметров импульсной брикетировочной машины типа МИБ-165Б / Ю.М. Букин, А.С. Шалбаян, А.Н. Филянов, Д.А. Райзман // Обработка металлов давлением в машиностроении: сб. — Харьков: Изд. Харьк. ун-та, 1973. Вып. 9. С. 100-103.
2. Влияние схемы нагружения на качество брикетов / В.Г. Кононенко, А.С. Шалбаян, В.П. Божко, Д.А. Райзман // Высокоскоростная обработка металлов давлением: сб. — Харьков: Изд. ХАИ, 1974. Вып. 2. С. 120-124
3. Чечета И.А. Способ дозирования энергии для динамического деформирования цилиндрических образцов из сплошного материала. Авт. свид. СССР № 828014, М.кл. G01N 3/1. Заявл. 14.12.76, 2431582/25 — 28. Оpubл. 17.05.81. Бюл. № 17.
4. Патент RU 2 527 102 C2 МПК. Способ дозирования энергии при импульсном брикетировании стружки. Опубликовано 27.12.2014. Бюл. №36. Авторы: Чечета И.А., Долгополова В.В., Чечета А.Е. Патентообладатель ВГТУ.
5. Чечета И.А. Выделение теплоты при пластической деформации под действием удара / И.А. Чечета // Системные проблемы надёжности: материалы междунар. конф. и Рос. науч. шк.— М.: Энергоатомиздат, 2007. Ч.2. Т. 2. С. 26-27.

Воронежский государственный технический университет
АО «Концерн «Созвездие», г. Воронеж

DOSING THE IMPACT ENERGY FOR OBTAINING BRIQUETTES OF PREDETERMINED DENSITY FROM CUTTING CHIP

I.A. Checheta¹, A.E. Checheta²

¹Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
ph. +7(473) 222-53-85

²Engineer, Concern "Sozvezdie", Voronezh, Russian Federation
ph. +7(473) 272-26-77

It is shown that the set density of briquettes obtained from metal chips by high-speed impact is predetermined solely by observing the condition that the values of the true relative deformation of the chip material and the density of the briquette created are equal. This condition is predetermined by the essence of the patent received by the authors for the invention [4], the patent holder of which is the Voronezh State Technical University. The materials of the patent, together with the materials of the author's certificate [3], obtained earlier, concerning the energy dosing for the dynamic deformation of samples from continuous material, predetermined the possibility to calculate not only the amount of energy required to create a specified density, but also the temperature during the impact in the process of briquetting. In turn, in any case, the presence of a blow predetermined the need to consider the process of dynamic deformation as a complex multi-tiered system capable of development and improvement. As the basic components of this system, it seemed necessary to distinguish three subsystems: material, energy and technical environment, in which interaction between the material and the energy introduced is realized. At the same time it is taken into account that the essence of the technical environment is manifested by some property of the matter: the force field, magnetism, temperature, time interval, positive or negative catalyst

Key words: energy, true relative deformation, porosity

References

1. Bukin Y.M., Shalbayan A. F., Filyanov A.N., Rayzman D.A. "Determination of the energy parameters of a pulsed briquetting machine MIB-165B", *Processing of metals by pressure in mechanical engineering (Obrabotka metallov davleniem v mashinostroenii)*, Kharkov, 1973, vol. 9, pp. 100 – 103
2. Cononenco V.G., Shalbayan A.F., Bozhko V.P., Rayzman D.A. "Influence of the loading scheme on the quality of briquettes", *High-speed metal forming (Vysokoskorostnaya obrabotka metallov davleniem)* Kharkov, 1974, vol.2, pp. 120 – 124
3. Checheta I.A. "Method of energy metering for dynamic deformation of cylindrical samples from continuous material" ("Sposob dozirovaniya energii dlya dinamicheskogo deformirovaniya tsilindricheskikh obraztsov iz sploshnogo materiala"), author's certificate of USSR no. 828014, 1981
4. Checheta I.A. "Method of energy dosing with pulsed briquetting of chips" ("Sposob dozirovaniya energii pri impul'snom briketirovanii struzhki"), patent RU 2 527 102 C2 MPK, 2014
5. Checheta I.A. "Heat release during plastic deformation under impact", *Proc. of Intern. Conf. and Russ. Scientific school "Systemic problems of reliability ..."* (Sb. «Sistemnye problemy nadozhnosti...»). *Materialy mezhdunar. konf. i Ros. nauchnaya shk*), Moscow, Energoatomizdat, 2007, part 2, vol.2, pp. 26-27

ДИФфуЗИОННАЯ СВАРКА ТИТАНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАВЛЕНИЯ НА НАЧАЛЬНОМ ЭТАПЕ

В.В. Пешков, А.Б. Булков, И.Б. Корчагин, С.М. Ларсов

В статье рассмотрен технологический процесс диффузионной сварки титановых конструкций. Особенностью рассматриваемой технологии является снятие внешнего сжимающего давления на заключительном этапе сварки для уменьшения накопленной деформации свариваемых заготовок.

Экспериментальные исследования проводились на цилиндрических образцах из сплава ОТ4 с исходной глобулярной микроструктурой. Сварку производили в вакууме 2,6 Па при температурах 850-950 °С и длительности выдержки 10-90 мин под давлением 2 МПа. На второй стадии образцы подвергали изотермическому отжигу в среде аргона в течение 60-180 мин.

Качество соединения оценивали по статической прочности на разрыв. Для выявления механизма формирования зоны соединения исследовались микроструктуры образцов и топографии поверхности разрушения.

Показано, что при диффузионной сварке титановых сплавов с исходной глобулярной (равноосной мелкозернистой) микроструктурой величина накопленной деформации свариваемых заготовок может быть снижена более чем в два раза. Предложено выполнять процесс сварки в интервале температур полиморфного превращения, при этом используя сварочное давление только на первом этапе для образования физического контакта площадью не менее 50 % от номинальной, а затем без давления производить изотермический отжиг. Установлена зависимость длительности изотермического отжига от температуры, позволяющая получить соединение равнопрочное основному материалу.

Ключевые слова: титановые сплавы, микроструктура, диффузионная сварка, микрорельеф

Введение

При рассмотрении механизма образования соединения в процессе диффузионной сварки титана [1] было показано, что при сближении контактных поверхностей в процессе ползучести под действием сжимающего давления на расстояние соизмеримое с высотой микрорельефа, формирующегося под действием собственных напряжений, происходит формирование микроконтактов, являющихся очагами схватывания. После этого без участия сжимающего давления может происходить рост площади контакта по механизму спекания и, как следствие этого, рост прочности соединения.

Целью проведения исследований было установление практической целесообразности снятия внешнего сжимающего давления на заключительном этапе сварки для уменьшения накопленной деформации свариваемых заготовок.

Методика выполнения экспериментов

Сварка стыковых цилиндрических образцов для механических испытаний и металлографических исследований осуществлялась по стандартной схеме, при которой сжимающее

давление p прикладывается к свариваемым заготовкам при достижении температуры сварки.

Финишной обработкой контактных поверхностей одной партии образцов было полирование до $R_a=0,2-0,3$ мкм, а другой – чистовое точение, обеспечивающее $R_a=6,8-7$ мкм.

Диффузионную сварку образцов из сплава ОТ4 с исходной глобулярной (мелкозернистой) микроструктурой проводим в вакууме 2,6 Па с использованием давления $p=2,0$ МПа только на начальном этапе. Длительность приложения давления, выбранная из условия создания предварительного контакта площадью $F_{omn}=0,5-0,55$ от номинальной площади, при температурах 850, 900, 950 °С составляла 90, 25 и 10 мин, соответственно. После развития начального контакта давление снималось и образцы подвергали изотермическому отжигу в среде аргона в течение 60-180 мин.

Прочность соединения при испытаниях на статический разрыв после образования начального контакта составляла 0,60-0,73 от предела прочности основного металла ($\sigma_s=765$ МПа).

Сварка и испытание образцов с использованием давления на начальном этапе показали, что при температуре 850 °С увеличение длительности изотермического отжига до трех часов практически не приводило к повышению прочности соединения ($\sigma_s \approx 460$ МПа). Микроструктура зон соединения и топография поверхностей разрушения приведены на рис. 1 и 2 (поз. а). Средний размер протяженности дефектов в зоне контакта составляет 45–50 мкм, а

Пешков Владимир Владимирович - ВГТУ, д-р техн. наук, профессор, e-mail: otsp@vorstu.ru
Булков Алексей Борисович – ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, e-mail: bulkov_ab@mail.ru
Корчагин Илья Борисович – ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, e-mail: otsp@vorstu.ru
Ларсов Сергей Михайлович – ВГТУ, магистрант, e-mail: otsp@vorstu.ru

относительная суммарная протяженность всех дефектов 48 %.

Повышение температуры сварки до 900 °С сопровождается увеличением прочности соединения, которая после трехчасового изотермического отжига достигает прочности основного металла, но разрушение соединения при испытаниях происходило по плоскости контакта свариваемых образцов. Типичная микроструктура зон соединения и топографии поверхностей разрушения приведены на рис. 1 и 2 (поз. б). С увеличением длительности изотермического отжига средний размер протяженности дефектов сокращался до 38–43 мкм и, как следствие этого, уменьшалась суммарная протяженность дефектной зоны до 43 %.

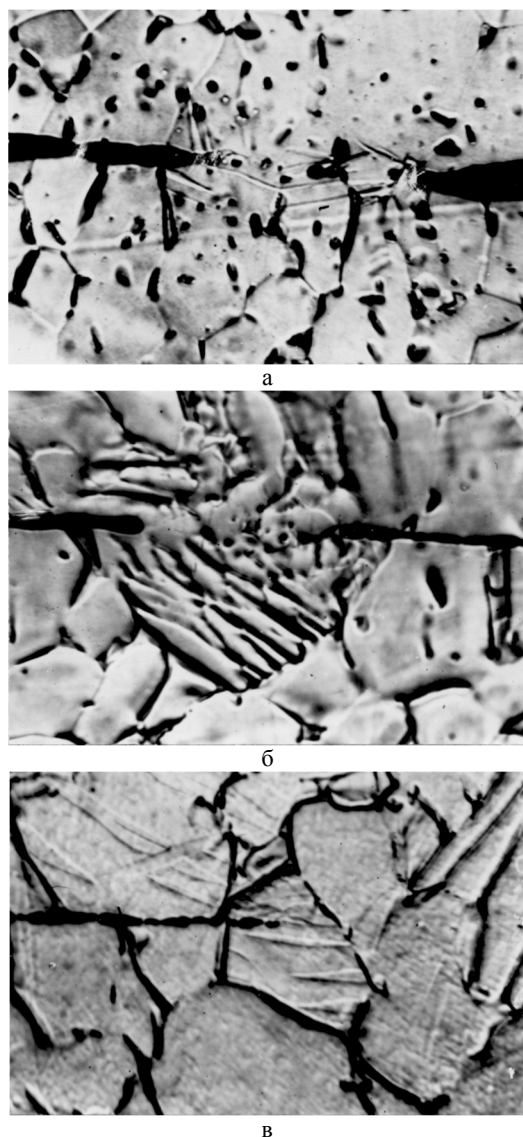


Рис. 1. Микроструктуры зон диффузионного соединения сплава ОТ4, полученного с использованием давления 2 МПа на начальном этапе и последующего изотермического отжига в течение 60 мин при температурах, °С:
а - 850; б - 900; в - 950, $\times 500$

Фрактографический анализ поверхностей разрушения показывает, что увеличение длительности изотермического отжига при 900 °С сопровождается увеличением размеров гребней отрыва и формированием чашечного рельефа. Это дает основание считать, что рост прочности соединения связан, в первую очередь, с развитием процесса сварки на участках контакта, сформированного на первом этапе при деформации микровыступов от механической обработки под действием приложенного давления.

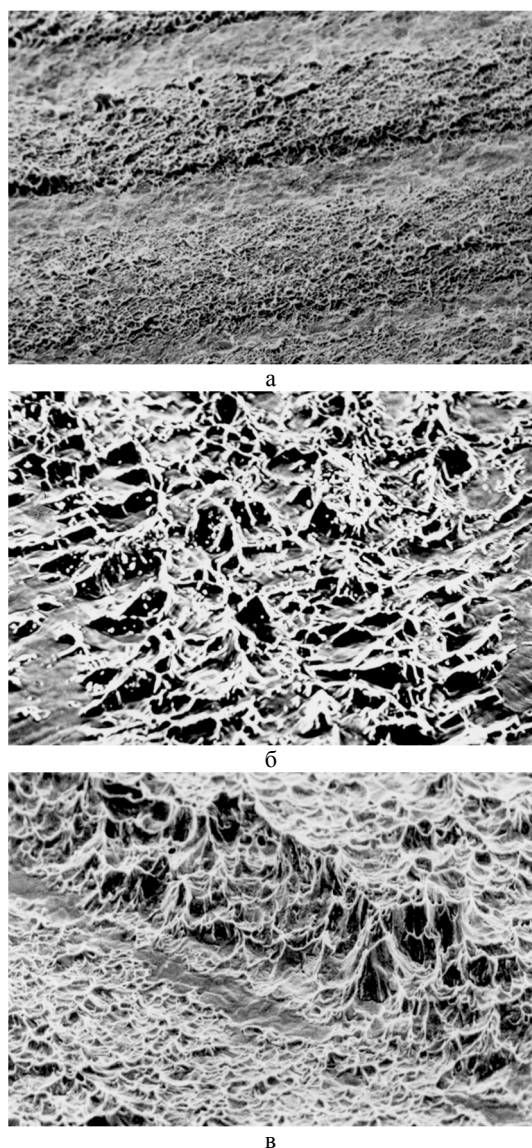


Рис. 2. Топографии поверхностей разрушения диффузионного соединения сплава ОТ4, полученного с использованием давления 2 МПа на начальном этапе и последующего изотермического отжига в течение 60 мин при температурах, °С:
а - 850; б - 900; в - 950, $\times 1500$

После сварки при 950 °С и изотермического отжига в течение одного часа прочность

диффузионного соединения равнялась прочности основного металла, но разрушение соединения происходило по зоне сварки. Микроструктура зон соединения и топография поверхностей разрушения приведены на рис. 1 и 2 (поз. в). Увеличение длительности изотермического отжига до двух часов приводит к формированию диффузионного соединения, разрушающегося при испытаниях на статический разрыв по основному металлу, при этом удлинение (δ) равнялось 12,5 %, а сужение (ψ) – 27,3 %.

Повышение прочности соединения за счет дополнительного изотермического отжига связано с развитием процесса сварки на дефектных участках в зоне стыка – между гребнями микровыступов от механической обработки. В процессе отжига на этих участках вначале появляются отдельные очаги взаимодействия свариваемых поверхностей, плотность которых возрастает с увеличением длительности отжига.

Обращает на себя внимание различие в поверхностях разрушения участков диффузионного соединения, сформировавшегося в процессе пластической деформации микровыступов и образовавшегося при последующем изотермическом отжиге (рис. 3). И хотя разрушение соединений в обоих случаях происходит по механизму зарождения, роста и слияния микрополостей, в первом случае (рис. 3, а) соединения обладают меньшей прочностью и пластичностью, чем во втором (рис. 3, б), о чем свидетельствуют размеры (диаметр, глубина) ямок изломов.

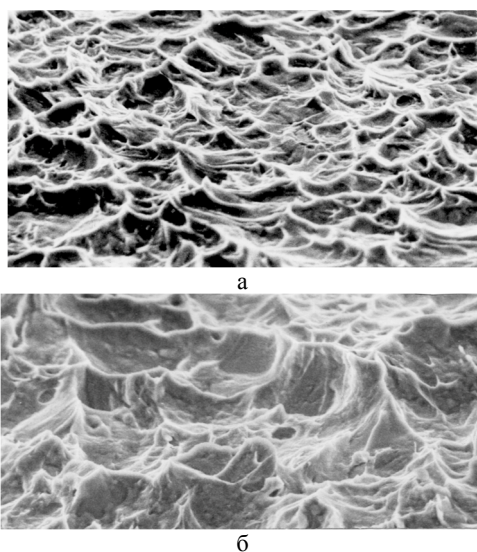


Рис. 3. Топографии поверхностей разрушения диффузионного соединения сплава ОТ4, сформировавшегося при 950 °С в процессе пластической деформации микровыступов (а) и последующего изотермического отжига (б), $\times 4000$

Сопоставление деформаций образцов ε , сопутствующих получению соединения равнопрочного основному материалу при сварке сплава ОТ4 при 950 °С и давлении 2,0 МПа по технологическим схемам: с использованием давления в течение всего времени сварки и с использованием давления только на начальном этапе, показало, что в первом случае $\varepsilon=6-7$ %, а во втором – $\varepsilon=2,5-3$ %. Однако длительность процесса сварки в первом случае составила 30 мин, а во втором – 130 мин.

Длительность процесса сварки с использованием давления на начальном этапе может быть сокращена при обеспечении качества соединения на уровне основного материала, если после развития контакта при 950 °С до $F_{omn}>0,5$ снять давление, повысить температуру до 1000 °С (на 20-30 °С выше окончания $\alpha+\beta\rightarrow\beta$ -превращения) и провести изотермический отжиг при этой температуре в течение 15-20 мин. Микроструктура зон соединения и топография поверхности его разрушения приведены на рис. 4.

Наблюдаемый эффект в большей степени следует связывать не с величиной температуры, а с развитием сварки в процессе нагрева (длительность нагрева от 950 °С до 1000 °С составляла 10-15 мин) при переходе через интервал полиморфного превращения, когда внутренние (собственные) напряжения будут достигать максимальных значений при минимальном сопротивлении сплава высокотемпературной деформации и, как следствие этого, наблюдается интенсивное развитие деформационных рельефов в зоне сварки, что положительно сказывается на образовании соединения.

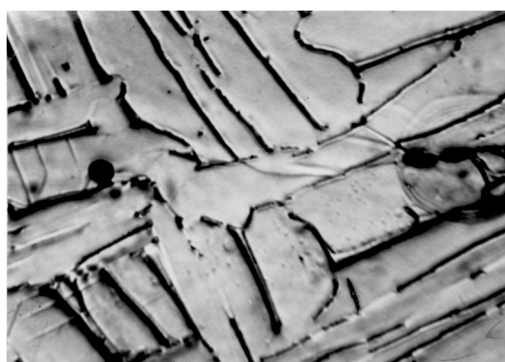
Иная картина наблюдается, если сжимающее давление, необходимое для развития предварительного контакта ($F_{omn}\approx 0,5$), прикладывается не при 950 °С, а при 1000 °С, т.е. в β -фазе. Последующий изотермический отжиг без давления хотя и приводит к росту предела прочности сварного соединения, но даже после двухчасового отжига разрушение соединения при испытаниях на разрыв происходило в зоне сварки по контактными поверхностям (рис. 5).

Выводы

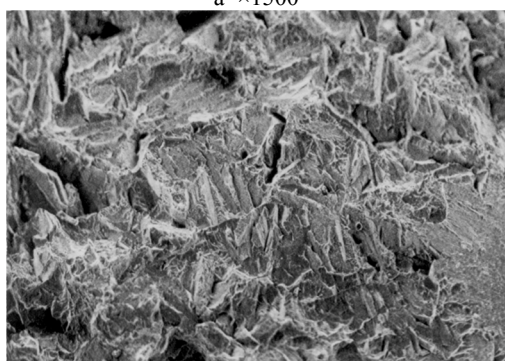
1. При диффузионной сварке титановых сплавов с исходной глобулярной (равноосной мелкозернистой) микроструктурой величина накопленной деформации свариваемых заготовок может быть снижена (более чем в 2 раза), если процесс сварки выполняют в интервале температур полиморфного превращения (~ 950 °С) в два этапа. Сварочное давление ис-

пользуется только на первом этапе для образования физического контакта площадью не менее 50 % от номинальной, на втором – рост площади контакта происходит при изотермическом отжиге без давления за счет механизма спекания.

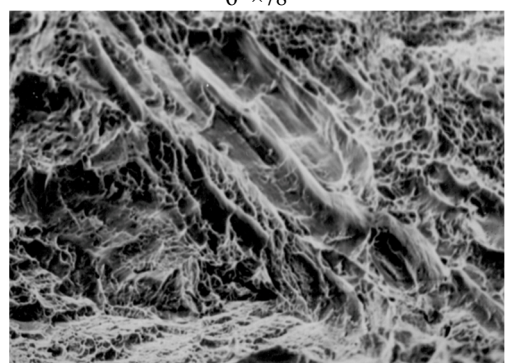
2. Длительность изотермического отжига зависит от температуры. При использовании температуры выше окончания полиморфного превращения ($\sim 1000^\circ\text{C}$) длительность отжига сокращается почти в 10 раз по сравнению с отжигом при 950°C .



а $\times 1500$

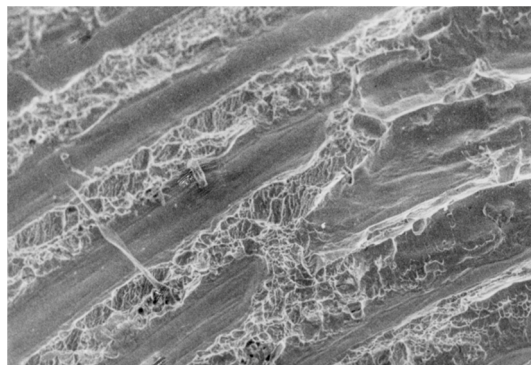


б $\times 78$

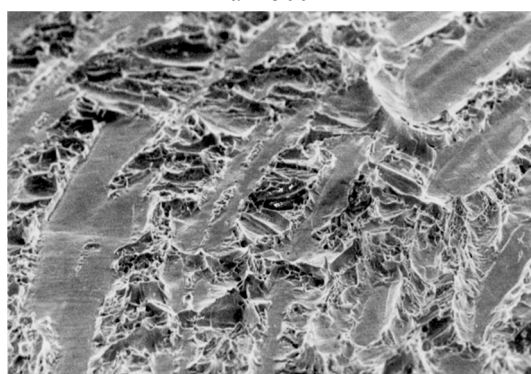


в $\times 1000$

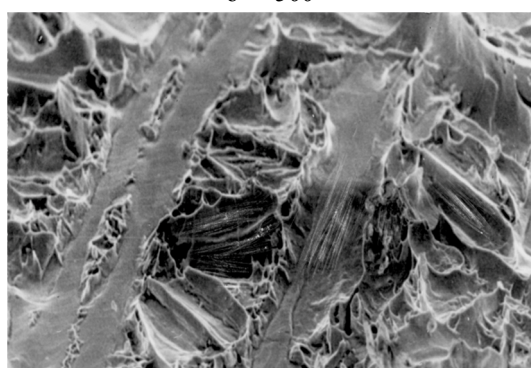
Рис. 4. Микроструктура (а) и топографии поверхностей разрушения (б, в) зон диффузионного соединения сплава ОТ4, полученного с использованием давления 2 МПа на начальном этапе при 950°C и последующего изотермического отжига при 1000°C в течение 20 мин



а $\times 500$



б $\times 500$



в $\times 1000$

Рис. 5. Топографии поверхностей разрушения диффузионного соединения сплава ОТ4, полученного с использованием давления 2 МПа на начальном этапе и последующего изотермического отжига в течение 30 мин (а) и 120 мин (б, в) при 1000°C

Литература

1. Механизм образования соединения при диффузионной сварке титана / В.В. Пешков, А.Б. Булков, С.В. Сафонов и др. // Сварочное производство. – 2012. – №12. – С. 23-28.

DIFFUSION WELDING OF TITAN USING PRESSURE IN THE INITIAL STAGE

V.V. Peshkov¹, A.B. Bulkov², I.B. Korchagin³, S.M. Larsov⁴

¹Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: otsp@vorstu.ru

²PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: bulkov_ab@mail.ru

³PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: otsp@vorstu.ru

⁴MA, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: otsp@vorstu.ru

The article describes the technological process of diffusion welding of titanium structures. The feature of the technology under consideration is the removal of the external compressive pressure at the final stage of welding to reduce the accumulated deformation of the welded blanks.

Experimental studies were carried out on cylindrical samples of the OT4 alloy with initial globular microstructure. The welding was carried out in the vacuum 2.6 Pa at 850-950 °C and the holding time 10-90 min under the pressure 2 MPa. In the second stage, the samples were subjected to isothermal annealing in argon medium for 60-180 minutes.

The bond quality was evaluated by the static tensile strength. To determine the mechanism of bond zone formation, the microstructure of the samples and the topography of the fracture surface were investigated.

It is shown that in the case of diffusion welding of titanium alloys with an initial globular (equiaxed fine-grained) microstructure, the value of the accumulated deformation of the welded blanks can be reduced by more than 2 times. It is proposed to carry out the welding process in the temperature range of polymorphic transformation, using the welding pressure only at the first stage to form a physical contact with the area at least 50% of the nominal one, and then to produce isothermal annealing without pressure. The dependence of the duration of isothermal annealing on temperature is established, which makes it possible to obtain a compound that is equivalent to the main material

Key words: titanium alloy, microstructure, diffusion welding, microrelief

References

1. Peshkov V.V., Bulkov A.B., Safonov S.V. "Mechanism of Compound Formation in Titanium Diffusion Welding", *Welding production*, 2012, no. 12, pp. 23-28.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$

И.С. Ильяшев, Ю.Е. Калинин, В.А. Макагонов, С.Ю. Панков, А.В. Ситников

Методом ионно-лучевого распыления были получены образцы тонких пленок ZnO , $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$, а также двухслойных тонкопленочных структур $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$. Рентгеноструктурный анализ образцов ZnO и $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ показал, что полученные пленки характеризуются одной кристаллической фазой с гексагональной решеткой вюрцита (пространственная группа $P6_3mc$). Для исследования влияния термообработки на электрические свойства тонких пленок ZnO , $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ и двухслойных структур $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ были проведены термические отжиги в течение 30 минут при температуре 400°C в вакууме и в воздушной атмосфере. Результаты исследования зависимостей термовольтаического отклика двухслойных структур $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ в диапазоне температур $25 - 350^\circ\text{C}$ показали, что после термообработки в вакууме и на воздухе величина отклика уменьшилась. Термический отжиг ведет к увеличению удельного электросопротивления, что может быть связано как с падением концентрации, так и изменением подвижности носителей заряда. Была проведена оценка энергии активации подвижности носителей заряда в синтезированных структурах, из которой следует, что отжиг в вакууме для всех образцов приводит к увеличению ΔE , что может быть связано с увеличением длины прыжка между локализованными состояниями.

Ключевые слова: оксидные полупроводники, удельное электрическое сопротивление, термовольтаический эффект, термоэзд, термообработка

Введение

В настоящее время весьма актуальным является применение термоэлектрических генераторов для прямого преобразования тепловой энергии в электричество. Принцип работы таких генераторов основан на эффекте Зеебека, а коэффициент полезного действия ограничен крайне малой величиной термоэлектрической добротности известных в настоящее время термоэлектрических материалов, поэтому активно ведутся работы по синтезу новых термоэлектриков с высокой добротностью, однако за последние несколько десятков лет данный подход не привел к значительному прорыву в области термоэлектричества.

Другим направлением в области прямого преобразования тепла в электричество является поиск новых физических эффектов. К таким новым эффектам можно отнести открытый сотрудниками Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН в 2000 году термовольтаический эффект, который был впервые обнаружен в градиентных образцах моносulfида самария SmS [1-4]. Эффект заключается в том,

что при равномерном нагревании, т.е. в условиях отсутствия перепада температур (в отличие от эффекта Зеебека), на противоположных гранях двухслойного, градиентным образом легированного, полупроводникового образца возникает электрическое напряжение, которое получило название термовольтаического отклика. Термоэлектрический преобразователь на основе данного эффекта обладает рядом преимуществ перед устройствами, принцип работы которых основан на эффекте Зеебека: отсутствие необходимости создания градиента температуры, меньший вес и др. [5].

Помимо полупроводниковых структур на основе sulfида самария термовольтаический отклик был обнаружен также и в других материалах [6, 7]. К сожалению, физическая природа термовольтаического эффекта до конца не ясна, поэтому изучение данного эффекта и его связи с электрическими свойствами составляющих градиентный образец слоев как в уже известных, так и в новых системах позволит расширить температурный интервал, увеличить КПД и создать предпосылки к разработке более эффективных термоэлектрических преобразователей.

В связи с этим целью данной работы является исследование влияния термообработки на особенности электропереноса в тонких пленках ZnO , $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$, а также на термовольтаический отклик в двухслойных тонкопленочных структурах $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ как в исходном состоянии, так и после термообработки.

Ильяшев Илья Сергеевич – ВГТУ, студент, e-mail: zengaming@mail.ru

Калинин Юрий Егорович – ВГТУ, д-р физ.-мат. наук, профессор, e-mail: kalinin48@mail.ru

Макагонов Владимир Анатольевич – ВГТУ, мл. науч. сотрудник, e-mail: vlad_makagonov@mail.ru

Панков Сергей Юрьевич – ВГТУ, аспирант, e-mail: srgpank@mail.ru

Ситников Александр Викторович – ВГТУ, д-р физ.-мат. наук, профессор, e-mail: sitnikov04@mail.ru

Образцы и методика эксперимента

Тонкие пленки ZnO , $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ и двухслойные тонкопленочные структуры $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ были получены методом ионно-лучевого распыления керамической мишени на подложку из ситалла в вакууме не хуже $P = 10^{-2}$ Па [8]. Керамическая мишень размером $280 \times 80 \text{ мм}^2$ представляла из себя пластины ZnO , закрепленные на медном водоохлаждаемом основании. Для получения слоев $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ на поверхность мишени ZnO вдоль длины подложки неравномерным образом были установлены навески чистого Fe, что позволило в одном цикле напыления получить слои $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ с различным содержанием железа. Формирование двухслойных структур $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ происходило в две стадии. Вначале было проведено напыление слоя чистого ZnO , затем поверх него был напылен слой $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$. Время напыления каждого из слоев составляло 3 часа.

Параллельно формированию двухслойной структуры $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ для изучения структуры и электрических свойств индивидуальных слоев в едином цикле напыления были получены образцы пленок ZnO и $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$.

Толщина слоев определялась при помощи интерферометра Линника и составляла около 3 мкм. Таким образом, общая толщина двухслойной структуры была равна 6 мкм. Содержание Fe в слое $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ было определено с помощью электронно-зондового микроанализа, который показал, что содержание Fe в полученном слое изменялось от 6,46 до 16,7 ат. %.

Для определения фазового состава полученных слоев был проведен рентгеноструктурный анализ образцов ZnO и $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ (рис. 1-4). Дифрактограммы были получены на рентгеновском дифрактометре Bruker D2 Phaser с использованием медного ($\text{CuK}\alpha_1$) излучения. Обработка результатов проводилась в программе DIFFRAC SUITE Eva 3.0 с кристаллографическими базами данных ICDD PDF-2 2012.

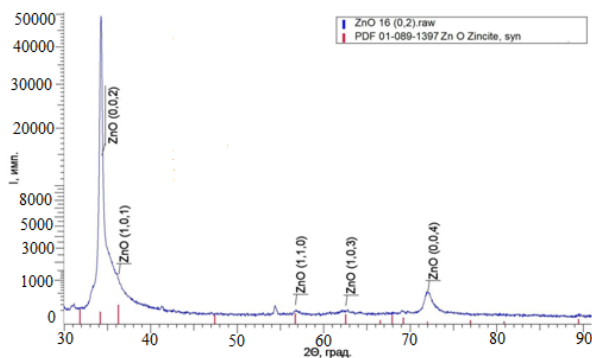


Рис. 1. Дифрактограмма тонкой пленки ZnO ($\lambda_{\text{CuK}\alpha_1} = 1.54 \text{ \AA}$)

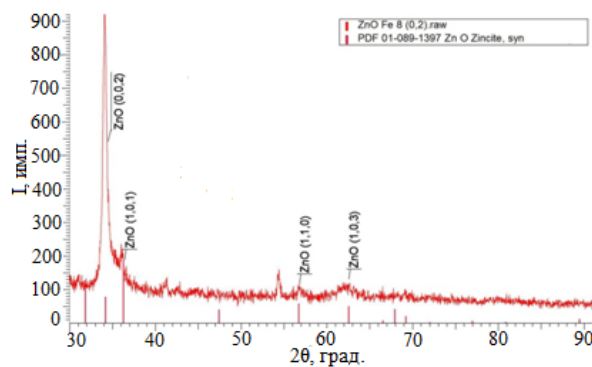


Рис. 2. Дифрактограмма тонкой пленки $\text{Zn}_{0.78}\text{Fe}_{0.22}\text{O}$ ($\lambda_{\text{CuK}\alpha_1} = 1.54 \text{ \AA}$)

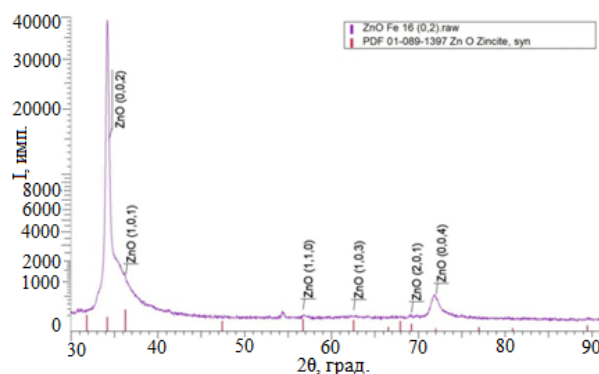


Рис. 3. Дифрактограмма тонкой пленки $\text{Zn}_{0.86}\text{Fe}_{0.14}\text{O}$ ($\lambda_{\text{CuK}\alpha_1} = 1.54 \text{ \AA}$)

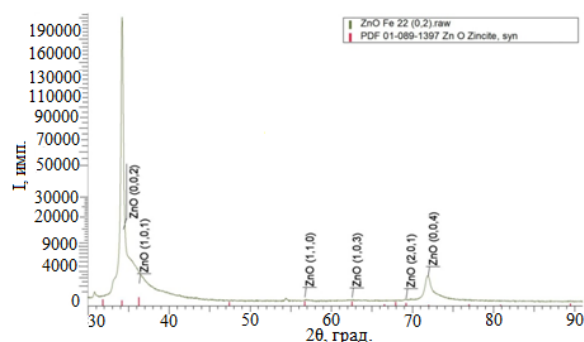


Рис. 4. Дифрактограмма тонкой пленки $\text{Zn}_{0.89}\text{Fe}_{0.11}\text{O}$ ($\lambda_{\text{CuK}\alpha_1} = 1.54 \text{ \AA}$)

Анализ полученных дифрактограмм показал, что слои чистого ZnO состоят из одной кристаллической фазы с гексагональной решеткой вюрцита (пространственная группа $R\bar{6}3mc$). Оценка параметров элементарной ячейки дала значения $a = 3,360 \pm 0,001 \text{ \AA}$ и $c = 5,240 \pm 0,002 \text{ \AA}$. Сравнивая полученные значения с табличными параметрами ($a = 3,325 \text{ \AA}$ и $c = 5,205 \text{ \AA}$), можно сделать вывод, что в процессе ионно-лучевого напыления на неподвижную подложку формируются тонкие пленки кристаллического ZnO с дефектной структурой, что приводит к увеличению параметров a и c . Оценка размеров кристаллитов по формуле Шеррера

$$d = \frac{k\lambda}{\beta \cos \theta}, \quad (1)$$

где d – средний размер кристаллов; k – безразмерный коэффициент формы частиц (постоянная Шеррера); λ – длина волны рентгеновского излучения; β – ширина рефлекса на полувысоте (в радианах и в единицах 2θ); θ – угол дифракции (брегговский угол), дает достаточно большие значения – 30–50 нм. Добавление Fe не приводит к появлению новых фаз, но проявляется в изменении параметров элементарной ячейки ($a = 3,353 \pm 0,001 \text{ \AA}$ и $c = 5,250 \pm 0,002 \text{ \AA}$) по сравнению с чистыми пленками ZnO, полученных в аналогичных условиях. Данный факт свидетельствует о том, что атомы железа входят в кристаллическую решетку оксида цинка и образуют либо твердый раствор замещения, либо твердый раствор внедрения на основе ZnO.

Сравнивая интенсивности рефлексов с данными карточки PDF 01-089-1397 базы данных ICDD PDF 2012, можно сделать вывод, что как пленки чистого ZnO, так и пленки $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ являются сильно текстурированными с осью текстуры $\langle 001 \rangle$, что на дифрактограммах (рис. 1 – 4) выражается в виде увеличения интенсивностей от рефлексов (002) и (004).

Для измерения термовольтаического отклика в высокотемпературном диапазоне температур была разработана и сконструирована установка аналогичной конструкции, описанной в [1]. Для контроля температуры образца на его концах устанавливали две термодпары хромель-алюмель. Для измерения ЭДС, а также удельного электрического сопротивления (двухзондовым методом) образца были использованы одноименные ветви термодпар.

Результаты экспериментов и их обсуждение

На рис. 5 представлены зависимости термовольтаического отклика (U_{TV}) от температуры для двухслойных структур $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ в исходном состоянии. Согласно полученным данным, для всех изученных образцов значения термовольтаического отклика монотонно увеличиваются с повышением температуры. Увеличение содержания Fe приводит к увеличению угла наклона графика зависимости $U_{TV} \sim f(T)$. Максимальное значение отклика составило около 1500 мкВ при 350 °С для образца $\text{Zn}_{0,79}\text{Fe}_{0,21}\text{O}$.

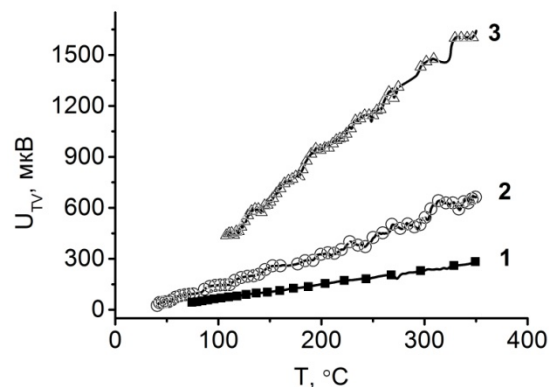


Рис. 5. Зависимости термовольтаического отклика от температуры для двухслойных структур $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ в исходном состоянии:

1 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0,89}\text{Fe}_{0,11}\text{O}$; 2 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0,86}\text{Fe}_{0,14}\text{O}$;
3 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0,79}\text{Fe}_{0,21}\text{O}$

Для изучения влияния термообработки на термовольтаический отклик двухслойной структуры $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ образцы были подвергнуты отжигу при температуре 400 °С на воздухе и в вакууме (не хуже 10^{-1} Па) в течение 30 минут. Данная температура была выбрана как наиболее оптимальная, исходя из результатов, представленных в работе [7].

После термообработки зависимости термовольтаического отклика от температуры (рис. 6а и б) качественно не изменились: с увеличением T значения термовольтаического отклика увеличиваются, однако наклон зависимости $U_{TV} \sim f(T)$ становится меньше, чем в исходном состоянии. При этом угол наклона зависимостей образцов, термообработанных на воздухе больше, чем для образцов, отожженных в вакууме. Особенностью полученных зависимостей является то, что увеличение содержания железа в верхнем слое приводит к более сильному снижению термовольтаического эффекта после термообработки по сравнению с исходным состоянием.

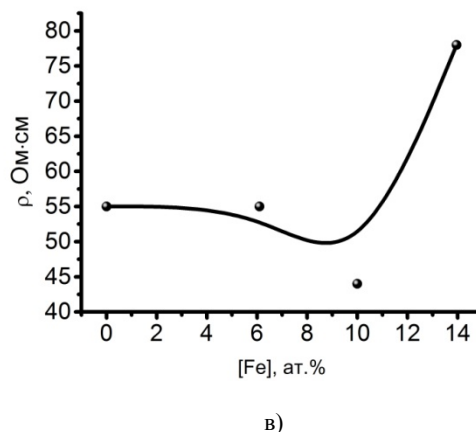
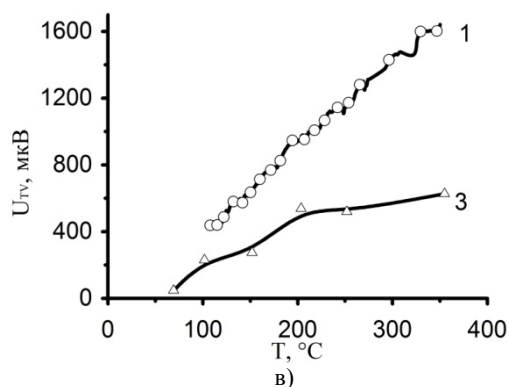
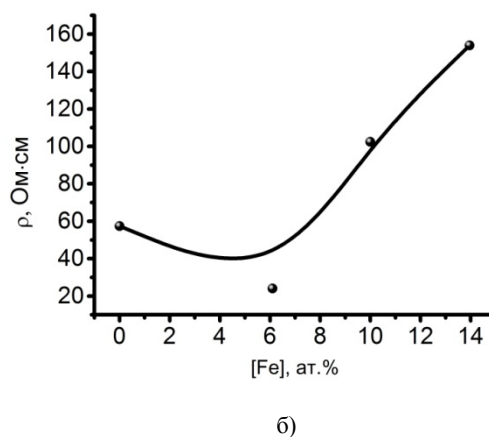
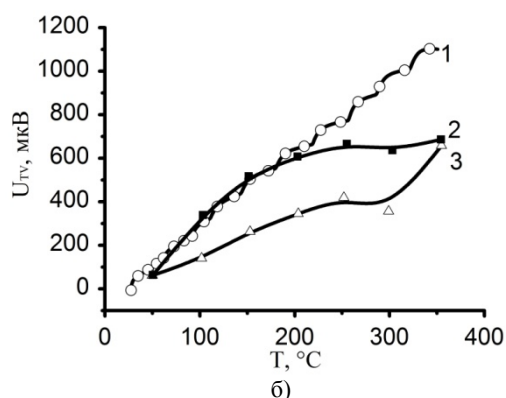
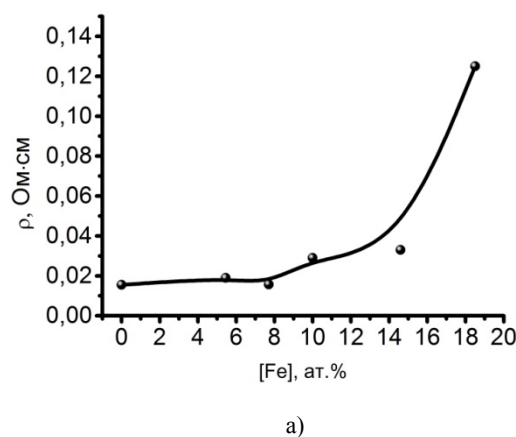
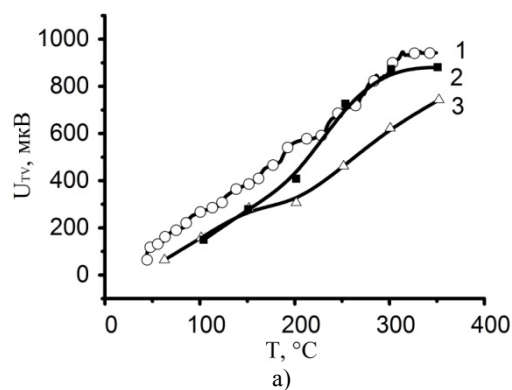
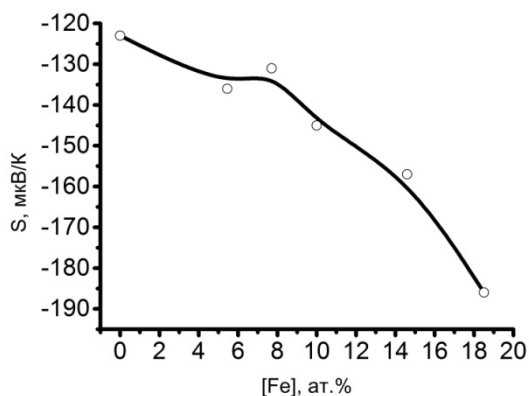


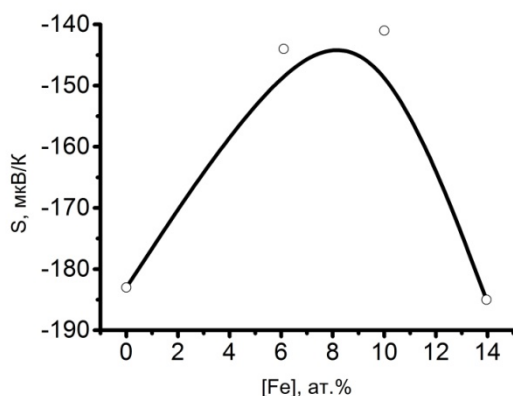
Рис. 6. Зависимости термоэлектрического отклика от температуры для образцов $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.89}\text{Fe}_{0.11}\text{O}$ (а), $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.86}\text{Fe}_{0.14}\text{O}$ (б), $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.79}\text{Fe}_{0.21}\text{O}$ (в) в исходном состоянии и после термообработки: 1 – исходный образец; 2 – после термообработки на воздухе при 400°C в течение 30 мин; 3 – после термообработки в вакууме при 400°C в течение 30 минут

Для установления физической природы появления термоэлектрического отклика в двухслойных структурах $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.79}\text{Fe}_{0.21}\text{O}$ были исследованы зависимости удельного электрического сопротивления и термоэдс слоев ZnO и $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ от концентрации Fe, измеренные при комнатной температуре, как для исходных образцов, так и после термообработки на воздухе и в вакууме (рис. 7 и 8).

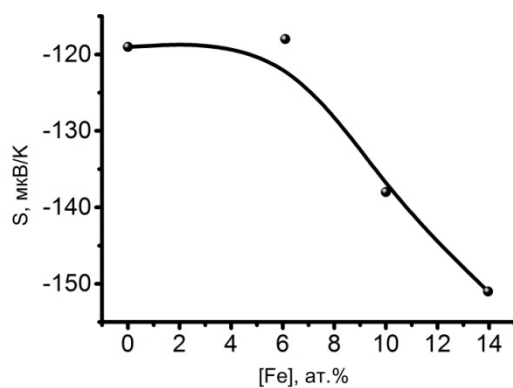
Рис. 7. Зависимости удельного электрического сопротивления тонких пленок $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ от содержания Fe (точка при 0 ат. % Fe соответствует чистому ZnO): а – исходные образцы; б – после термообработки в вакууме 400°C в течение 30 минут; в – после термообработки в воздухе при 400°C в течение 30 минут



а)



б)



в)

Рис. 8. Зависимости термоэдс тонких пленок $Zn_xFe_{1-x}O$ от содержания Fe (точка при 0 ат. % Fe соответствует чистому ZnO):
а – исходные образцы; б – после термообработки в вакууме 400 °C в течение 30 минут;
в – после термообработки в воздухе при 400 °C в течение 30 минут

Термообработка всех образцов $Zn_xFe_{1-x}O$, включая чистый ZnO, ведет к увеличению удельного электрического сопротивления, причем термообработка в вакууме приводит к более высоким значениям ρ , чем обработка в воз-

душной атмосфере. Учитывая малый размер зерна и отрицательный знак термоэдс, можно предположить, что электропроводность в синтезированных пленках является электронной и определяется переносом носителей заряда по границам зерен. Поскольку пленки были синтезированы в вакууме, то для них характерно наличие избытка атомов цинка, что предполагает наличие вакансий кислорода [9]. Исследование пленок оксида цинка, полученных методом магнетронного нанесения, с помощью спектроскопии резерфордского обратного рассеяния показало, что пленки имеют состав ZnO_x , где $0.7 < x < 1$ [10]. Следовательно, электронный тип проводимости ZnO может быть обусловлен наличием собственных дефектов и образованием нестехиометричного оксида $Zn_{1+\delta}O$.

Рост удельного электрического сопротивления после термической обработки пленок ZnO связан как с падением концентрации, так и подвижности носителей заряда [11]. При этом рост удельного электрического сопротивления при отжиге большей частью происходит благодаря падению подвижности носителей [11], что, вероятно, связано с захватом атомов кислорода при термообработке поверхностью тонкой пленки. Причины более сильного роста удельного электрического сопротивления после термообработки в вакууме по сравнению с образцами, обработанными в воздушной атмосфере, пока не ясны и требуют дополнительных исследований.

В исходных образцах для всех значений концентраций железа знак термоэдс отрицательный, что свидетельствует о доминирующем влиянии электронов в переносе заряда. Термообработка тонких пленок не повлияла на знак носителей заряда, в то время как величина термоэдс изменяется (рис. 8). Термообработка в вакууме приводит к увеличению термоэлектродвижущей силы в пленках ZnO, а воздушной атмосфере практически не изменяет S . Для пленок $Zn_xFe_{1-x}O$ термоэдс изменяется по кривой с минимумом. Причины более сильного роста термоэдс чистых пленок ZnO после термообработки в вакууме по сравнению с образцами, обработанными в воздушной атмосфере, как-то связаны с ростом удельного электрического сопротивления, и пока также не понятны.

Возникновение термовольтаического отклика в двухслойных системах $ZnO/Zn_xFe_{1-x}O$ может быть объяснено в рамках представлений о температурных зависимостях подвижности либо концентрации свободных носителей заря-

да в полупроводниках. Рассмотрим случай, когда подвижность носителей заряда будет определяющей. В этом случае в оксидных полупроводниках для зависимости подвижности носителей заряда от температуры, в которых электроперенос определяется термоактивированными прыжками, должно быть справедливо уравнение:

$$\mu = \mu_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), \quad (2)$$

где μ_0 – постоянная; ΔE – энергия активации подвижности носителей заряда; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Тогда значение термовольтаического отклика в двухслойных системах $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ будет определяться разницей подвижностей носителей заряда в слоях ZnO и $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$.

Для оценки энергии активации подвижности носителей заряда в синтезированных структурах температурные зависимости термовольтаического отклика были перестроены в координатах $\ln U_{TV} = f(1/T)$ (рис. 9).

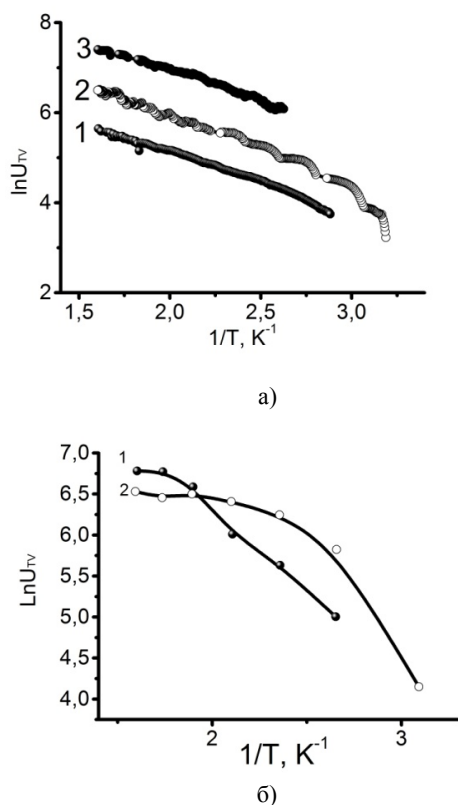


Рис. 9. Температурные зависимости термовольтаического отклика в координатах $\ln U_{TV} = f(1/T)$ в двухслойных структурах $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$: а – исходные образцы; б – после термообработки в воздушной атмосфере при 400 °С в течение 30 минут; в – после термообработки в вакууме при 400 °С в течение 30 минут; 1 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.89}\text{Fe}_{0.11}\text{O}$; 2 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.86}\text{Fe}_{0.14}\text{O}$; 3 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.79}\text{Fe}_{0.21}\text{O}$

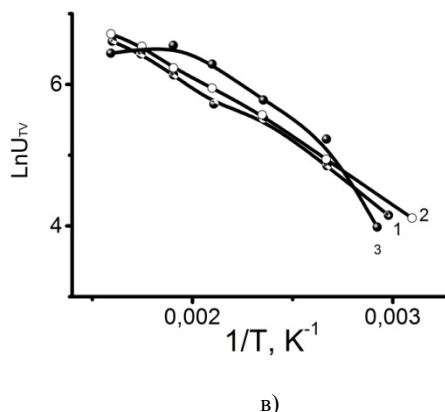


Рис. 9. Температурные зависимости термовольтаического отклика в координатах $\ln U_{TV} = f(1/T)$ в двухслойных структурах $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$:

а – исходные образцы; б – после термообработки в воздушной атмосфере при 400 °С в течение 30 минут; в – после термообработки в вакууме при 400 °С в течение 30 минут;

1 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.89}\text{Fe}_{0.11}\text{O}$; 2 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.86}\text{Fe}_{0.14}\text{O}$; 3 – $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.79}\text{Fe}_{0.21}\text{O}$ (продолжение)

Для образцов, находящихся в исходном состоянии и после термообработки, полученные зависимости хорошо описывались прямой линией, в отличие от термообработанных на воздухе. Рассчитанные значения энергии активации подвижности носителей заряда приведены в таблице.

Энергия активации подвижности носителей заряда в зависимости от состава и вида термообработки для двухслойных структур $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$, определенная из термовольтаического отклика

Образец	ΔE , эВ (исходное состояние)	ΔE , эВ (отжиг в вакууме)
$\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.89}\text{Fe}_{0.11}\text{O}$	$0,107 \pm 0,007$	$0,138 \pm 0,007$
$\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.86}\text{Fe}_{0.14}\text{O}$	$0,111 \pm 0,007$	$0,138 \pm 0,007$
$\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.79}\text{Fe}_{0.21}\text{O}$	$0,105 \pm 0,007$	$0,146 \pm 0,007$

Из таблицы следует, что для образцов в исходном состоянии энергия активации подвижностей носителей заряда в пределах погрешности не зависит от содержания железа. Отжиг в вакууме для всех образцов приводит к увеличению ΔE , которое может быть связано с увеличением длины прыжка между локализованными состояниями.

Таким образом, термическая обработка как в вакууме, так и на воздухе сопровождается снижением термовольтаического эффекта во всех исследованных двухслойных структурах.

Заключение

В работе исследовано влияние термообработки в вакууме и в атмосфере воздуха на термовольтаический эффект в двухслойных структурах $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$, полученных методом ионно-лучевого напыления. Установлено, что значения термовольтаического отклика после термообработки снижаются во всем интервале температур. Данная закономерность подтверждает гипотезу об определяющем влиянии подвижности носителей заряда на термовольтаический эффект.

Из зависимостей термовольтаического отклика от температуры была определена энергия активации для образцов в исходном состоянии и после термообработки в вакууме. Установлено, что энергия активации не зависит от содержания железа, а отжиг в вакууме для всех образцов приводит к увеличению ΔE , что может быть связано с увеличением длины прыжка между локализованными состояниями.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-08-36411).

Литература

1. Механизм возникновения электродвижущей силы при нагревании кристаллов SmS / В.В. Каминский, Л.Н. Васильев, М.В. Романова, С.М. Соловьёв // Физика твердого тела. – 2001. – Т. 43. – Вып. 6. – С. 997 – 999.
2. Каминский В.В. Дефектные ионы самария и эффект генерации электродвижущей силы в SmS / В.В. Каминский, А.В. Голубков Л.Н. Васильев // Физика твердого тела. – 2002. – Т. 44. – Вып. 8. – С. 1501 – 1505.
3. Каминский В.В. Термовольтаический эффект в тонкопленочных структурах на основе сульфида самария /

В.В. Каминский, М.М. Казанин // Письма в ЖТФ. – 2008. – Т. 34. – Вып. 8. – С. 92 – 94.

4. Термовольтаический эффект в гетероструктурах на основе сульфида самария с составом $\text{Sm}_{1-x}\text{Eu}_x\text{S}$ / В.В. Каминский, М.М. Казанин, С.М. Соловьёв, А.В. Голубков. // Журнал технической физики. – 2012. – Т. 82. – Вып. 6. – С. 142 – 144.

5. Пат. № 2303834 Российская Федерация. Термоэлектрический генератор (варианты) и способы изготовления термоэлектрического генератора / Каминский В.В., Голубков А.В., Казанин М.М., Павлов И.В., Соловьёв С.М., Шаренкова Н.В.; заявитель и патентообладатель ООО "ТЕХНОПРОЕКТ"; заявл. 22.06.2005 опубл. 27.07.2007.

6. Саидов А.С. Термовольтаический эффект в варизонном твердом растворе $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($0 \leq x \leq 1$) / А.С. Саидов, А.Ю. Лейдерман, А.Б. Каршиев // Письма в ЖТФ. – 2016. – Т. 42. – Вып. 14. – С. 21 – 27.

7. Электрические свойства двухслойных тонкопленочных структур $\text{ZnO}/\text{ZnO}-\text{Fe}$ / Ю.Е. Калинин, В.А. Макагонов, С.Ю. Панков, А.В. Ситников // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2016. – Т. 12. – № 4. – С. 66 – 70.

8. Планарный эффект Холла и анизотропное магнитосопротивление в слоистых структурах $\text{Co}_{0.45}\text{Fe}_{0.45}\text{Zr}_{0.1}/\text{a-Si}$ с перколяционной проводимостью / Б.А. Аронозон, А.Б. Грановский, Ю.Е. Калинин, С.Н. Николаев, В.В. Рыльков, А.В. Ситников, В.В. Тугушев // ЖЭТФ. – 2006. – Т. 129. – Вып. 7. – С. 127 – 136.

9. Electrical properties and non-stoichiometry in ZnO single crystals. / E. Ziegler, A. Heinrich, H. Oppermann, G. Stöver // Phys. Stat. Sol. (a). – 1981. – V. 66. – P. 635-648.

10. Brett M.J. Structural properties of non-stoichiometric zinc oxide films / M.J. Brett, R.R. Parsons // J. Mater. Sci. – 1987. - V. 22. - P. 3611-3614.

11. Электрические свойства тонких плёнок $\text{ZnO}:\text{B}$ синтезированных МOCVD / Х.А. Абдуллин, Ш.Р. Адилев, Л.В. Гриценко, Н.Р. Гусейнов, Д.В. Исмаилов, Ж.К. Калкозова, С.Е. Кумеков, Ж.О. Мукаш, Е.И. Теруков // Вестник КазНТУ. – 2015. – № 5. – С. 142-147.

Воронежский государственный технический университет

EFFECT OF HEAT TREATMENT ON ELECTRICAL PROPERTIES TWO-LAYER THIN-FILM STRUCTURES $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$

I.S. Iyashev¹, Yu.E. Kalinin², V.A. Makagonov³, S.Yu. Pankov⁴, A.V. Sitnikov⁵

¹Student Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: zengaming@mail.ru

²Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: kalinin48@mail.ru

³Engineer, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: vlad_makagonov@mail.ru

⁴Graduate Student, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: srgpank@mail.ru

⁵Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: sitnikov04@mail.ru

Thin films of ZnO , $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ and double-layered $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ thin-film structures were prepared by ion-beam sputtering. XRD analysis of the ZnO and $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ samples showed that the films are crystallized in hexagonal wurtzite lattice (space group P6₃mc). The effect of heat treatment on electric properties of ZnO , $\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ thin films and double-layered structures $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ have been investigated after thermal annealing at 400 °C during 30 minutes in vacuum and in air atmosphere. The dependencies of thermovoltaic response of double-layered structures $\text{ZnO}/\text{Zn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ at 25 – 350 °C showed that after heat treatment in vacuum and air atmosphere, the value of thermovoltaic response is decreased. Thermal annealing leads to

increase of resistivity that can be explained by the reduction of carrier concentration and a change of charge carriers' mobility. The activation energy of charge carriers' mobility for synthesized structures has been evaluated. Paper shows that the annealing in vacuum for all samples leads to an increase in ΔE , which can be associated with an increase of the hopping length between localized states

Key words: oxide semiconductors, electrical resistivity, thermovoltaic effect, thermopower, heat treatment

References

1. Kaminskii, V.V. Vasiliev L.N., Romanova M.V., Soloviev S.M. "The mechanism of electromotive force when heated crystals SmS", *Solid state physics (Fizika tverdogo tela)*, 2001, vol. 43, pp. 997 – 999.
2. Kaminskii V.V., Golubkov A.V., Vasiliev L.N. "Defective samarium ions and the effect of generating electromotive force in SmS", *Solid state physics (Fizika tverdogo tela)*, 2002, vol. 44, pp. 1501 – 1505.
3. Kaminskii V.V. Kazanin M.M. "Thermovoltaic effect in thin-film structures on the basis of samarium sulfide", *Technical physics letters (Fiziko-technicheskie zapiski)*, 2008., vol. 34, pp. 92 – 94.
4. Kaminskii V.V., Kazanin M.M., Soloviev S.M., Golubkov "A.V. Thermovoltaics effect in heterostructures on the basis of samarium sulfide with the composition $\text{Sm}_{1-x}\text{Eu}_x\text{S}$ ", *Technical physics letters (Fiziko-technicheskie zapiski)*, 2012, vol. 82, pp. 142 – 144.
5. Kaminskii V.V., Golubkov A.V., Kazanin M.M., Pavlov I.V., Soloviev S.M., Sharenkova N.V. "Thermoelectric generator and methods of making a thermoelectric generator, *Patented Study* no. 2303834, 2007.
6. Saidov A.S. Leiderman A.U., Karshiev A.B. "Thermovoltaics effect in graded gap solid solution $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($0 \leq x \leq 1$)", *Technical physics letters (Fiziko-technicheskie zapiski)*, 2016, vol. 42, pp. 21 – 27.
7. Yu.E. Kalinin, V.A. Makagonov, S.Yu. Pankov, A.V. Sitnikov "The electrical properties of two-layer thin-film structures ZnO/ZnO-Fe", *Bulletin of Voronezh state technical University*, 2016, vol. 12, pp. 66 – 70.
8. Arozon B.A., Granivskii A.B., Kalinin Yu.E., Nikolaev S.N., Ril'kov V.V., Sitnikov A.V., Tugushev V.V. "Planar Hall effect and anisotropic magnetoresistance in layered structures $\text{Co}_{0.45}\text{Fe}_{0.45}\text{Zr}_{0.1}/\text{a-Si}$ with percolation conductivity" *Technical physics letters (Fiziko-technicheskie zapiski)*, 2006, vol. 129, pp. 127 – 136.
9. Ziegler E., Heinrich A., Oppermann H., Stöver G. "Electrical properties and non-stoichiometry in ZnO single crystals", *Phys. Stat. Sol. (a)*, 1981, vol. 66, pp. 635-648.
10. Brett M.J., Parsons R.R. "Structural properties of non-stoichiometric zinc oxide films", *Material Science* 1987, vol. 22, pp. 3611-3614.
11. Abdullin H.A., Adilov S.R., Gricenko L.V., Guseinov N.R., Ismailov D.V., Kalkozova Z.K., Kumehov S.E., Mukash Z.O., Terujov E.I. "Electrical properties of thin films of zno in the synthesized MOCVD", *KazNTU Bulletin (Vestnik Kazntu)*, 2015, no.5, pp. 142-147.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СОРБЦИИ-ДЕСОРБЦИИ МЕТАНА СИЛИКАЛИТОМ

Д.С. Куцова, Е.В. Богатиков, А.Н. Шебанов, Д.Г. Куликов, Е.Н. Бормонтов

Методом молекулярно-динамического моделирования в пакете LAMMPS установлено повышение эффективности десорбции метана из внутрипорового пространства силикалита при использовании осциллирующего нагрева. При молекулярно-динамическом моделировании использовалась динамическая модель каркаса цеолита на основе связывающего потенциала, включающего гармоническое слагаемое и трехчастичный член. Для описания взаимодействий между адсорбентом и цеолитом использовался потенциал Леннарда-Джонса. Такие потенциалы позволяют адекватно воспроизвести как взаимодействие каркаса цеолита с адсорбентом, так и влияние температуры на кинетические процессы в системе цеолит-метан. Получены кинетические зависимости для процессов сорбции и десорбции при различных температурах. Обнаружена область температур, для которой скорость процесса десорбции метана из заполненного цеолита превышает скорость сорбции метана незаполненным цеолитом. Полученный результат позволяет объяснить эффективность осциллирующего нагрева. Решается уравнение баланса для кинетики процессов сорбции-десорбции. Результаты молекулярно-динамического моделирования используются для нахождения температурных зависимостей параметров уравнения баланса. На основе кинетической модели сорбционно-десорбционных процессов показано, что повышение эффективности десорбции при осциллирующем нагреве действительно обусловлено видом температурной зависимости скоростей сорбции и десорбции. Предложено использование осциллирующего нагрева для регенерации газочувствительного слоя сенсоров на основе силикалита

Ключевые слова: силикалит, метан, сорбция, молекулярно-динамическое моделирование

Введение

Благодаря своим адсорбционным и селективным свойствам цеолиты могут быть использованы в газочувствительных датчиках [1]. Хорошими адсорбентами цеолиты делает развитая система каналов и пор (диаметром от 0,3 до 1,0 нм, в зависимости от типа цеолита). Малый диаметр пор позволяет разделить молекулы адсорбтива по силе взаимодействия с кристаллическим каркасом цеолита, что делает возможным распознавание состава сложных газовых смесей одним сенсором [2]. Однако развитая система каналов цеолита усложняет регенерацию газочувствительного слоя, требуя применения нагрева до достаточно высоких температур. В результате реализация сенсора сталкивается с проблемами теплоотвода и высокого энергопотребления.

Эффективным инструментом поиска оптимальных условий работы газочувствительных сенсоров является молекулярно-динамическое моделирование. В работе [3] при исследовании процессов десорбции метана из силикалита (цеолита, наиболее удобного для

моделирования) в пакете молекулярно-динамического моделирования LAMMPS [4] было показано повышение эффективности десорбции за счет использования импульсного нагрева.

Цель настоящей работы — установление кинетических закономерностей процессов сорбции и десорбции метана для выяснения причин повышения эффективности десорбции при импульсном нагреве по сравнению с десорбцией при изотермической выдержке.

Детали расчетов

Моделируемая система состоит из решетки силикалита размером 5x5x5 элементарных ячеек и 40000 молекул метана (при давлении ~ 1 атм). Вид потенциального поля выбран таким образом, чтобы обеспечить воспроизведение подвижности структур молекул и каркаса цеолита. Потенциальное поле представлено двумя составляющими:

$$V_{tot} = V_{intra} + V_{inter}, \quad (1)$$

где V_{intra} — потенциал взаимодействия атомов внутри молекул, V_{inter} — потенциал межмолекулярного взаимодействия. Межатомное взаимодействие внутри структур в общем случае описано потенциалом следующего вида:

$$V_{intra} = k_r(r - r_0)^2 + k_\theta(\theta - \theta_0)^2, \quad (2)$$

Куцова Дарья Сергеевна — ВГУ, аспирант, e-mail: potanina.ds@gmail.com

Богатиков Евгений Васильевич — ВГУ, канд. физ.-мат. наук, доцент, e-mail: evbogatikov@yandex.ru

Шебанов Александр Николаевич — ВГУ, ассистент, e-mail: anshebanov@hotmail.com

Куликов Денис Геннадьевич — ВГУ, аспирант, e-mail: denko.90@mail.ru

Бормонтов Евгений Николаевич — ВГУ, д-р физ.-мат. наук, профессор, e-mail: me144@phys.vsu.ru

где k_r - жесткость связи, r - длина связи, r_0 - равновесная длина связи, k_θ - упругость валентного угла, θ - значение валентного угла, θ_0 - равновесное значение валентного угла.

Параметры потенциалов представлены в табл. 1, 2 [5, 6]. В отличие от работы [7] при моделировании решетки цеолита не использовался торсионный член связывающего потенциала, а также были использованы измененные значения параметров потенциала. Это позволило добиться стабильного поведения решетки при длительном моделировании.

Таблица 1

Параметры потенциала валентных связей

Вещество	Связь	k_r , кДж/(моль·Å ²)	r_0 , Å
Силикалит	O-Si	1246.832	1.649
CH ₄	C-H	711.7557	1.09

Таблица 2

Параметры потенциала валентных углов

Вещество	Связь	k_θ , кДж/(моль·рад ²)	θ_0 , град
Силикалит	O-Si-O	288.696	109.47
	Si-O-Si	37.656	141
CH ₄	H-C-H	73.2690	109.5

Межмолекулярное взаимодействие представлено в виде потенциала Леннарда-Джонса:

$$V_{\text{inter}} = 4\varepsilon_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad r < r_c, \quad (3)$$

где ε_0 - глубина потенциальной ямы, r - межчастичное расстояние, σ - масштабная константа ($V_{\text{inter}}=0$ при $r=\sigma$), r_c - расстояние отсечки потенциала.

Используемые при моделировании параметры потенциала Леннарда-Джонса для атомов одного сорта представлены в табл. 3.

Таблица 3

Параметры потенциала Леннарда-Джонса

Вещество	Атом	σ , Å	ε_0 , кДж/моль
Силикалит	Si	4.009	0.5334
	O	2.890	0.6477
CH ₄	C	3.4	0.2330
	H	2.963	0.2771

Коэффициенты для расчета взаимодействий атомов разного сорта определялись по формулам среднего арифметического и средне-

го геометрического для характеристических длины σ и энергии ε (правила смешивания Лоренца-Бертело):

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \cdot \varepsilon_j}, \quad (4)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}. \quad (5)$$

В расчетах для межмолекулярных взаимодействий всех пар частиц использовался радиус отсечки $r_c = 12.5$ Å. Моделирование осуществлялось с использованием периодических граничных условий. Все системы моделировались с применением NVT - ансамбля (постоянные N - число частиц, V - объем, T - температура). Равномерное распределение молекул газа задавалось утилитой Packmol [8], обеспечивая нормальное начальное давление.

При исследовании кинетики сорбции моделирование проводилось для температур от 273 К до 433 К при нулевой начальной заполненности цеолита метаном (что соответствовало условиям начала сорбции после максимально эффективной регенерации сорбента при импульсном нагреве). Десорбция исследовалась при температурах от 293 К до 433 К при начальной заполненности, соответствующей температуре 273 К (что соответствовало условию начала регенерации после максимально возможного пассивного охлаждения при импульсном нагреве). Для каждой температуры проводилось по 5 вычислительных экспериментов длительностью 2 нс.

Результаты и обсуждение

По кривым изменения числа молекул метана внутри цеолита определялась максимальная скорость сорбции/десорбции (рис. 1, 2).

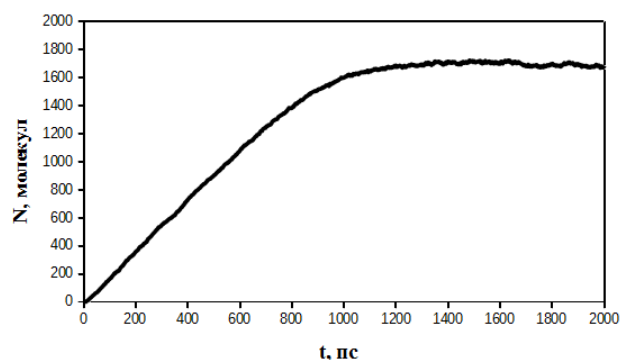


Рис. 1. Кинетика процесса сорбции метана цеолитом, T = 373 К, начальная заполненность нулевая

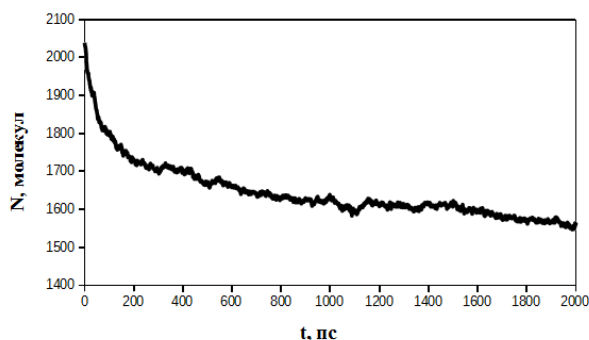


Рис. 2. Кинетика процесса десорбции метана из цеолита, $T = 373$ К, начальная заполненность соответствует максимальной заполненности при $T = 273$ К

Как видно из рис. 3, существует область температур, в которой скорость десорбции из заполненного цеолита превышает скорость сорбции цеолитом незаполненным. В результате поглощение молекул при снижении температуры происходит более медленно, чем выход молекул из внутрисорбционного пространства сорбента при повышении температуры. Это приводит к тому, что при неизменной средней температуре системы эффективность десорбции в условиях осцилляции температуры возрастает.

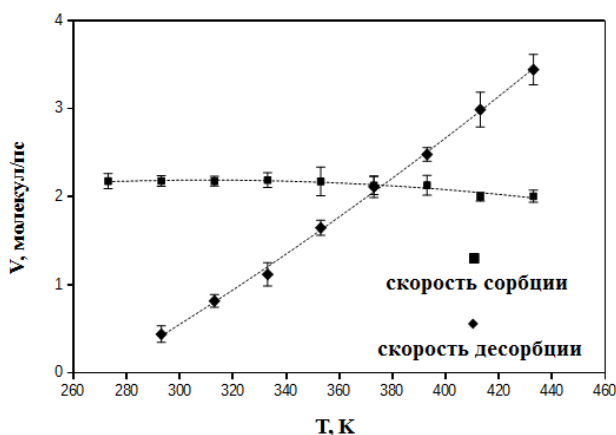


Рис. 3. Температурная зависимость скоростей процессов сорбции и десорбции для системы силикалит-метан

Данные молекулярно-динамического моделирования могут быть использованы для определения параметров кинетического уравнения сорбции. Уравнение баланса для кинетики сорбции может быть представлено в рамках положений теории Ленгмюра [9] следующим образом:

$$\frac{dN}{dt} = w_s(T) \cdot N_g \cdot (N_{\max} - N_s) / N_{\max} - w_d(T) \cdot N_s, \quad (6)$$

где N_s – количество адсорбированных молекул, N_g – количество молекул в газовой фазе, $N_{\max}$ – предельная заполненность цеолита, $w_s(T)$ – вероятность адсорбции молекулы, зависящая от температуры, $w_d(T)$ – вероятность десорбции молекулы, зависящая от температуры.

Решение уравнения баланса с учетом температурной зависимости коэффициентов w_s и w_d , полученной по данным МД-моделирования, показывает, что включение в определенный момент времени осцилляций температуры действительно способствует более эффективной десорбции по сравнению с изотермической выдержкой (рис. 4).

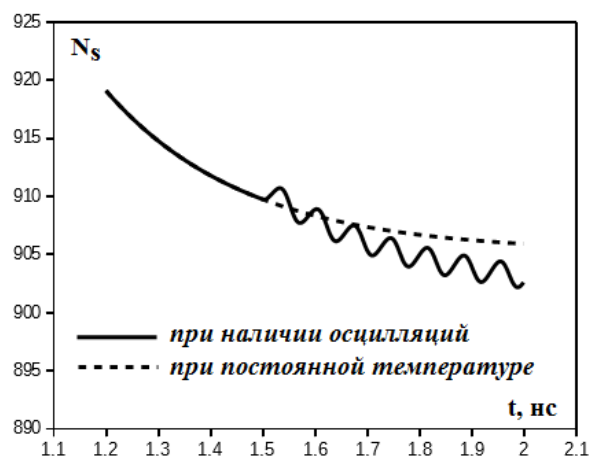


Рис. 4. Повышение эффективности десорбции при включении осцилляций температуры

Закключение и выводы

Анализ кинетики сорбционно-десорбционных процессов с учетом их температурной зависимости может позволить оптимизацию температурного режима регенерации газочувствительных сорбентов. Температурная зависимость сорбционных процессов в цеолитах определяется многими факторами, аналитический учет которых довольно сложен. Поэтому эффективным инструментом для определения параметров сорбционных процессов является молекулярно-динамическое моделирование.

Полученные результаты показывают, что при реализации импульсного нагрева вместо постоянного может быть оптимизирована задача теплоотвода при регенерации газочувствительных сенсоров на основе цеолитов.

Литература

1. Reib S. Zeolite-based Impedimetric Gas Sensor Device in Low-cost Technology for Hydrocarbon Gas Detection / S. Reib, G. Hagen, R. Moos // *Sensors*. - 2008. - Vol.8. - P. 7904-7916.
2. Анализ состава сложной газовой смеси сенсором на основе цеолита / Д.С. Куцова, Е.В. Богатилов, А.Н. Шебанов, К.Г. Смирнова, Г.И. Глушков // *Нано- и микросистемная техника*. - 2016. - Т.18. - № 9. - С. 589-592.
3. Куцова Д.С. Молекулярно-динамическое моделирование процессов десорбции в силикалите при импульсном нагреве / Д.С. Куцова, Е.В. Богатилов, А.Н. Шебанов // *ФАГРАН-2015: материалы VII Всерос. конф.* – Воронеж, 2015. - С. 505-506.
4. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // *J. Comp. Phys.* - 1995. - Vol. - 117. - P. 1-42.
5. Choi S.G. Preliminary Molecular Dynamics Simulation Studies of H-Y Zeolite in a Non-Rigid Zeolite Framework / S.G. Choi, S.H. Lee // *Bull. Korean Chem. Soc.* - 1999. - Vol. 20. - № 4. - P. 445-450.
6. Vela S. A molecular dynamics simulation of methane adsorption in single walled carbon nanotube bundles / S. Vela, F. Huarte-Larranaga // *Carbon*. - 2011. - Vol. 49. - P. 4544-4553.
7. Куцова Д.С. Моделирование сорбции метансодержащей воздушной смеси силикалитом / Д.С. Куцова, Е.В. Богатилов, А.Н. Шебанов // *Конденсированные среды и межфазные границы*. - 2015. - Т. 17. - № 2. - С. 165-170.
8. Packmol: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations / L. Martínez, R. Andrade, E. G. Birgin, J. M. Martínez // *Journal of Computational Chemistry*. - 2009. - Vol. 30. - № 13. - P. 2157-2164.
9. Булярский С.В. Адсорбция атомов и молекул углеродными нанотрубками / С.В. Булярский, А.С. Басаев // *Нано- и микросистемная техника*. - 2009. - Т. 113. - № 12. - С. 7-21.

Воронежский государственный университет

SIMULATION OF METHANE SORPTION AND DESORPTION IN SILICALITE

D.S. Kutsova¹, E.V. Bogatnikov², A.N. Shebanov³, D.G. Kulikov⁴, E.N. Bormontov⁵

¹ Graduate student, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: potanina.ds@gmail.com

² PhD, Associate Professor, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: evbogatnikov@yandex.ru

³ Assistant, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: anshebanov@hotmail.com

⁴ Graduate student, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: denko.90@mail.ru

⁵ Full Doctor, Professor, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: me144@phys.vsu.ru

Increasing the efficiency of methane desorption from silicalite with the use of oscillating heating is discovered by the method of molecular dynamic modeling in the LAMMPS package. In molecular dynamics modeling, a dynamic model of the zeolite framework was used on the basis of the binding potential, which includes a harmonic term and a three-particle term. To describe the interactions between the adsorbent and the zeolite, the Lennard-Jones potential was used. Such potentials allow adequately reproducing both the interaction of the zeolite framework with the adsorbent and the effect of temperature on the kinetic processes in the zeolite-methane system. Kinetic dependencies for sorption and desorption processes at various temperatures are obtained. A temperature range has been discovered for which the rate of desorption of methane from the filled zeolite exceeds the rate of sorption of methane by an empty zeolite. The result obtained makes it possible to explain the efficiency of oscillating heating. The balance equation for the kinetics of sorption-desorption processes is solved. The results of molecular dynamics modeling are used to find the temperature dependences of the parameters of the balance equation. Based on the kinetic model of sorption-desorption processes, it is shown that the increase in the desorption efficiency under oscillating heating is indeed due to the form of the temperature dependence of the rates of sorption and desorption. The use of oscillating heating for the regeneration of a gas sensitive layer of sensors based on silicalite is proposed

Key words: silicalite, methane, sorption, molecular dynamics

References

1. Reib S., Hagen G., Moos R., "Zeolite-based Impedimetric Gas Sensor Device in Low-cost Technology for Hydrocarbon Gas Detection", *Sensors*, 2008, vol. 8, pp. 7904-7916.
2. Kutsova D. S., Bogatnikov E. V., Smirnova K. G., Shebanov A. N., Glushkov G. I. "Analysis of the composition of a complex gas mixture with a zeolite based sensor", *Nano and microsystem technology (Nano- i mikrosistemnaya tekhnika)*, 2016, vol. 18, no. 9, pp. 589-592.

3. Kutsova D. S., Bogatikov E. V., Shebanov A. N. "Molecular-dynamic modeling of desorption processes in silicalite under pulsed heating conditions", *Proceedings of FAGRAN-2015*, 2015, pp. 505-506.
4. Plimpton S. "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics", *Complimentary Physics*, 1995. vol. 117, pp. 1-42.
5. Choi S.G., Lee S.H. "Preliminary Molecular Dynamics Simulation Studies of H-Y Zeolite in a Non-Rigid Zeolite Framework", *Bulletin of Korean Chemistry Society*, 1999, vol. 20, no. 4, pp. 445-450.
6. Vela S. A, Huarte-Larranaga F. "Molecular dynamics simulation of methane adsorption in single walled carbon nanotube bundles", *Carbon*, 2011, vol. 49, pp. 4544-4553.
7. Kutsova D. S., Bogatikov E. V., Shebanov A. N. "Simulation of a methane-containing air mixture with silicalite sorption", 2015, vol. 17, vol. 2, pp. 165-170.
8. Martínez L., Packmol A., Birgin E. G. "A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations", *Journal of Computational Chemistry*, 2009, vol.30, no.13, pp. 2157-2164.
9. Bulyapiskij S. V., Basaev A. S "Adsorption of atoms and molecules by carbon nanotubes", *Nano and microsystem technology (Nano- i mikrosistemnaya tekhnika)*, 2009, vol. 113, no. 12, pp. 7-21.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ТЕРМОЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКОЙ ЭДС В УСЛОВИЯХ НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

А.В. Сидоров, В.М. Грабов, А.А. Зайцев, Д.В. Кузнецов, Д.А. Нарциссов

В работе на основе сравнения результатов вычислительного и натурного эксперимента проводится исследование термоэлектрокинетического эффекта: перекрестного эффекта, формирующегося в вязких электропроводящих средах при участии трех термодинамических сил, описываемого в рамках термодинамики необратимых процессов. Обосновывается математическая модель явления, которая представляет собой систему нелинейных, нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных, записанных для непрерывной электропроводной среды из уравнений баланса массы, энергии и электрического заряда. Формулируется алгоритм расчета термоэлектрокинетической ЭДС (ТЭК ЭДС), на основе построенной модели проводится вычислительный эксперимент. В ходе вычислительного эксперимента рассчитывается величина ТЭК ЭДС для различных значений подвижностей и теплот переноса ионов электропроводящей среды, ее температуры и концентрации, оценивается вклад сопутствующих эффектов. Сравнение полученных расчетных зависимостей с имеющимися в литературе экспериментальными позволяет сделать вывод, что построенная модель адекватно описывает основные качественные закономерности термоэлектрокинетического эффекта. Дальнейшее усовершенствование модели позволит на основе количественного сравнения результатов лабораторного и вычислительного эксперимента уточнять важные характеристики электропроводной среды и детально установить микроскопический механизм формирования новых, недавно открытых термоэлектрокинетических явлений

Ключевые слова: математическое моделирование, перекрестные эффекты, термодинамика необратимых процессов, тепломассоперенос

Перекрестные явления переноса относятся к классу неравновесных явлений, которые могут быть описаны в рамках феноменологической термодинамики неравновесных процессов. Наиболее исследованы перекрестные явления, обусловленные действием двух термодинамических сил, т.е. градиентами соответствующих физических величин [1, 2]. Менее известны и соответственно менее изучены процессы переноса, вызванные действием трех и более термодинамических сил. Так в работе [3] впервые на основе теоретического анализа предсказано существование нового класса перекрестных явлений в вязких электропроводящих средах при действии трех термодинамических сил и наличии переноса массы, внутренней энергии, и электрического заряда. Причем перенос

массы осуществляется одновременно процессами молекулярной и конвективной диффузии, что отличает данное явление, от процессов термодиффузии в электропроводящих средах, описанных в материале [1]. В работе [4] впервые экспериментально исследован эффект формирования термоэлектрокинетической ЭДС в вязких электропроводящих средах, водных растворах ионных соединений, обусловленной переносом электрического заряда при наличии переноса массы (гидродинамического потока) и переноса внутренней энергии (наличии градиента температуры). На основании обобщения термодинамики необратимых процессов Онзагера на случай действия трех термодинамических сил сделан вывод о том, в этих условиях формируются перекрестные термоэлектрокинетические явления, в которых термодинамические потоки пропорциональны произведению двух термодинамических сил [5], например, поток электрического заряда при действии перепада температуры и давления оказывается пропорциональным произведению градиентов этих величин.

В работе [6] показано, что термоэлектрокинетический эффект может быть описан в рамках уравнений феноменологической теории неравновесных процессов при учете дополнительного

Сидоров Александр Валентинович – ЕГУ им. И.А. Бунина, канд. физ.-мат. наук, доцент, тел. 8-920-519-29-82
 Грабов Владимир Минович – РГПУ им. А.И. Герцена, д-р физ.-мат. наук, профессор, тел. 8-911-767-15-59
 Зайцев Андрей Анатольевич – ЕГУ им. И.А. Бунина, канд. физ.-мат. наук, доцент, тел. 8-910-742-53-52
 Кузнецов Денис Владимирович – ЕГУ им. И.А. Бунина, канд. физ.-мат. наук, доцент, тел. 8-910-359-17-16
 Нарциссов Дмитрий Алексеевич – ЕГУ им. И.А. Бунина, аспирант, тел. 8-960-145-59-66

слагаемого, описывающего принудительную конвекцию вязкой электропроводящей среды. В [7] исследована математическая модель для одного из вариантов опыта, в котором макроскопический поток жидкости отсутствует, а термоэлектрокинетическая ЭДС формируется за счет переноса заряда в электропроводящей жидкости термодиффузионными потоками, созданными движущимся источником тепла, однако модель позволяла только оценить порядок величины термоэлектрокинетической ЭДС. В [8] описана математическая модель термоэлектрокинетических явлений, построенная на основе поиска совместных решений системы уравнений физической кинетики для динамического и диффузионного переноса массы (частиц), переноса теплоты и электрического заряда. Вычислительный эксперимент, выполненный на основе этой модели, показывает хорошее согласие экспериментально измеренной и рассчитанной величины термоэлектрокинетической ЭДС в растворах однозарядных ионных соединений в пределе сильного разбавления. В отличие от ранее представленных, в данной работе построена модель, позволяющая рассчитать величину термоэлектрокинетической ЭДС для различных значений скорости течения и концентрации электролита, градиента температуры. Проводится вычислительный эксперимент определяющий вклад кинетических характеристик ионов: их подвижностей, теплот переноса, коэффициентов диффузии в формирование величины термоэлектрокинетической ЭДС.

В работе [4] была создана методика надежного измерения термоэлектрокинетической ЭДС (ТЭК ЭДС) в водных растворах электролитов. Схема эксперимента представлена на (рис. 1). Вязкая электропроводящая среда протекает по U – образной трубке, так что при наличии вертикального градиента температуры, обусловленного нагревом области 3 и охлаждением областей 1 и 2 или нагревом областей 1 и 2 и охлаждением области 3 как на (рис. 1), скорость течения направлена в одном из колен параллельно, в другом – антипараллельно градиенту температуры. Указанная неоднородность служит своеобразным “барьером” для ионов вязкой электропроводящей среды. Если подвижности ионов существенно различаются, то

проницаемость “барьера” будет для них не одинакова, что приведет к разделению зарядов и формированию разности электрических потенциалов φ_{12} между электродами (1, 2), рис. 1, которая в случае электрически разомкнутой цепи будет равна термоэлектрокинетической ЭДС (ТЭК ЭДС).

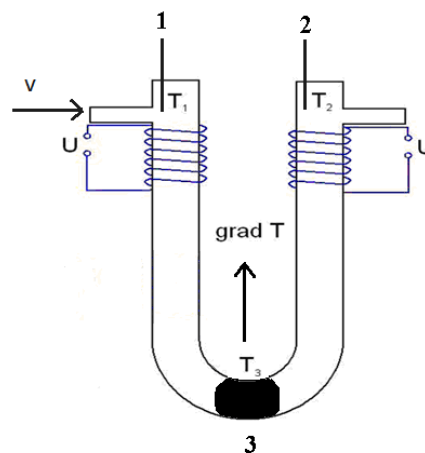


Рис. 1. Схема эксперимента по исследованию термоэлектрокинетического эффекта

Модельная схема, соответствующая схеме эксперимента, изображенной на (рис. 1), которая использовалась при численном моделировании, представлена на рис. 2. Согласно модели вдоль горизонтальной трубки осуществляется движение электропроводящей жидкости в направлении, показанном вектором v .

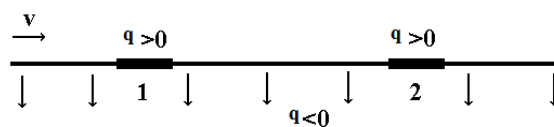


Рис. 2. Упрощенная модель эксперимента для рис. 1

В данной модели, вследствие горизонтального расположения трубки, можно пренебречь влиянием гравитационной силы и, следовательно, эффектом свободной конвекции в жидкости. Вследствие того, что диаметр трубки существенно превышает толщину приграничного слоя жидкости, в расчетной модели можно пренебречь краевыми эффектами стенок трубки и таким образом перейти к рассмотрению одномерной задачи. Области 1 и 2 содержат положительные источники теплоты. Для учета теплообмена трубки с окружающей средой предполагается, что вдоль одномерной среды непрерывно распределены отрицательные источники теплоты (рис. 2).

Основные уравнения модели представляют собой систему дифференциальных уравнений в частных производных тепло-, массопереноса с учетом принудительной конвекции электропроводной среды со скоростью v

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial x} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \omega, \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_k}{\partial t} = -\text{div} \bar{J}_k - \text{div}(c_k \bar{v}) \quad (2)$$

В уравнениях (1), (2) T – абсолютная температура, χ – коэффициент температуропроводности, ω – мощность источников тепла, c_k – объемная концентрация частиц вида k , их плотности потоков обозначены – J_k в системе отсчета, в которой поток растворителя равен нулю. Для сильно разбавленных растворов бинарного электролита, распадающегося на два вида ионов с зарядами $z_{\pm}$, плотности диффузионных потоков в приближении линейной неравновесной термодинамики можно представить

$$J_+ = -\frac{c_+ u_+}{Fz_+} \left(z_+ F \nabla(\varphi) + \frac{RT}{c_+} \nabla(c_+) + Q_+^* \frac{1}{T} \nabla(T) \right), \quad (3)$$

$$J_- = \frac{c_- u_-}{Fz_-} \left(z_- F \nabla(\varphi) + \frac{RT}{c_-} \nabla(c_-) + Q_-^* \frac{1}{T} \nabla(T) \right),$$

где $u_{\pm}$ – подвижности ионов, $Q_{\pm}^*$ – теплоты переноса ионов, φ – электрический потенциал, R и F – универсальная газовая постоянная и постоянная Фарадея соответственно. Двух уравнений (1) и (2) недостаточно для определения трех неизвестных функций – $T(x, t)$, $c_{\pm}(x, t)$, $\varphi(x, t)$, поэтому система (1), (2) дополняется уравнением, выражающим условие отсутствия тока в электрически разомкнутой цепи:

$$\sum_i z_i J_i = 0, \quad (4)$$

которое в приближении сильного разбавления, для раствора бинарного электролита и в пренебрежении зависимостью коэффициентов активности от концентрации позволяет выразить градиент электрического потенциала

$$\nabla \varphi = \frac{1}{F(z_+^2 a_{++} + z_-^2 a_{--})} \times \left(z_+ a_{++} \left(-RT \cdot \nabla(\ln(x_+)) - \frac{Q_+}{T} \nabla(T) \right) + z_- a_{--} \left(-RT \cdot \nabla(\ln(x_-)) - \frac{Q_-}{T} \nabla(T) \right) \right) \quad (5)$$

В последнем выражении введены обозначения

$$a_{++} = \frac{c_+ u_+}{Fz_+}, \quad a_{--} = -\frac{c_- u_-}{Fz_-}. \quad (6)$$

Таким образом, массоперенос в уравнениях (1) и (2) учитывается посредством слагаемых $\bar{v} \frac{\partial T}{\partial x}$ для уравнения

теплопроводности (1) и $\text{div}(c_k \bar{v})$ для уравнения конвективной диффузии (2). С точки зрения теории перекрестных процессов тем самым в уравнении (1) пренебрегают эффектом переноса теплоты за счет градиента концентрации, т.н. диффузионный термоэффект и термоэффект, обусловленный перепадом давления. Поскольку температурный перепад в эксперименте значителен и создается внешними нагревателями, то данное допущение не должно вносить существенных погрешностей в результаты расчета. В уравнении (2) учитываются процессы обычной диффузии, происходящей за счет градиента концентрации, термодиффузии под действием градиента температуры и перенос ионов под действием возникающего в электропроводной среде внутреннего электрического поля, и пренебрегается диффузией за счет градиента давления, т.н. бародиффузией.

Приведенные уравнения (1), (2), (5) с учетом выражений для плотностей потоков ионов (3) образуют замкнутую систему и позволяют вычислить распределение электрического потенциала в электролите.

Уравнения для концентрации (2) и температуры (1) являются дифференциальными уравнениями в частных производных. Даже если положить все параметры в уравнении (2) не зависящими от концентрации и температуры, оно будет нелинейным ввиду того, что в него входит пространственная производная неизвестной функции $T(x, t)$, которая сама будет нелинейной функцией координаты и времени. Поэтому для решения уравнения (1) необходимо будет использовать приближенные методы. Поскольку геометрия задачи не является сложной можно воспользоваться методом конечных разностей.

Для разрешения системы уравнений в частных производных задачу необходимо дополнить краевыми условиями. Задание

начальных условий представляется вполне естественным: положим, что концентрация и температура в момент времени $t = 0$ распределены равномерно по длине трубки и равны некоторым начальным значениям $T(0)$, $c(0)$, причем концентрации ионов одинаковы.

Задание граничных условий не является таким простым. Поскольку на возникновение термоэлектрокинетической ЭДС не оказывает влияние наличие границ, то для того, чтобы от них отвлечься, воспользуемся граничными условиями типа Дирихле, т.е. положим концентрацию и температуру на левой и правой границе равными постоянным значениям, в качестве которых естественно выбрать начальные значения $T(0)$, $c(0)$.

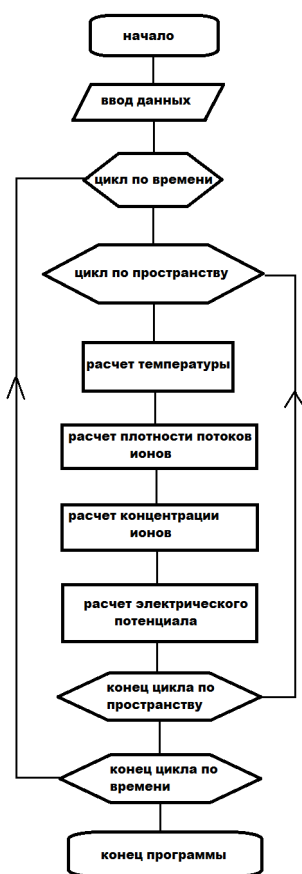


Рис. 3. Блок-схема расчета термоэлектрокинетической ЭДС

Для расчета уравнений математической модели используется метод конечных разностей, в области изменения независимых переменных вводятся сетки по пространственной координате: $x_i = x_0 + i\Delta x$ ($i=0...N$), и по времени: $t_j = t_0 + j\Delta t$ ($j=0...M$).

Производные в уравнениях (1,2) аппроксимируются конечными разностями

согласно четырехточечной разностной схеме [9].

В соответствии с вышеприведенной математической моделью был предложен алгоритм расчета термоэлектрокинетической ЭДС. Блок-схема алгоритма представлена на (рис. 3).

Для реализации представленного на рис. 3 алгоритма расчета термоэлектрокинетической ЭДС был выбран пакет прикладных математических программ для инженерных и научных расчетов Scilab, являющийся свободно распространяемым аналогом широко известного коммерческого приложения MATLAB.

С целью проверки адекватности построенной модели термоэлектрокинетического эффекта был выполнен вычислительный эксперимент. Для решения уравнения теплопроводности (1) выберем в качестве теплофизических параметров коэффициенты для чистой воды. Для разрешения уравнения диффузии (2) необходимо определиться с раствором электролита. Выберем типичный сильный электролит HCl . Согласно [10], при бесконечном разбавлении он диссоциирует на ионы H^+ , подвижность которых $u_+ = 3,6 \cdot 10^{-7}$ ($m^2/V \cdot c$) и ионы Cl^- , с подвижностью $u_- = 0,78 \cdot 10^{-7}$ ($m^2/V \cdot c$). Начальную концентрацию положим равной 0,03 моль/л, что соответствует типичным экспериментальным значениям. Согласно [11] предельные значения условных теплот переноса ионов H^+ и Cl^- равны соответственно $Q_+ = 7000$ и $Q_- = 7630$ Дж/моль.

В работе [4] были установлены основные закономерности термоэлектрокинетического эффекта в ряде водных растворов однозарядных ионных соединений (KOH , KCl , и др.), например зависимость величины ТЭК ЭДС от разности подвижности ионов раствора электролита. Если ионы противоположных знаков имеют подвижности, близкие по величине, например, в растворе KCl ($u_K = 7,6 \cdot 10^{-8}, m^2 \cdot B^{-1} \cdot c^{-1}$ и $u_{Cl} = 7,9 \cdot 10^{-8}, m^2 \cdot B^{-1} \cdot c^{-1}$) получается величина термоэлектрокинетической ЭДС в пределах погрешности измерений. Вычислительный эксперимент подтверждает данный результат, так на рис. 4 приведено сравнение рассчитанной согласно модели величины модуля ТЭК ЭДС для растворов HCl

и KCl при одинаковых начальных данных при установившихся значениях разности температур 27 К и скорости течения 0,05 мм/с.

Согласно результатам расчета, величина ТЭК ЭДС для раствора HCl составляет приблизительно 0,57 мВ, для раствора KCl – 0,11 мВ, последняя величина находится в пределах экспериментальной погрешности измерений.

Одной из закономерностей термоэлектрокинетического эффекта является пропорциональность величины ТЭК ЭДС величине перепада температуры. На рис. 5, 6 приведены расчетные и экспериментальные зависимости величины ТЭК ЭДС от разности температур для типичных сильных электролитов HCl и KOH при близких по величине фиксированных концентрациях и скоростях течения.

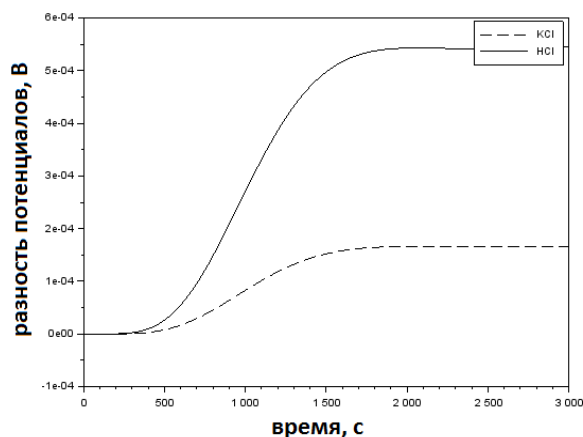


Рис. 4. Расчетная зависимость модуля ТЭК ЭДС для растворов концентрацией 0,03 моль/л при скорости течения 0,05 мм/с и установившемся перепаде температуры 27 К

Вычислительный эксперимент подтверждает данную закономерность, однако сравнение расчетных и экспериментальных зависимостей дает не слишком хорошее количественное согласие. Так, согласно данным эксперимента, величина ТЭК ЭДС в растворе KOH достигает 2 мВ при перепаде температур около 27 К, расчет для HCl при той же разности температур дает приблизительно 0,4 мВ.

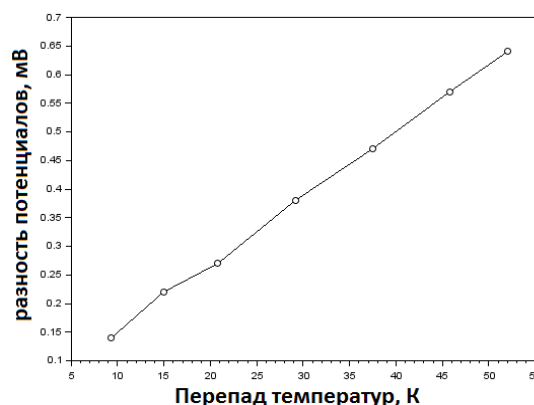


Рис. 5. Зависимость ТЭК ЭДС от разности температур вдоль трубок в растворе HCl концентрацией 0,08 моль/литр

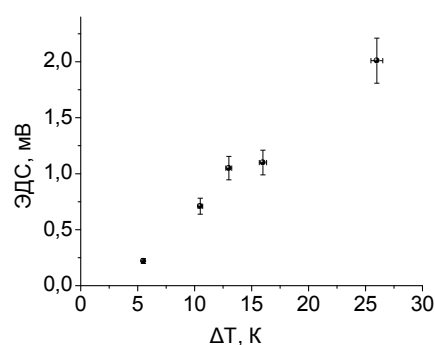


Рис. 6. Зависимость ТЭК ЭДС от разности температур вдоль трубок в растворе KOH концентрацией 0,089 моль/литр [4]

Указанное количественное различие может быть обусловлено как отсутствием надежных исходных данных по значениям характеристик ионов в растворах: теплоты переноса ионов, коэффициенты бародиффузии, коэффициенты подвижности и их зависимостям от концентрации, температуры и других факторов, так и обсуждаемым выше приближенным характером самой модели, пренебрежением в ней рядом сопутствующих эффектов: бародиффузии, свободной конвекции, электрокинетическим эффектом.

Так, согласно [10], при нагревании раствора на 1 К подвижность ионов в среднем возрастает примерно на 2%. Также, согласно экспериментальным данным [12], коэффициент Соре электролитов и, следовательно, теплоты переноса ионов сильно зависят от температуры, так для хлористого калия в интервале температур 295-318 К коэффициент Соре увеличивается в 4 раза. Другой причиной имеющегося количественного рассогласования может служить пренебрежение в расчетной модели эффектом бародиффузии. Учет

указанных эффектов может улучшить количественное согласие с экспериментом.

Еще одной закономерностью термоэлектрокинетического эффекта является пропорциональность ТЭК ЭДС величине концентрации раствора рис. 7. Вычислительный эксперимент показывает, что непосредственно от концентрации расчетная величина ТЭК ЭДС не зависит. Указанное противоречие, может быть, обусловлено рядом причин. Так в исходной модели не учитывается электрокинетический эффект, обуславливающий формирование потенциала течения, в случае течения электропроводной жидкости вдоль тонких капилляров [1].

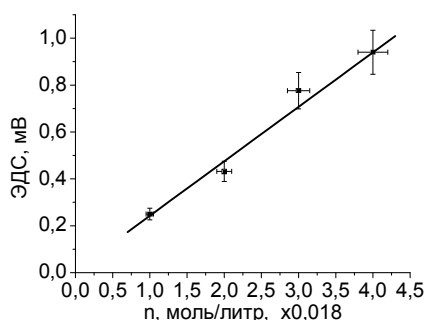


Рис. 7. Зависимость величины термоэлектрокинетической ЭДС в растворе гидроксида калия от концентрации электролита [4]

Еще одной причиной зависимости ТЭК ЭДС от концентрации может являться концентрационная зависимость кинетических коэффициентов. Например, в области сильного разбавления подвижности ионов слабо зависят от концентрации раствора и уменьшаются с ростом концентрации. В то же время теплоты переноса ионов обнаруживают сильную зависимость от концентрации, так согласно [11], коэффициент S_{ore} и, следовательно, теплоты переноса ионов в водном растворе хлористого калия в области малых концентраций обнаруживают практически линейную зависимость от молярности раствора.

Для проверки предположения о влиянии эффекта увеличения теплоты переноса ионов с ростом концентрации электролита на концентрационную зависимость ТЭК ЭДС на рис. 8 приведен график зависимости ТЭК ЭДС от величины теплоты переноса раствора, которая для бинарных растворов однозарядных соединений при бесконечном разбавлении будет равна просто сумме теплот переноса ионов. В расчете предполагается, что с ростом

теплоты переноса раствора разность теплот переноса ионов остается постоянной.

Результаты расчета показывают пропорциональность величины ТЭК ЭДС величине теплоты переноса раствора электролита, что совпадает с результатами эксперимента, если предположить, что с ростом концентрации увеличивается теплота переноса ионов рис. 8.

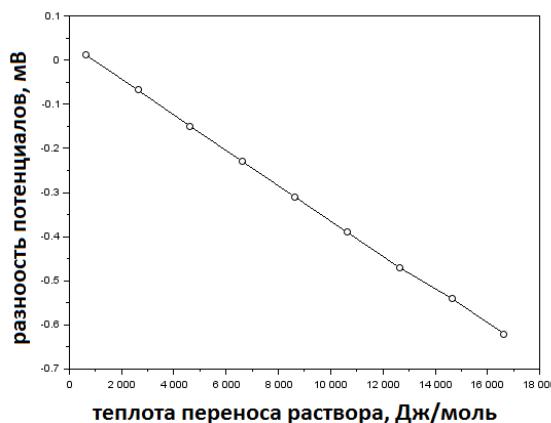


Рис. 8. Зависимость ТЭК ЭДС от теплоты переноса раствора HCl

Таким образом, сравнение результатов расчета с экспериментальными данными свидетельствует о необходимости совершенствования математической модели исследуемого класса перекрестных явлений. В частности, учета зависимости подвижностей и теплот переноса ионов от температуры и концентрации, исследования влияния перепада давления на диффузионные потоки ионов и величину формируемой ТЭК ЭДС, исследование вклада электрокинетического эффекта. Дело осложняется тем, что в литературе отсутствуют детальные экспериментальные данные по величинам теплот переноса ионов в растворах электролитов в широкой области температур и концентраций. Поэтому в дальнейшем на основе сравнения экспериментально измеренной величины термоэлектрической ЭДС в растворах электролитов с рассчитанной согласно рассматриваемой модели требуется определить теплоты переноса ионов при бесконечном разбавлении и их зависимости от концентрации и температуры.

Одним из существенных отличий термоэлектрокинетического эффекта от сопутствующего ему термоэлектрического является сохранение знака ТЭК ЭДС при

изменении направления градиента температуры на противоположное при сохранении направления скорости протекания раствора [4]. Вычислительный эксперимент подтверждает эту закономерность, обусловленную тем, что неоднородность в опыте является динамической.

Таким образом, основные качественные экспериментальные закономерности термоэлектрокинетического эффекта: зависимость ТЭК ЭДС от разницы подвижностей ионов электропроводящей среды, пропорциональность ТЭК ЭДС величине температурного градиента, сохранение знака ТЭК ЭДС при изменении направления градиента температуры на противоположное при сохранении направления скорости течения среды подтверждаются вычислительным экспериментом. Поэтому можно заключить, что построенная математическая модель перекрестных эффектов в водных растворах электролитов адекватно описывает результаты эксперимента.

Дальнейшее усовершенствование модели позволит проводить количественное сравнение результатов расчета термоэлектрической ЭДС и ТЭК ЭДС с экспериментальными данными, на базе которого могут быть определены важные характеристики электропроводящей среды и установлен микроскопический механизм формирования новых, недавно открытых термоэлектрокинетических явлений, которые, по-видимому, существенным образом определяют характер и величину электромагнитных явлений, протекающих в конвективных вихрях плазмы звезд [13], в процессах электро-, тепло- и массопереноса в океанах и атмосферах планет, физиологических жидкостях живых организмов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ и администрации Липецкой области, грант № 17-42-480248

Литература

1. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов / Р. Хаазе. - М.: Мир, 1967. - 544 с.
2. Франк-Каменецкий Д.А. Основы макрокинетики. Диффузия и теплопередача в химической кинетике / Д.А. Франк-Каменецкий. - Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2008. - 408 с.

3. Грабов В.М. Термоэлектрические явления в условиях, далеких от термодинамического равновесия / В.М. Грабов // Доклады VIII Межгосударственного семинара Термоэлектрики и их применения. - СПб.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2002. - С. 42-47.

4. Термоэлектрокинетический эффект в слабых водных растворах электролитов / В.М. Грабов, А.А. Зайцев, Д.В. Кузнецов, А.В. Сидоров, И.В. Новиков // Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки. - 2008. - № 3. - С. 112-123.

5. Новые перекрестные кинетические явления в вязких электропроводящих средах при действии трех термодинамических сил / В.М. Грабов, А.А. Зайцев, Д.В. Кузнецов, Р.Е. Пронин // Термоэлектрики и их применения: доклады XIII Межгосударственного семинара. - СПб.: ФБГУН ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2013. - С. 117-122.

6. Математическая модель термоэлектрокинетического эффекта / В.М. Грабов, А.В. Сидоров, А.А. Зайцев, Д.В. Кузнецов, А.В. Карпачев // Ученые записки Орловского государственного университета. Серия: Естественные, технические и медицинские науки. - 2013. - № 6. - С. 33-37.

7. Сидоров А.В. Моделирование нестационарных термодиффузионных потоков в вязких электропроводящих средах / А.В. Сидоров, Д.В. Кузнецов, А.А. Зайцев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки, 2014. - № 4 (32). - С. 142-153.

8. Сидоров А.В. Анализ термоэлектрокинетических явлений в вязкой электропроводящей среде на основе закономерностей физико-химической кинетики [Текст] / Сидоров А.В., Грабов В.М., Зайцев А.А., Кузнецов Д.В. // VIII Всероссийская конференция «Необратимые процессы в природе и технике». МГТУ им. Н.Э. Баумана. Москва, 2015. - С. 253-256.

9. Андерсон Д. Вычислительная гидромеханика и теплообмен: в 2-х т. / Д. Андерсон, Дж. Таннехилл, Р. Плетчер; пер. с англ. - М.: Мир, 1990. - 384 с.

10. Сухотин А.М. Справочник по электрохимии / А.М. Сухотин. - Л.: Химия, 1981. - 488 с.

11. Payton A.D. Soret coefficients and heats of transport of some salts of alkaline earth metals in water at 25°C / A.D. Payton, J.C.R. Turner // Trans. Faraday Soc. - 1962. - Vol. 58. - P. 55-59.

12. Longworth L.G. The Temperature Dependence of the Soret Coefficient of Aqueous Potassium Chloride / L.G. Longworth // J. Physic. Chem. - 1957. - Vol. 61. - № 11. - P. 1557-1562.

13. Грабов В.М. Физическое моделирование электромагнитных явлений в конвективной зоне Солнца / В.М. Грабов, А.А. Зайцев, Д.В. Кузнецов // Труды Всероссийской ежегодной конференции по физике Солнца. РАН, Главная (Пулковская) астрономическая обсерватория. - СПб., 2012. - С. 44-45.

Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина

Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, г. Санкт-Петербург

MODELING THE PROCESSES OF FORMATION OF THERMO-ELECTROKINETIC EMF IN THE CONDITIONS OF NON-STATIONARY HEAT-ASSISTANCE IN CONDENSED ENVIRONMENT

A.V. Sidorov¹, V.M. Grabov², A.A. Zaitsev³, D.V. Kuznetsov⁴, D.A. Nartsisov⁵

¹PhD, Associate Professor, Elets State University named after Bunin, Elets, Russian Federation
ph: 8-920-519-29-82

²Full Doctor, Professor, Russian State Pedagogical University named after Gerzen, Saint-Petersburg, Russian Federation
ph: 8-911-767-15-59

³PhD, Associate Professor, Elets State University named after Bunin, Elets, Russian Federation
ph: 8-910-742-53-52

⁴PhD, Associate Professor, Elets State University named after Bunin, Elets, Russian Federation
ph: 8-910-359-17-16

⁵Graduate Student, Elets State University named after Bunin, Elets, Russian Federation
ph: 8-960-145-59-66

Based on the comparison of the results of a computational and full-scale experiment, the investigation of the thermo-electrokinetic effect is made: the cross-effect formed in viscous electrically conductive environment with the participation of three thermodynamic forces described in the thermodynamics of irreversible processes. The mathematical model of the phenomenon is substantiated by the system of nonlinear, non-stationary partial differential equations written for a continuous electrically conductive medium from the equations of mass, energy, and electric charge balance. An algorithm for calculating the thermo-electrokinetic EMF (TEK EMF) is formulated, and a computational experiment is performed on the basis of the constructed model. In the course of the computational experiment, the value of the TEC EMF is calculated for different values of mobilities and heat transfer of ions of the electrically conductive medium. Its temperature and concentration, the contribution of the accompanying effects is also estimated. Comparing the obtained calculated dependencies with the available experimental ones allows us to conclude that the model constructed adequately describes the main qualitative laws of the thermo-electrokinetic effect. Further improvement of the model will make it possible, on the basis of a quantitative comparison of the results of a laboratory and a computational experiment, to refine the important characteristics of electrically conducting environment and to establish a detailed microscopic mechanism for the formation of new, recently discovered thermo-electrokinetic phenomena

Key words: mathematical modeling, cross effects, thermodynamics of irreversible processes, heat and mass transfer

References

1. Haase, R., "Thermodynamics of irreversible processes" ("Termodinamika neobratimyykh protsessov), Moscow: Mir, 1967, p. 544.
2. Frank-Kamenetsky D.A. "Basics of macrokinetics. Diffusion and heat transfer in chemical kinetics" ("Osnovy makrokinetiki. Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoy kinetike), *Dolgoprudny: Publishing house "Intellect"*, 2008, p. 408.
3. Grabov V.M. "Thermoelectric phenomena under conditions far from thermodynamic equilibrium", *Reports of the VIII Interstate Seminar of Thermoelectrics and Their Applications (Doklady VIII Mezhdgosudarstvennogo seminaru Termoelektriki i ikh primeneniya. - SPb.: FTI im. A.F. Ioffe RAN), SPb.: FTI them. A.F. Ioffe Academy of Sciences*, 2002, p. 42-47.
4. Grabov, A.A. Zaitsev, D.V. Kuznetsov, A.V. Sidorov, I.V. Novikov V.E "Thermoelectrokinetic effect in weak aqueous solutions of electrolytes" *Bulletin of the Moscow State Technical University (Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. N.E. Bauman. Seriya: Yestestvennyye nauki). N.E. Bauman. Series*, Natural Sciences, 2008, no. 3, pp. 112-123.
5. Grabov, A.A. Zaitsev, D.V. Kuznetsov, Pronin R.E. "New cross-section kinetic phenomena in viscous electrically conductive media under the action of three thermodynamic forces", *Thermoelectrics and their applications: reports of the 13th Interstate Seminar (Termoelektriki i ikh primeneniya: doklady XIII Mezhdgosudarstvennogo seminaru)*, SPb. FBGUN FTI, A.F. Ioffe Academy of Sciences, 2013, pp. 117-122.
6. A.V. Sidorov, A.A. Zaitsev, D.V. Kuznetsov, A.V. "Mathematical model of thermo-electrokinetic effect" *Scientific Notes of Orel State University. Series: Natural, technical and medical sciences (Uchenyye zapiski Orlovskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Yestestvennyye, tekhnicheskkiye i meditsinskiye nauki)*, 2013, no. 6, pp. 33-37.
7. Sidorov A.V. Kuznetsov D.V., Zaitsev A.A. "Modeling of non-stationary thermodiffusion flows in viscous electrically conductive media" *News of Higher Educational Establishments. The Volga region. Physics and mathematics (Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskkiye nauki)*, 2014, no. 4 (32), pp. 142-153.

8. Sidorov A.V., Grabov V.M., Zaitsev A.A., Kuznetsov D.V. "Analysis of thermo-electrokinetic phenomena in a viscous electrically conductive medium on the basis of regularities of physicochemical kinetics", *VIII All-Russian Conference "Irreversible processes in nature and technology (VIII Vserossiyskaya konferentsiya «Neobratimyye protsessy v prirode i tekhnike»)*, Moscow, 2015, pp. 253-256.
9. Anderson D., Tannehill J., Pletcher R. "Computational hydromechanics and heat exchange: in 2 tons", Moscow: *Mir*, 1990, p.384
10. Sukhotin A.M. "Handbook of Electrochemistry" ("Spravochnik po elektrokhimii"), *Khimiya (Chemistry)*, Leningrad, 1981, p.488.
11. Payton A.D., Turner J.C.R. "Soret coefficients of the salts of alkaline earth metals in water at 25 ° C", *Trans. Faraday Soc.*, 1962, vol. 58, pp. 55-59.
12. Longworth L.G. "The Temperature Dependence of the Soret Coefficient of Aqueous Potassium Chloride", *J. Physic. Chem.*, 1957, vol. 61, no. 11, pp. 1557-1562.
13. Grabov V.M., Zaitsev A.A., Kuznetsov D.V. "Physical modeling of electromagnetic phenomena in the convective zone of the Sun", *Proceedings of the All-Russian Annual Conference on the Physics of the Sun. RAS, Main (Pulkovo) Astronomical Observatory (Trudy Vserossiyskoy yezhegodnoy konferentsii po fizike Solntsa. RAN, Glavnaya (Pulkovskaya) astronomicheskaya observatoriya)*, SPb., 2012, pp. 44-45.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОБСТВЕННОЙ СПИНОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И РАЗМЕРНОГО МАГНЕТИЗМА В УЛЬТРАКОРОТКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ (0,9)

Г.И. Глушков, А.В. Тучин, Е.Н. Бормонтов

Рассмотрены проблемы и основные параметры для поиска новых материалов спиновой электроники - спинтроники. В качестве решения, удовлетворяющего критериям воспроизводимости, существованию спонтанной спиновой поляризации, селективности проводимости по отношению к спину, предложены ультракороткие углеродные нанотрубки. Установлено, что в узком интервале длин нарушается правило $3k$, и трубка проявляет полупроводниковые свойства, причем зазор между граничными орбиталями зависит от спина носителя. Анализ электронной структуры основного и возбужденного состояний подтверждает зависимость проводимости от спина носителя. Исследована возможность модуляции спиновой поляризации приложением внешних электрических полей и легирования металлическими примесями. Во внешних полях наблюдается увеличение спиновой поляризации до двух раз и рост разности проводимости для электронов с противоположными спинами. Впервые описан эффект инверсии спиновой поляризации, заключающийся в смене спина электронов основного канала проводимости. Расчетная приведенная энергия связи говорит о высокой стабильности структур во всем исследованном интервале длин. Дана оценка вклада примеси в общий магнитный отклик структур: допирование металлическими примесями приводит к росту спиновой поляризации, однако существует весомый вклад и чистой углеродной структуры в эффективный магнитный момент. Таким образом, ультракороткие углеродные нанотрубки удовлетворяют критериям применимости для разработки функциональных устройств спиновой электроники

Ключевые слова: спин, спиновая поляризация, спинтроника, углеродная нанотрубка

Введение. Современный рынок электроники ставит задачу поиска новых технологических решений для совершенствования характеристик интегральных микросхем. Развитие науки и техники привело к выделению новых отраслей электроники, одной из которых является спиновая электроника, или спинтроника, использующая спиновые свойства электрона, а не зарядовые как классическая электроника.

Устройства спинтроники базируются на переключениях между спиновыми состояниями и транспорте спинзависимых токов, иначе говоря, поляризованных по спину, таким образом возможность применения материала для разработки функциональных спинтронных определяется в основном двумя критериями: существованием двух устойчивых спиновых состояний и способностью к спинзависимому транспорту, т.е. различной проводимостью для электронов с противоположными спинами.

В настоящее время активно исследуется достаточно широкий спектр материалов, среди которых кластерные структуры, квантовые точки, наноструктурированные композиты, кремниевые наноструктуры, однако особое внимание уделяется углеродным материалам [1-12].

Тонкопленочные металлические структу-

ры, использованные в пионерских работах А. Ферта и П. Грюнберга, открывшие эру металлической спинтроники, чрезвычайно сложны в производстве, т.к. для наблюдения существенных изменений проводимости вследствие эффекта гигантского магнетосопротивления требуются пленки толщиной единицы нанометров.

Существенные успехи достигнуты в исследовании графеновых структур, на нанолентах сложной геометрии, разработаны прототипы быстродействующих логических вентилях, переключаемых сильным электрическим или магнитным полем, но данные структуры обладают низкой стабильностью, ввиду сложной геометрии, малой воспроизводимостью, существуют существенные технологические трудности при синтезе.

Особое внимание в последние годы среди углеродных материалов уделяется ультракоротким углеродным нанотрубкам (ук-УНТ), которые отличаются высокой термодинамической стабильностью. Разработаны различные методики синтеза, позволяющие получить ансамбль трубок с узким распределением по длине и хиральности. Свойства нанотрубок и их размерная модуляция достаточно хорошо описаны в ряде работ, однако мало освещен вопрос различных спиновых состояний и переходов между ними и существования спинзависимой проводимости. Электронная структура нанотрубок активно исследуется, и в ряде работ показано, что переход к наноразмерам приводит к значительной перестройке электронной структуры,

Глушков Григорий Иванович - ВГУ, аспирант, тел. 89525461253, e-mail: green5708@yandex.ru

Тучин Андрей Витальевич - ВГУ, канд. физ.-мат. наук, доцент, тел. 89081485775, e-mail: 24in@mail.ru

Бормонтов Евгений Николаевич - ВГУ, д-р физ.-мат. наук, профессор, e-mail: me144@zhys.vsu.ru

что приводит к кардинальному изменению электрофизических параметров.

Целью данной работы является теоретическое исследование условий наблюдения спонтанной спиновой поляризации, изменений электронной структуры при наноструктурировании, механизмов модуляции свойств ультратонких углеродных нанотрубок (0,9).

Детали расчетов. Объект исследования - ультратонкие закрытые углеродные нанотрубки (0,9) симметрий D_3 и D_{3h} , которые отличаются взаимной ориентацией шапок. Подробнее различия между данными типами симметрий были ранее описаны в работах [14-16]. В рамках работы проведен численный эксперимент в программном комплексе для решения квантово-химических задач Gaussian 09. Расчеты проводились на базе Суперкомпьютерного центра Воронежского государственного университета. Относительно малое число атомов в ук-УНТ позволяет использовать для расчетов методы квантовой химии, для моделирования применен метод теории функционала плотности, который широко применяется для моделирования параметров наноструктур и показывает достаточно высокое согласие с экспериментом. Использован обменный функционал B3LYP с базисным набором 6-31G, который обеспечивает достаточную точность расчета и согласие с экспериментом, что подтверждается рядом расчетных работ. Проведен расчет положения высшей занятой (HOMO) и низшей свободной (LUMO) молекулярных орбиталей, потенциала ионизации (IP), работы выхода (W), сродства к электрону (EA), оценка стабильности структур проводилась по приведенной энергии связи, разработана методика оценки спиновой поляризации электронов на основе анализа спектров свободных и занятых состояний (спектров DOS). При снятии размерных зависимостей наращивание длин проводилось дискретным увеличением числа кольцевых сегментов, исследован интервал длин до 3 нм.

Стабильность структур оценивалась по приведенной энергии связи - разнице между полной энергией и суммой энергий уединенных атомов. Расчеты показывают, что ук-УНТ обеих симметрий термодинамически стабильны во всем исследованном интервале длин.

Характеристика синглетного состояния.

Установлено, что в исследованном интервале длин не выполняется правило $3k$, и трубка становится полупроводниковой с ненулевой запрещенной зоной. Величина энергетического зазора между граничными орбиталями (E_{LH})

убывает в диапазоне 1,58..0,59 эВ для симметрии D_{3h} и 0,81..0,29 для симметрии D_3 соответственно при дискретном наращивании длины трубки. При дальнейшем увеличении длины трубки энергетический зазор стремится к нулю и правило $3k$ в пределе начинает выполняться. Зависимости потенциала ионизации, сродства к электрону имеют также убывающий характер, диапазоны изменения параметров: IP = 7,3 - 6,49 эВ, EA = 4,97-4,67 эВ, W = 2,84-2,65 эВ для симметрии D_{3h} и IP = 7,29 - 6,37 эВ, EA = 5,37-4,69 эВ, W = 3,44-3,02 эВ для D_3 соответственно.

Характеристика триплетного состояния. Переход в триплетное состояние сопровождается спинзависимой модуляцией зазора E_{LH} . Знак модуляции различен для ук-УНТ разных симметрий: так, для D_3 происходит уменьшение проводимости, вызванное увеличением E_{LH} на 0,1-0,5 эВ. Для трубок D_{3h} картина диаметрально противоположна, энергетический зазор снижается на 0,15-1,4 эВ и зависит от спина носителя, как видно из рис. 1. Разность зазора для электронов с противоположными спинами составляет от 0,011 до 0,231 эВ, что говорит о существенном различии в проводимости.

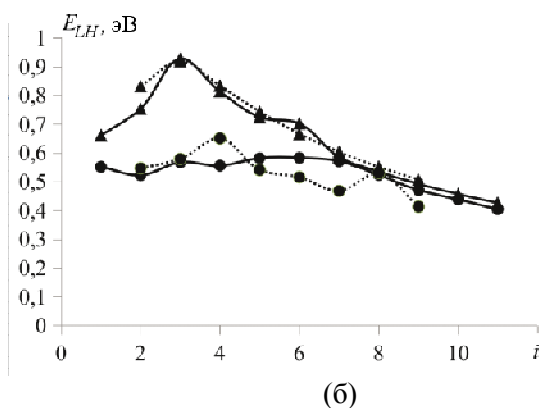
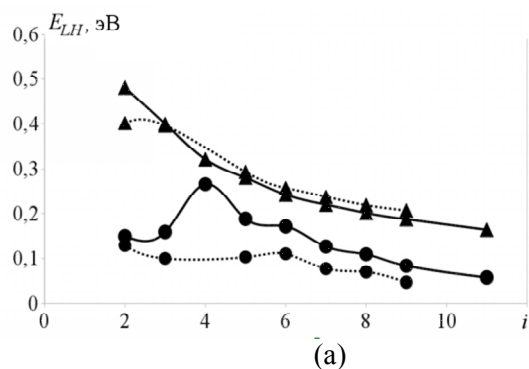


Рис. 1. Зависимость энергетического зазора E_{LH} в триплетном состоянии в отсутствии поля (сплошная линия) и для поля напряженностью 0,5 В/А (пунктирная линия) $E_{LH}(\uparrow)$ (круглые маркеры), $E_{LH}(\downarrow)$ (треугольные) от числа сегментов ук-УНТ (0, 9) симметрий D_{3h} (а) и D_3 (б)

По полученным данным видно, что в триплетном состоянии величина зазора между граничными орбиталями зависит от спина электрона, исходя из этого при оценке спиновой поляризации на основе рассчитанных методов DFT спектров DOS были определены квазиуровни Ферми для электронов со спинами вверх и вниз. Спиновая поляризация рассчитывалась как отношение разности концентрации электронов со спином вверх и вниз к их сумме на соответствующем уровне Ферми. Проводимость есть функция энергии Ферми, следовательно, проводимость для электронов со спином вверх и вниз различна, что является предпосылкой к возможности спинзависимого транспорта. Спиновая поляризация падает с ростом длины трубки с 14% до 1.3 % для симметрии D_{3h} и с 50% до 4% для D_3 , что показано на рис. 2.

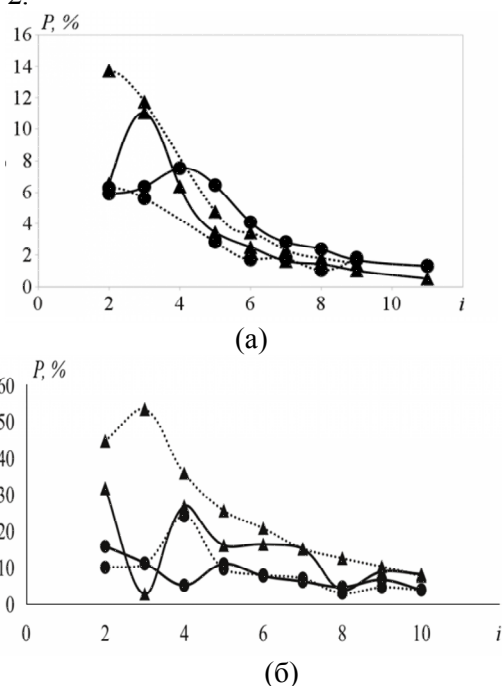


Рис. 2. Зависимость спиновой поляризации P в триплетном состоянии в отсутствии электрического поля (сплошная линия) и для поля напряженностью $0.5 \text{ V/\AA}$ (пунктирная линия) $P(\uparrow)$ (круглые маркеры), $P(\downarrow)$ (треугольные) от числа сегментов ук-УНТ (0, 9 симметрии D_{3h} (а) и D_3 (б))

Модуляция электронной структуры во внешнем электрическом поле. Приложение внешнего статического электрического поля приводит к штарковскому смещению граничных орбиталей, чувствительному к ориентации спина, что также дополнительно модулирует проводимость и спиновую поляризацию. Противоположная по знаку модуляция для электронов с разными спинами приводит к дополнительному увеличению спиновой поляризации. В сильных электрических полях порядка

$\sim 0.5 \text{ В/\AA}$ увеличение поляризации достигает 2 раз, а при критической величине поля наступает инверсия спиновой поляризации, т. е. более высокая поляризация наблюдается для электронов со спином “вниз”, проводимость для них становится значительно выше. Данный эффект может быть использован как основа для конструирования спиновых фильтров.

Модуляция электронной структуры при допировании. Допирование - технологический инструмент модуляции электронной структуры, практически все существующие методики синтеза ук-УНТ в той или иной мере используют металлические катализаторы, и следует осветить роль металлических примесей в наблюдении спонтанной спиновой поляризации. В работах Макаровой [16-18] показано, что невозможно объяснить магнетизм наноструктурированного углерода в рамках лишь “примесной” модели магнетизма. Предположение, что в углеродных структурах спиновый магнетизм обусловлен лишь кластеризацией металлических примесей при технологической обработке по расчетам, дает результирующий магнитный момент на 1-3 порядка ниже экспериментального. При попытках с помощью магнитной примеси получить сколько бы то ни было существенный магнитный отклик в активированном углероде примеси понадобилось порядка 6-8%. Экспериментальные исследования полимеризованных фуллеренов в образцах с чистотой не ниже 1 ppm подтверждают существование локальных областей намагниченности. Этот факт вкупе с результатами работы [14-19] заставляет признать, что при наноструктурировании углерод становится магнитным материалом, а примесь модулирует магнитные свойства, но не определяет их.

В рамках данной работы исследовалось влияние допирования щелочными металлами на примере лития и натрия. Было установлено, что на стабильность допированных комплексов существенное влияние оказывает заряд, нейтральные эндоэдральные комплексы нестабильны, но демонстрируют зарядовую стабильность. В синглетном состоянии эндоэдральный комплекс из нанотрубки и аниона лития (Li@ук-УНТ анион) также не стабилен, положение атома внутри трубки оказывается энергетически невыгодным по результатам минимизации функционала плотности состояний. В триплетном состоянии анион стабилизируется. Ион лития с эффективным зарядом $Q_{\text{eff}}(\text{Li})=1.014e$ ориентирован противоположно фронтальному гексагону на расстоянии $R_{\text{Li-}}$

$c=2.28 \text{ \AA}$ до его атомов углерода. Атомы гексагона имеют эффективный заряд $Q_{\text{eff}}(\text{C}) = -0.05e$. Спин-зависимая энергетическая щель $E_{\text{LH}}(\uparrow) = 0.70\text{--}0.21 \text{ эВ}$ и $E_{\text{LH}}(\downarrow) = 0.11\text{--}0.05 \text{ эВ}$ для $i=1\text{--}11$ уменьшается с увеличением длины.

Касаемо спиновой поляризации, выявлена инверсия для анионов эндоэдральных комплексов, ранее наблюдавшаяся лишь в сильных электрических полях, т. е. уменьшение спиновой поляризации с 48% до 1% для спина вверх и увеличением с 2,7% до 6,2% для спина вниз.

Качественно зависимости для натрия имеют аналогичный характер.

Выводы. Проведенный анализ электронной структуры, исследованные размерные зависимости фундаментальных параметров показывают, что необходимым условием для наблюдения значительной спиновой поляризации является ультрамалая длина порядка единиц нанометров, что позволяет регистрировать поляризацию чистых трубок. Экспериментально получение таких трубок является сложной технологической задачей, что существенно сужает сферу их применения в функциональных устройствах. Рассмотрено два способа “усиления” спиновой поляризации в указанных структурах: приложение сильных стационарных электрических полей и легирование металлическими примесями.

Современные методики синтеза в той или иной мере применяют металлические катализаторы при росте трубок, и включение металлических примесей является результатом этой технологии. Ряд работ показывает, что магнетизм наноструктур углерода невозможно объяснить лишь фактом присутствия в нем металлических включений.

Показано, что энергетический зазор между граничными орбиталями чувствителен к спину носителя, что является предпосылкой к использованию ук-УНТ в качестве материала для устройств, осуществляющих спиновый транспорт.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №16-32-00926 мол_а).

Литература

1. Bhaattacharya S. Spin transport properties of triarylamine-based nanowires / S. Bhaattacharya, A. Akande and S. Sanvito // *Chemical Communications*. - 2014. - Vol 50. - P. 6626.
2. Awschalom D.D. Challenges for semiconductor spintronics / D.D. Awschalom, M.E. Flatte // *Nature Communications*. - 2007. - Vol. 3. - P. 153-159.

3. Sanchez-Valencia J.R. Controlled synthesis of single-chirality carbon nanotubes / J.R. Sanchez-Valencia, T. Dienel, O. Gröning O et al. // *Nat. Lett.* - 2014. - Vol. 512. - P. 61.
4. Kato T. Direct Growth of Short Single-Walled Carbon Nanotubes with Narrow-Chirality Distribution by Time-Programmed Plasma Chemical Vapor Deposition / T. Kato, R. Hatakeyama // *ACS Nano*. - 2010. - Vol. 4. - P. 7395-7400.
5. Buonocore F. Ab initio calculations of electron affinity and ionization potential of carbon nanotubes / F. Buonocore, F. Trani, D. Ninno et al. // *Nanotech.* - 2008. - Vol. 19. - P. 025711.
6. Dresselhaus, M.S. Physics of carbon nanotubes / M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus et al. // *Carbon*. - 1995. - Vol. 33. - P. 883.
7. Finite-Size Effect and Wall Polarization in a Carbon Nanotube Channel / D. Lu, Y. Li, S. Rotkin, V. Ravaoli, U. Schulten // *Nano Lett.* - 2008. - Vol. 4. - P. 2383.
8. Titus A.B. Molecular dynamics simulations of ion transport through carbon nanotubes. I. Influence of geometry, ion specificity, and many-body interactions / A.B. Titus // *The Journal of Chemical Physics*. - 2010. - Vol. 132. - P. 164513.
9. Laser photodetachment of C60⁻ and C70⁻ ions cooled in a storage ring / C. Brink, L.H. Andersen, P. Hvelplund, D. Mathur, J.D. Voldstad // *J. Chem. Phys. Lett.* - 1995. - Vol. 233. - P. 52.
10. Cioslowski J. Electronic structures and energetics of [5,5] and [9,0] single-walled carbon nanotubes / J. Cioslowski, N. Rao and D. Moncrieff // *J. Am. Chem. Soc.* - 2002. - Vol. 124. - P. 8485.
11. Wu J. Adsorption of small hydrocarbon radicals on single walled carbon nanotubes of finite length / J. Wu and F. Hagelberg // *Phys. Rev. B*. - 2010. - Vol. 81. - P. 155407.
12. Tuchin A.V. Vibrational spectrum and electronic structure of C60-fullerene in an external electric field / A.V. Tuchin, L.A. Bityutskaya, E.N. Bormontov // *Eur. Phys. J. D*. - 2015. - Vol. 69. - P. 1.
13. Tuchin A.V. A finite-length capped single-walled carbon nanotube (5, 5) under an applied electric field / A.V. Tuchin, A.V. Nestrugina, L.A. Bityutskaya, E.N. Bormontov // *J. of Phys.: Conf. Ser.* - 2014. - Vol. 541. - P. 012008.
14. Управление спиновой поляризацией электронов электрическим полем в одностенных ультракоротких углеродных нанотрубках (0, 9) / Г.И. Глушков, А.В. Тучин, Л.А. Битюцкая, А.В. Лямичев, Е.Н. Бормонтов // *Нано- и микросистемная техника*. - 2016. - № 9. - С. 531-535.
15. Инверсия спиновой поляризации ультракоротких одностенных углеродных нанотрубок (0,9) в сильном электрическом поле / Г.И. Глушков, А.В. Тучин, Н.Н. Ефимов, Е.Н. Бормонтов // *Конденсированные среды и межфазные границы*. - 2017. - № 19. - С. 37-41.
16. Макарова Т.Л. Магнитные свойства углеродных структур / Т.Л. Макарова // *Физика и техника полупроводников*. - 2004. - Т. 3. - Вып. 6. - С. 641-664.
17. Magnetic carbon / T. L. Makarova, B. Sundqvist, P. Esquinaz, R. Hohne, Y. Kopelevich, P. Scharff, V. A. Davydov, L.S. Kashevarova, A.V. Rakhmanina // *Nature*. - 2001. - Vol. 413. - P. 718.
18. Han K.-H. Observation of intrinsic magnetic domains in C60 polymers / K.-H. Han, D. Spemann, R. Hohne et al. // *Carbon*. - 2003. - Vol. 41. - P. 785.
19. Murakami, Y. Magnetism of C60 induced by photo-assisted oxidation / Y. Murakami, H. Suematsu // *Pure Appl. Chem.* - 1996. - Vol. 68. - P. 1463.

THEORETICAL STUDY OF INTRINSIC SPIN POLARIZATION AND SIZE-DEPENDENT MAGNETISM OF ULTRA-SHORT CARBON NANOTUBES (0,9)

G.I. Glushkov¹, A.V. Tuchin², E.N. Bormontov³

¹Graduate student, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: gren5708@yandex.ru

²PhD, Associate Professor, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: 24in@mail.ru

³Full Doctor, Professor, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: me144@phys.vsu.ru

The main problems and significant parameters of new materials search and development for spin electronics - spintronics – are addressed in the article. The solution, which satisfies the conditions of reproducibility, intrinsic spin polarization existence, the dependence of conductivity on electron spin the ultra-short carbon nanotubes were reviewed. It is discovered that the so called “3k rule” is violated in a narrow interval of lengths, and the tube exhibits semiconductor properties, whereas the gap between the boundary orbitals depends on the spin of the carrier. The analysis of the electronic structure of the ground and excited states confirms the dependence of the conductivity on the spin of the carrier. The possibility of modulating the spin polarization by applying external electric fields and doping with metallic impurities is investigated. Within the small range of length the tubes act as a semiconductor and the energy gap between frontier orbitals depends on electron spin. The analysis of electron structure of the ground and excited states demonstrates such conductivity dependence as well as the possibility of electron structure modulation by means of strong electric fields and metal doping. The spin polarization increase twice as much and the increase of the difference between opposite spin electrons conductivity was shown in external fields. For the first time the spin polarization inversion effect was observed in carbon nanotubes: the inversion of spin of the main conductivity channel electrons. The relative binding energy calculation shows high structure stability in the whole range of lengths considered in the paper. The role of doping in a total effective magnetic momentum: the doping modulates the electron structure and increases the spin polarization degree but does not cause it, there is a great role the pure carbon structure to effective magnetic response. Thus, the ultra-short carbon nanotubes satisfy all the conditions to be used for functional spintronic devices

Key words: spin, spin polarization, spintronics, carbon nanotube

References

1. Bhaattacharya, S., Akande A., Sanvito S. “Spin transport properties of triarylamine-based nanowires”, *Chemical Communications*, 2014, vol. 50, p. 6626.
2. Awschalom, D. D., Flatté M. E. “Challenges for semiconductor spintronics”, *Nature Communications*, 2007, vol. 3, pp. 153-159.
3. Sanchez-Valencia, J. R. Dienel T., Gröning O., et al. “Controlled synthesis of single-chirality carbon nanotubes”, *Nat. Lett.*, 2014, vol. 512, p. 61.
4. Kato, T., Hatakeyama R. “Direct Growth of Short Single-Walled Carbon Nanotubes with Narrow-Chirality Distribution by Time-Programmed Plasma Chemical Vapor Deposition”, *ACS Nano*, 2010, vol. 4, pp. 7395-7400.
5. Buonocore, F. Trani F, Ninno D. et al “Initial calculations of electron affinity and ionization potential of carbon nanotubes”, *Nanotech*, 2000, vol. 19, p. 025711.
6. Dresselhaus, M. S. “Physics of carbon nanotubes”, *Carbon*, 1995, vol. 33, p. 883.
7. Lu D. Lu, Y. Li, Rotkin S., Ravaioli V., Schulten U. “Finite-Size Effect and Wall Polarization in a Carbon Nanotube Channel” *Nano Lett.*, 2008, vol. 4, p. 2383.
8. Titus, A. B. “Molecular dynamics simulations of ion transport through carbon nanotubes. I. Influence of geometry, ion specificity, and many-body interactions”, *The Journal of Chemical Physics*, 2010, vol. 132, pp. 164-513.
9. Brink C., Andersen L. H., Hvelplund P., Mathur D., Voldstad J. D. “Laser photodetachment of C60– and C70– ions cooled in a storage ring”, *Chem. Phys. Lett.*, 1995, vol. 233, p. 52.
10. Cioslowski, J., Rao N. Moncrieff D. “Electronic structures and energetics of [5,5] and [9,0] single-walled carbon nanotubes” *Am. Chem. Soc.* - 2002. -Vol. 124. - P. 8485.
11. Wu, J., Hagelberg F. “Adsorption of small hydrocarbon radicals on single walled carbon nanotubes of finite length”, *Physical Review*, 2010, vol. 81, pp. 155407.
12. Tuchin, A. V., Bityutskaya L.A., Bormontov E. N. “Vibrational spectrum and electronic structure of C60-fullerene in an external electric field”, *European Physics*, 2015, vol. 69, p. 1.
13. Tuchin, A. V., Bityutskaya L. A., Bormontov E. N., Nestrugina, A.V. “A finite-length capped single-walled carbon nanotube (5, 5) under an applied electric field”, *Journal of Physics: Conferential Series*, 2014, vol. 541, p. 012008.
14. Glushkov, G. I. Tuchin A. V Bityutskaya L. A., Lyamichiev A. V., Bormontov E. N. “Control of the spin polarization of electrons by an electric field in single-wall ultrashort nanotubes”, *Nano and microsystem technics, (Nano- i microsystemnaya tehnika)*, 2016, no. 9, pp. 531-535.
15. Glushkov, G. I. Tuchin A.V., Efimov N.N. Bormontov E.N. “Inversion of the spin polarization of ultrashort single-walled carbon nanotubes (0,9) in a strong electric field” *Condensed Environment and Interphase Boundaries (Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granitsy)*, 2017, no. 19, pp. 37-41.
16. Makarova, T. L. Magnetic properties of carbon structures. “Physics and Technology of Semiconductors”, *Physics and Technology of Semiconductors (Fizika i tehnika poluprovodnikov)*, 2004, vol. 3, no. 4, pp. 641-664.
17. Makarova T. L., Sundqvist B., Esquinaz P., Hohne R., Kopelevich Y., Scharff P., Davydov V. A., Kashevarova L. S., Rakhmanina A. V. “Magnetic carbon”, *Nature*, 2001, vol. 413, p. 718.
18. Han, K.-H. Spemann D., Hohne R. et al. “Observation of intrinsic magnetic domains in C60 polymers”, *Carbon*, 2003, vol. 41, p. 785.
19. Murakami, Y., Suematsu H. “Magnetism of C60 induced by photo-assisted oxidation”, *Pure Appl. Chem.*, 1996, p. 1463.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ Rb_2ZnCl_4 - SiO_2

Т.Н. Короткова, Л.С. Стеклёнева, Е. Рысякиевич - Пасек, Л.Н. Коротков

Путем внедрения сегнетоэлектрика с несоразмерной фазой Rb_2ZnCl_4 из насыщенного водного раствора в пористые стеклянные матрицы со средним диаметром сквозных пор около 320 и 160 и 23 нм приготовлены матричные наноконкомпозиты системы Rb_2ZnCl_4 – SiO_2 . Рентгенофазный анализ показал, что кристаллизовавшийся в порах материал имеет такую же кристаллическую структуру, что и объемный Rb_2ZnCl_4 . Проведено сравнительное исследование температурных зависимостей диэлектрической проницаемости (ϵ) приготовленных композитов и объемного монокристалла Rb_2ZnCl_4 в интервале температур 120 – 350 К. В окрестностях температур T_i и T_C , соответствующих структурным переходам из параэлектрической в несоразмерную и из несоразмерной в сегнетоэлектрическую фазу, на зависимостях $\epsilon(T)$ наблюдаются максимумы. Показано, что в широком интервале температур, лежащем выше T_C , зависимости $\epsilon(T)$ следуют закону Кюри – Вейсса. В случае композитов Rb_2ZnCl_4 – SiO_2 вблизи T_C кривые $\epsilon(T)$ более точно описываются «квадратичным законом Кюри – Вейсса». Обнаружено некоторое возрастание температуры T_i во внедренных частицах Rb_2ZnCl_4 по сравнению с объемным материалом. Наряду с этим переход из несоразмерной в сегнетоэлектрическую фазу в ультрадисперсном Rb_2ZnCl_4 становится размытым, а его температура значительно понижается

Ключевые слова: несоразмерная фаза, наноконкомпозит, пористое стекло, сегнетоэлектрический фазовый переход, диэлектрическая проницаемость

Введение

Установление закономерностей проявления размерного эффекта в системах ультрадисперсных частиц различной топологии и размерности является одной из актуальных задач современной физики конденсированного состояния. Удобным объектом для проведения экспериментальных исследований в этом направлении являются композиционные материалы, полученные путем внедрения сегнетоэлектриков в диэлектрические матрицы, обладающие разветвленной сетью сквозных пор наноразмерного диаметра [1]. Принято говорить, что внедренный в пористые структуры материал находится в «условиях ограниченной геометрии». Использование таких материалов позволяет применять обычное экспериментальное оборудование для изучения физических процессов в ультрадисперсных полярных диэлектриках.

К настоящему времени уже изучено влияние «ограниченной геометрии» на электрофизические свойства [2-6], структуру [7, 8] и фазовые переходы [2-6, 8] в частицах ряда модельных сегнетоэлектриков (TGS, KH_2PO_4 ,

NaNO_2 , NH_4HSO_4 и др.). Было показано [2, 3, 8], что наряду с размерным эффектом значительную роль играют электростатическое и механическое взаимодействия внедренного вещества с материалом матрицы. Вместе с тем физические свойства ультрадисперсных сегнетоэлектриков с несоразмерными фазами до сих пор практически не были исследованы. Исключение, пожалуй, составляет ультрадисперсный нитрит натрия, внедренный в пористые стеклянные матрицы с наноразмерным диаметром сквозных пор [7, 8].

Однако экспериментально выявить существование несоразмерной фазы во внедренных частицах NaNO_2 до сих пор не удалось. Возможно, это связано с тем, что температурный интервал, в пределах которого в нитрите натрия реализуется несоразмерная фаза, весьма узок и составляет около 1 К.

Подходящим объектом для изучения влияния «ограниченной геометрии» на фазовые переходы из параэлектрической в несоразмерную и из несоразмерной в соразмерную сегнетоэлектрическую является тетрахлорцинкат рубидия (Rb_2ZnCl_4). В объемном кристалле переход из параэлектрической в несоразмерную фазу реализуется при температуре $T_i \approx 303$, а из несоразмерной в сегнетоэлектрическую – при температуре $T_C \approx 194$ К [9]. Таким образом, область существования несоразмерной фазы в данном материале составляет около 109 К.

В связи с этим целью настоящей работы стало получение наноконпозиционных материалов системы Rb_2ZnCl_4 - SiO_2 путем внедрения тетрахлорцинка рубидия в пористые стеклянные

Короткова Татьяна Николаевна – ВИ МВД России, канд. физ.-мат. наук, доцент, e-mail: tn_korotkova@mail.ru
 Стеклёнева Любовь Сергеевна – ВГТУ, аспирант, e-mail: lubov_stekleneva@mail.ru
 Рысякиевич-Пасек Ева - Вроцлавский университет науки и технологии, канд. физ.-мат. наук, доцент, e-mail: Ewa.Rysakiewicz-Pasek@pwr.wroc.pl
 Коротков Леонид Николаевич – ВГТУ, д-р физ.-мат. наук, профессор, e-mail: l_korotkov@mail.ru

ные матрицы с различным средним диаметром сквозных пор и изучение их диэлектрических свойств в широком интервале температур.

Методика эксперимента и образцы

Для экспериментов использовали пористые стекла со средним диаметром сквозных пор 23, 160 и 320 нм, изготовленные во Вроцлавском технологическом университете (г. Вроцлав, Польша). На рис. 1 представлено изображение поверхности пористого стекла с размерами пор 320 нм, полученного с помощью сканирующего электронного микроскопа [10].

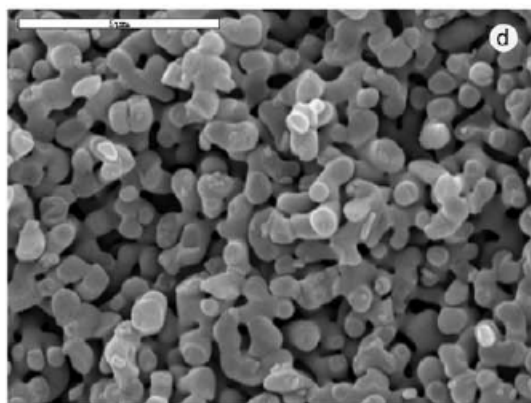


Рис. 1. Изображение поверхности пористого стекла с диаметром пор 320 нм полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа [10]

Композиционные материалы изготавливали путем внедрения в стеклянные матрицы соли тетрахлорцинка рубидия из водного раствора. Образцы нанокомпозитов $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4 - \text{SiO}_2$, используемые в работе, имели геометрические размеры $10 \times 10 \times 0,5 \text{ мм}^3$ и средний диаметр сквозных пор 23 нм (RS-23), 160 нм (RS-160) и 320 нм (RS-320).

Внедрение материала в предварительно отоженные стеклянные матрицы осуществляли из насыщенного водного раствора тетрахлорцинка рубидия при температуре около 100°C в течение 3,5 часов. Затем образцы вынимали из раствора и тщательно высушивали.

Для контроля наличия внедренного материала и его состояния был проведен рентгенодифракционный анализ образцов с использованием рентгеновского дифрактометра «D2 PHASER» (длина волны характеристического излучения $\lambda_{\text{Cu}} = 1,5418 \text{ \AA}$).

На рис. 2 приведены результаты рентгеновского исследования незаполненного пористого стекла со средним диаметром пор $\approx 160 \text{ нм}$ (кривая 1) и композита на его основе (кривая 2).

Угловая зависимость интенсивности $I(2\Theta)$, полученная для незаполненной матрицы, характеризуется наличием размытого гало, характерного для аморфных тел. На кривой интенсивности рассеяния, наблюдаемой для композиционного материала видны резкие Брегговские пики, соответствующие кристаллической структуре тетрахлорцинка рубидия. Таким образом, можно констатировать, что внедренный материал кристаллизовался в порах матрицы в виде кристаллитов со структурой такой же, как в объемном Rb_2ZnCl_4 .

Для проведения диэлектрических исследований на основные поверхности образцов нанесли серебряные электроды. Затем образцы помещали в криостат, где температура изменялась от 100 до 350 К и контролировалась с помощью платинового термометра сопротивления с погрешностью не превышающей 0,2 К. Измерения диэлектрической проницаемости осуществлялись с помощью измерителя иммитанса E7-12 на частоте 10 кГц в ходе охлаждения и нагрева образца со скоростью около 1К/мин.

Перед каждым измерением для удаления адсорбированной из воздуха воды осуществляли отжиг образцов при температуре около 400 К. О наличии остаточной влаги судили по изменению емкости образцов в ходе отжига.

Наряду с перечисленными композиционными материалами для сравнения были изучены диэлектрические свойства монокристаллического тетрахлорцинка рубидия.

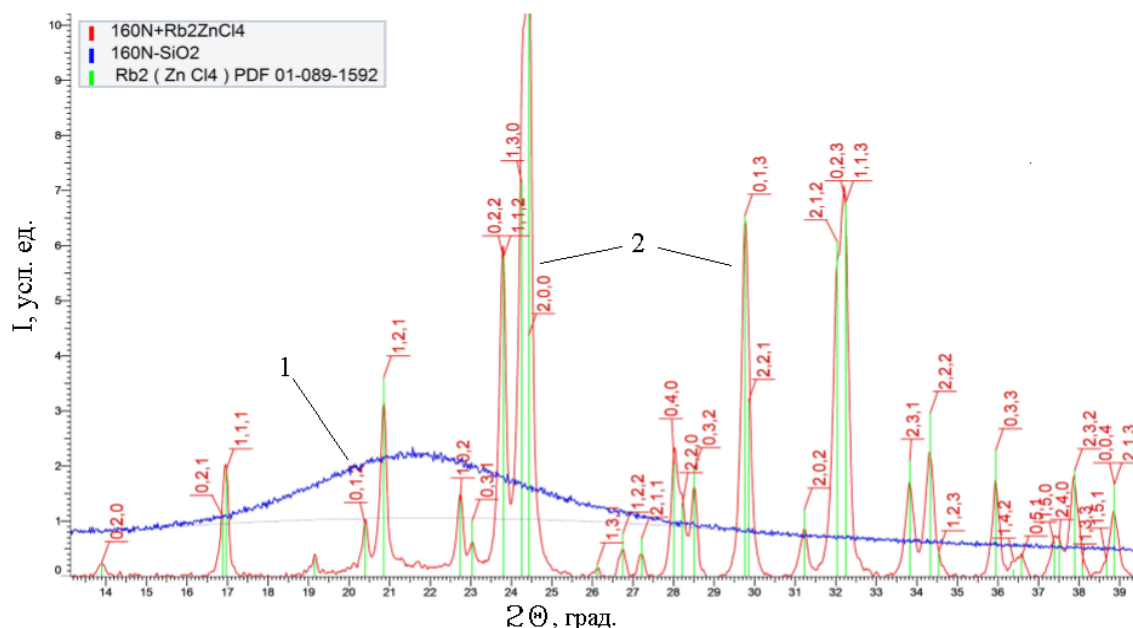


Рис. 2. Угловые зависимости интенсивности рассеянного рентгеновского излучения для незаполненного пористого стекла (1) и композита RS-160 (2)

Результаты и их обсуждение

На рис. 3 изображены температурные зависимости диэлектрической проницаемости для монокристалла Rb_2ZnCl_4 . На них можно выделить, по меньшей мере, две аномалии. Первая – в виде размытого максимума в окрестностях температуры $T_i \approx 303$ К, соответствует переходу из параэлектрической фазы в несоразмерную; вторая – представляет собой отчетливый пик при температуре $T_c \approx 192$ К, индицирующий сегнетоэлектрический фазовый переход.

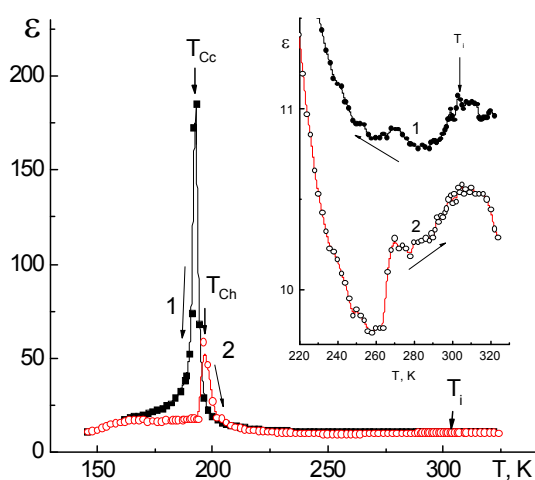


Рис. 3. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости монокристалла Rb_2ZnCl_4 , полученные в ходе охлаждения (1) и нагрева (2).

На вставке – те же зависимости, изображенные в более крупном масштабе в окрестностях температуры T_i

При этом позиции максимумов ϵ , наблюдаемых в окрестностях T_c в ходе охлаждения и нагрева образца, не совпадают. Пик ϵ на кривой охлаждения соответствует температуре $T_{cc} \approx 192$ К, а на кривой нагрева – температуре $T_{ch} \approx 196$ К. Таким образом, величина температурного гистерезиса ϵ составляет $\Delta T_c \approx 4$ К. Наличие гистерезиса говорит о том, что данный фазовый переход является переходом первого рода.

Позиции максимумов ϵ , регистрируемых в окрестностях температуры перехода в несоразмерную фазу, практически совпадают. Это обстоятельство свидетельствует в пользу того, что данный переход является фазовым переходом второго рода.

Температурные зависимости ϵ , полученные для композиционных материалов $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4 - \text{SiO}_2$ с разным диаметром пор, изображены на рис. 4. Видно, что диэлектрическая проницаемость композитов существенно меньше проницаемости кристаллического Rb_2ZnCl_4 . При этом с уменьшением диаметра пор матрицы композиционного материала имеет место некоторое общее снижение ϵ .

В окрестностях 155 К кривые $\epsilon(T)$ проходят через размытый максимум. Причем на кривой охлаждения он лежит ниже, чем на кривой, полученной в ходе нагрева образца. Это говорит о том, что данный максимум обусловлен фазовым переходом первого рода. Можно предположить, что это сегнетоэлектрический

фазовый переход, который в кристаллическом Rb_2ZnCl_4 реализуется около 192 К.

Вблизи 307 К можно увидеть еще один размытый максимум ϵ . Его положение на оси температур приблизительно соответствует температуре перехода в несоизмерную фазу T_i в монокристаллическом Rb_2ZnCl_4 .

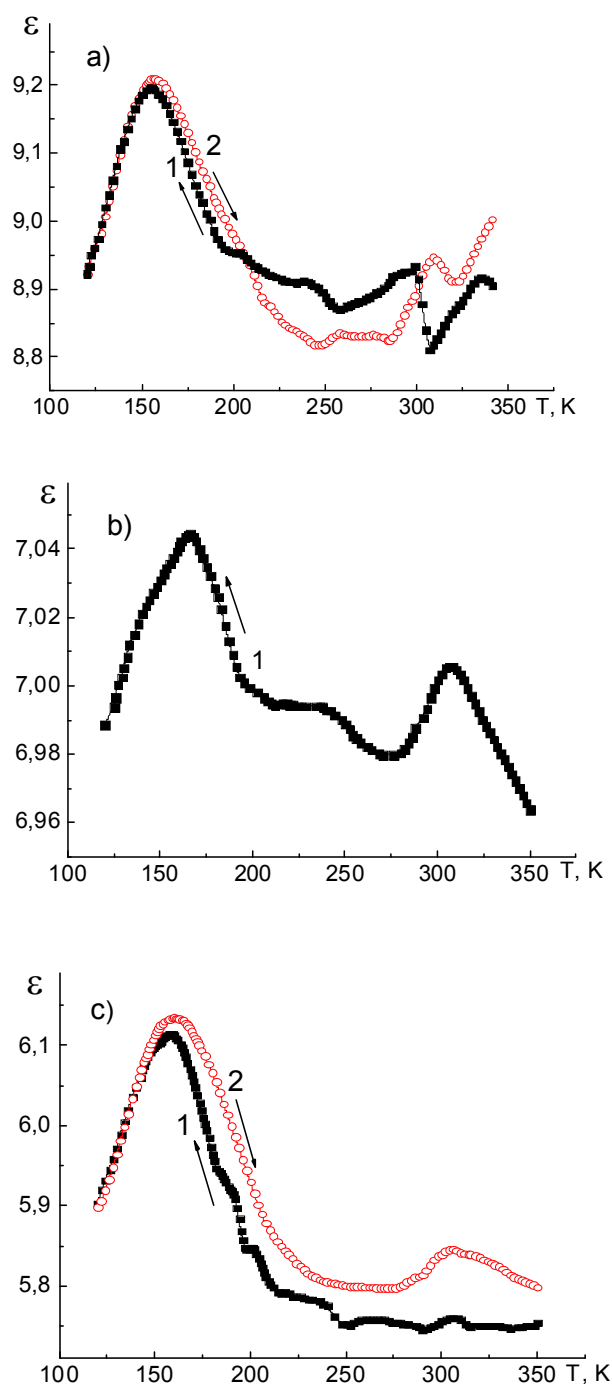


Рис. 4. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости для исследованных образцов композитов (RS-320 - а), (RS-160 - б) и (RS-23 - в), полученные в режиме охлаждения (1) и нагрева (2)

При циклическом изменении температуры в окрестностях перехода в несоизмерную фазу в случае композита RS-320 наблюдается гистерезис максимума ϵ , тогда как в случае образца RS-23 так же, как и в случае объемного Rb_2ZnCl_4 , такой гистерезис отсутствует. Причины, приводящие к различному поведению диэлектрического отклика вблизи T_i в данных композитах, пока не выяснены и в рамках данной статьи не обсуждаются.

Выше температуры сегнетоэлектрического фазового перехода температурные зависимости диэлектрической проницаемости подчиняются закону Кюри – Вейсса [11]

$$\epsilon(T) = \epsilon_f + C_{CW}/(T - \theta), \quad (1)$$

где ϵ_f – независимая от температуры составляющая диэлектрической проницаемости; C_{CW} – постоянная Кюри–Вейсса; θ – температура Кюри–Вейсса.

Действительно, зависимости $[\epsilon(T) - \epsilon_f]^{-1}$ представляют собой прямые линии (рис. 5, а). Найденные значения постоянной Кюри – Вейсса представлены ниже в таблице.

В непосредственной близости от T_C кривые $\epsilon(T)$ отклоняются от закона (1) и следуют так называемому «квадратичному закону Кюри – Вейсса», предложенному в работе [11] для описания диэлектрического отклика в сегнетоэлектриках с размытым фазовым переходом.

Согласно [11]

$$\epsilon^{-1}(T) = (\epsilon_m)^{-1} + (2\epsilon_m \cdot \sigma^2)^{-1/2}(T_m - T)^2. \quad (2)$$

Здесь ϵ_m – значение диэлектрической проницаемости в максимуме, наблюдаемом при температуре T_m , σ – параметр размытия перехода.

Возможность использования соотношения (2) для описания зависимостей $\epsilon(T)$ в окрестностях T_C проиллюстрирована на рис. 5, б. Найденные значения параметра размытия σ также представлены в таблице.

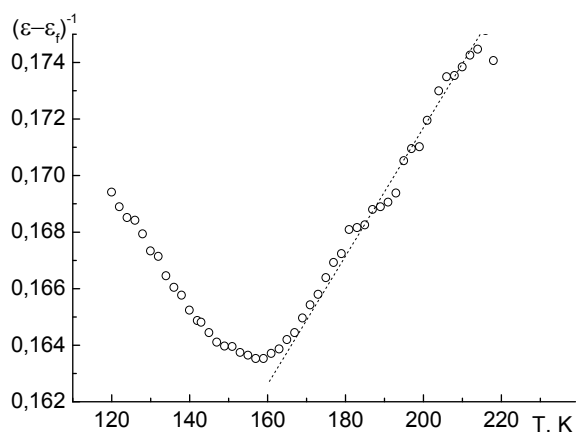


Рис. 5. Температурная зависимость $1/(\epsilon - \epsilon_f)$ для образца RS – 23, иллюстрирующая выполнение закона Кюри – Вейсса

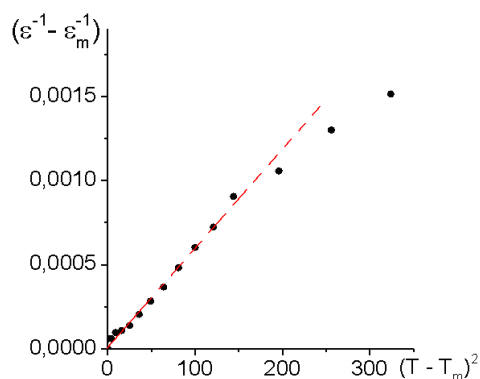


Рис. 6. Температурная зависимость $(\epsilon^{-1} - \epsilon_m^{-1})$ для образца RS – 23, иллюстрирующая выполнение «квадратичного закона Кюри – Вейсса» для образца RS – 23

Значения константы Кюри – Вейсса, параметра размытия и ширины термического гистерезиса

Образец	C_{sw} , К	σ , К	ΔT , К
Монокристалл	78	-	4
RS-320	5500	65	2
RS-160	29400	55	-
RS-23	14200	61	3

Заключение

Полученные экспериментальные результаты позволяют сделать следующие выводы.

1. Внедренный в пористые стеклянные матрицы из водного раствора тетрахлорцинкат рубидия кристаллизовался в порах в виде кристаллитов со структурой такой же, как в объемном Rb_2ZnCl_4 .

2. Установлено существенное понижение температуры и размытие сегнетоэлектрического фазового перехода в частицах Rb_2ZnCl_4 , внедренных в пористые стеклянные матрицы.

3. Температура перехода из параэлектрической в несоразмерную фазу T_i во внедренных частицах незначительно повышается по сравнению с объемным кристаллом тетрахлорцинка рубидия.

4. В широком интервале температур, лежащих выше T_c , температурные зависимости диэлектрической проницаемости следуют закону Кюри – Вейсса. Непосредственно в области размытого сегнетоэлектрического фазового перехода кривые $\epsilon(T)$ более точно описываются «квадратичным законом Кюри – Вейсса».

Литература

1. Андреева О.В. Нанопористые матрицы НПС-7 и НПС-17 – возможности использования в оптическом эксперименте / О.В. Андреева, И.Е. Обыкновенная // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2010. – Т. 1. – № 1. – С. 37 – 53.
2. Dielectric Properties of Ferroelectric Composites with TGS Inclusions / O.V. Rogazinskaya, S.D. Milovidova, A.S. Sidorkin, N.G. Popravko, M.A. Bosykh, V.S. Enshina // Ferroelectrics. - 2010. – Vol. 397. – P. 191–197.
3. Effect of restricted geometry on structural phase transitions in KH_2PO_4 and $NH_4H_2PO_4$ crystals / V. Tarnavich, L. Korotkov, O. Karaeva, A. Naberezhnov, E. Rysiakiewicz-Pasek // Optica applicata. – 2010. – Vol. 40. – P. 305–309.
4. Novel KDP-ADP Nanocomposites / A.Cizman, E. Rysiakiewicz-Pasek, J. Kutrowska, and R. Poprawski // Solid State Phenomena. - 2013. - Vol. 200. - P. 144 -148.
5. Calorimetric and dielectric studies of ferroelectric sodium nitrite confined in a nanoscale porous glass matrix / Z. Kutnjak, B. Vodopivec, R. Blinc, A. V. Fokin, Y. A. Kumzerov, S. B. Vakhruhev // J. Chem Phys. - 2005. - Vol. 123. - P. 084708.
6. Phase transition in NH_4HSO_4 -porous glasses nanocomposites / A. Cizman, T. Marcinišzyn, D. Enke, A. Barascu, R. Poprawski // J Nanopart Res. 2013. - Vol. 15. - P. 1756.
7. Temperature Evolution of Sodium Nitrite Structure in a Restricted Geometry / A.V. Fokin, Yu. A. Kumzerov, N.M. Okuneva, A. A. Naberezhnov, and S. B. Vakhruhev // Phys. Rev. Lett. - 2002. - Vol. 89. - P. 175503.
8. Температурные зависимости параметра порядка для нитрита натрия, внедренного в пористые стекла и опалы / А.И. Бескровный, С.Г. Василовский, С.Б. Вахрушев, Д.А. Курдюков, О.И. Зворыкина, А.А. Набережнов, Н.М. Окунева, М. Тovar, E. Rysiakiewicz-Pasek, P. Jagus. // ФТТ. - 2010. - Т. 52. - С. 1021 – 1025.
9. Багаутдинов Б.Ш. Эволюция структуры Rb_2ZnCl_4 в температурном диапазоне 4,2 – 310 К / Б.Ш. Багаутдинов, В.Ш. Шехтман // ФТТ. – 1999. - Т. 41. - С. 1084 -1090.
10. Properties of porous glasses with embedded ferroelectric materials / E. Rysiakiewicz-Pasek, R. Poprawski, J. Polanska, A. Urbanowicz, A. Sieradzki // Journal of Non-Crystalline Solids. - 2006. - V. 352. - P. 4309-4315.
11. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики / Г.А. Смоленский, В.А. Боков В.А. Исупов и др.; под ред. Г.А. Смоленского. – Л.: Наука, 1971. – 476 с.

DIELECTRIC PROPERTIES OF Rb_2ZnCl_4 - SiO_2 NANOCOMPOSITES

T.N. Korotkova¹, L.S. Stekleneva², E. Rysiakiewicz-Pasek³, L.N. Korotkov⁴

¹PhD, Associate Professor, Voronezh Institute of RF Ministry of Internal Affairs, Voronezh, Russian Federation
e-mail: tn_korotkova@mail.ru

²Graduate student, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: lubov_stekleneva@mail.ru

³PhD, Associate professor, Wrocław University of Science and Technology, Wrocław, Poland
e-mail: Ewa.Rysiakiewicz-Pasek@pwr.wroc.pl

⁴Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation,
e-mail: l_korotkov@mail.ru

The matrix nanocomposites of Rb_2ZnCl_4 - SiO_2 system were prepared by embedding of ferroelectric with incommensurate phase Rb_2ZnCl_4 into porous glasses with average diameter of through pores near 320, 160 and 23 nm from saturated aqueous solution. X-ray analysis revealed that the crystallized in porous material and bulk Rb_2ZnCl_4 possess identical crystalline structure. Comparative study of temperature dependences of dielectric permittivity for prepared composites and the bulk Rb_2ZnCl_4 single crystal were carried out within temperature range of 120 – 350 K. It were found the maxima of ϵ in the vicinity of temperatures T_i and T_C corresponding to structural transitions from paraelectric to incommensurate and from incommensurate to ferroelectric phases. Dependencies of $\epsilon(T)$ are obeyed to Curie - Weiss law within a wide temperature range above T_C . In immediate proximity to T_C the $\epsilon(T)$ curves for Rb_2ZnCl_4 - SiO_2 composites are described more precisely by so called “square Curie - Weiss law”. It was found the weak increase of T_i in embedded salt in comparison with the bulk Rb_2ZnCl_4 . Transition from incommensurate to ferroelectric phase in ultradisperse Rb_2ZnCl_4 is diffused and its temperature is decreased considerably

Key words: incommensurate phase, nanocomposite, porous glass, ferroelectric phase transition, dielectric permittivity

References

1. Andreeva O.V., Obyknovennaya I.E. “Nanoporous matrices NPS-7 and NPS-17 - the possibility of using in an optical experiment”, *Nanosystem: physics, chemistry, mathematics (Nanosistemy: fizika, khimiya, matematika)*, 2010. – vol. 1 pp. 37 – 53.
2. Rogazinskaya O. V., Milovidova S. D., Sidorkin A. S., Popravko N. G., Bosykh M. A., Enshina V. S. “Dielectric Properties of Ferroelectric Composites with TGS Inclusions”, *Ferroelectrics (Ferroelektriki)*, 2010, vol. 397, pp. 191–197.
3. Tamavich V., Korotkov L., Karaeva O., Naberezhnov A., Rysiakiewicz-Pasek E. “Effect of restricted geometry on structural phase transitions in KH_2PO_4 and $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ crystals”, *Optica applicata*, 2010, vol. 40, pp. 305–309.
4. Cizman A., Rysiakiewicz-Pasek E., Kutrowska J., Poprawski R. “Novel KDP-ADP Nanocomposites”, *Solid State Phenomena*, 2013, vol. 200, pp. 144 -148.
5. Z. Kutnjak, B. Vodopivec, R. Blinc, A. V. Fokin, Y. A. Kumzerov, S. B. Vakhrushev, Calorimetric and dielectric studies of ferroelectric sodium nitrite confined in a nanoscale porous glass matrix., *J. Chem Phys.* 2005, Vol. 123, P. 084708.
6. Cizman A., Marciszyn T., Enke D., Barascu A., Poprawski R. “Phase transition in NH_4HSO_4 -porous glasses nanocomposites”, *Nanopart Res.*, 2013, pp. 1756.
7. Fokin A.V., Kumzerov Yu. A., Okuneva N.M., Naberezhnov A. A., Vakhrushev S. B. “Temperature Evolution of Sodium Nitrite Structure in a Restricted Geometry”, *Phys. Rev. Lett.*, 2002, vol. 89, pp. 175503.
8. Beskrovny A.I., Vasilovsky S.G., Vakhrushev S.B., Kurdyukov D.A., Zvorykina O.I., Naberezhnov A.A., Okuneva N.M., Tovar M., Rysiakiewicz-Pasek E., Jagus P.. “Temperature dependences of the order parameter for sodium nitrite embedded in porous glasses and opals” (“Temperaturnyye zavisimosti parametra porjadka dlya nitrita natriya, vnedrennogo v poristyie stekla i opaly”) *FTT*, 2010, vol. 52, pp. 1021 - 1025.
9. Bagautdinov B. Sh., Shekhman V. Sh. “Evolution of the Rb_2ZnCl_4 structure in the temperature range 4.2 - 310 K”, *FTT*, 1999, vol. 41, pp. 1084 -1090.
10. Rysiakiewicz-Pasek E., Poprawski R., Polanska J., Urbanowicz A., Sieradzki A. “Properties of porous glasses with embedded ferroelectric materials”, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2006, vol. 352, pp. 4309-4315.
11. Smolenskii G.A., Bokov V.A., Isupov V.A., et al. “Ferroelectrics and antiferroelectrics” *Nauka*, Leningrad, 1971.

СОВРЕМЕННЫЕ НАКОПИТЕЛИ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

А.В. Звягинцева, А.О. Артемьева

В статье демонстрируется процесс разработки и исследования системы гидридного хранения водорода, отвечающего требованиям безопасного хранения при сравнительно малых эксплуатационных расходах. Впервые исследовалась способность электрохимических систем к поглощению водорода. Для экспериментального подтверждения предположения, что в электрохимических системах интерметаллиды металлов могут являться структурной ловушкой для атомов водорода, демонстративно выбрана система, которая согласно литературным данным традиционно не склонна к поглощению водорода и образованию металл-гидридной фазы - электрохимический композит Ni-In. Описываются пути исследования и методология синтеза структур электрохимических композитов $Ni_x-In_y-H_z$ на основе никеля с намеренно увеличенной степенью дефектности. Для электрохимических систем впервые в практике изучения сорбции и термодесорбции водорода для исследований в качестве тестового газа использовался дейтерий. Изготовлены образцы с различным содержанием индия. Экспериментальным путем был подобран оптимальный режим нанесения никелевых образцов: плотность катодного тока, температура электролита. Синтезирован электрохимический композит Ni-In с фазовым составом - $Ni_{70}In_{30}$, который обладает структурой, обеспечивающей удержание допированного дейтерия (водорода). Показывается, что содержание водорода в экспериментальных образцах композита $Ni_x-In_y-H_z$, определенное методом термодесорбции, составляет до 8 мас. %, что подтверждает: гальванически полученный композит обладает способностью к накоплению водорода и дальнейшему сохранению его в форме металлических гидридов

Ключевые слова: никель, индий, интерметаллиды индия, ионная имплантация, аккумулялирование водорода

Введение

Одной из важнейших проблем использования водорода в энергетике и в системах питания является его безопасное хранение и использование при сравнительно малых эксплуатационных расходах. Исследуемая в работе система гидридного хранения успешно разрешает эту актуальную проблему. Химическое соединение водорода в форме металлических гидридов обладает целым рядом преимуществ по сравнению с традиционными способами, такими, как криогенный и балонный, которые небезопасны и энергоемки.

Научная новизна нашего проекта заключается в том, что нами впервые исследовалась способность электрохимических систем к поглощению водорода.

Сплавы металлов с индием представляли большой интерес для различных областей современной промышленности, особенно в 80-90 годы. Легирование никеля индием увеличивает его пластичность, износостойкость, прочность на разрыв, облегчает обрабатываемость, повышает антикоррозионную стойкость, придает способность к пайке и к свариваемости с токопроводящими элементами и применялось в радиоэлектронной отрасли взамен драгоценных

металлов [1, 2]. В зависимости от содержания индия в осадке, предназначение сплавов Ni-In различно. Сплавы с содержанием индия выше 10 % применяются, как антифрикционные и коррозионностойкие в машиностроении, а с содержанием индия менее 3 %, как функциональные в радиоэлектронной промышленности [1, 2]. Функциональные свойства электрохимических композитов никель - индий были изучены недостаточно. Обзор литературных данных за последние 10-15 лет показывает, что данное направление исследований, по нашему мнению, явно обойдено вниманием. Для экспериментального подтверждения нашего предположения, что в электрохимических системах интерметаллиды металлов могут являться структурной ловушкой для атомов водорода, была выбрана система, которая, согласно литературным данным, традиционно не склонна к поглощению водорода и образованию металл-гидридной фазы - электрохимический композит Ni-In. Согласно нашим исследованиям, индий в виде твердого раствора (максимально 9 мас. %) не является примесной ловушкой для атомов водорода. Это обусловлено соотношением радиусов ($r_{Ni} = 0,138$ нм; $r_{In} = 0,184$ нм). В связи с тем, что у атома In радиус больше, чем у атома Ni, то при получении композита Ni-In в окрестности

Звягинцева Алла Витальевна - ВГТУ, канд. техн. наук, доцент, тел. 89507501062, e-mail: zvygincevaav@mail.ru
Артемьева Анастасия Олеговна - ВГТУ, магистр, тел. 8-900-305-24-08, e-mail: nastya.art.94@mail.ru

индия возникают сжимающие напряжения и как следствие индий вытесняет водород из окрестности своего расположения. Поэтому, электрохимические композиты Ni-In с содержанием индия менее 9 мас. % не склонны к накоплению водорода.

Однако при увеличении концентрации индия более 10 % вес. происходит образование новых фаз в виде интерметаллидов. Известно, если новая фаза некогерентно связана с Ni матрицей через сетку дислокаций, то такую систему можно рассматривать, как структурную ловушку для атомов водорода и аккумулирующие свойства никель-индиевых композитов улучшаются.

Методика эксперимента

Никель – индиевые композиты получены электролитическим осаждением на подложки из меди (толщиной 0,05 мм), с составом электролита: $\text{NiSO}_4 \times 7\text{H}_2\text{O} = 140$ г/л; $\text{Na}_2\text{SO}_4 \times 10\text{H}_2\text{O} = 20$ г/л; и $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ концентрация которого изменялась от 1 до 12 г/л, остальные компоненты электролита не подлежат разглашению. Вариация количеством $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ обеспечивало получение композитов Ni-In с различным соотношением компонент. Электролиз проводился платиновым анодом и медным катодом. Режимы электролиза: плотность катодного тока $i_k = 0,5; 1; 2; 3$ А/дм²; время электролиза $\tau_{\text{эл-за}} = 10; 30; 60$ мин.; температура электролита – комнатная, не выше 25 °С. Катод вырезался из медной фольги в виде прямоугольника 2,5×2 см, общей площадью $S_{\text{Cu}} = 0,1$ дм² с учетом двух сторон. Перед электролизом катод обезжиривался в среде $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ и травился в HCl (1:1). Электролиз проводился с платиновым анодом. В ячейку заливали электролит с контролируемым содержанием $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ и проводили электролиз при комнатной температуре. Режим электролиза: плотность катодного тока $i_k = 0,5; 1; 2; 3$ А/дм²; время электролиза $\tau_{\text{эл-за}} = 60$ мин; содержание $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ в электролите составляло: 0; 0,5; 1; 2; 4; 8; 12 г/л; тип подложки – медная [1-3].

Экспериментальным путем был подобран режим электроосаждения никель-индиевых образцов: плотность катодного тока - 2 А/дм², температура электролита - комнатная. Для определения влияния каждого из параметров электроосаждения на свойства композитов никель-индий варьировался только один параметр: либо плотность катодного тока, либо концентрация индия в электролите. При увеличении концентрации $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ в электролите от 1 до 12 г/л содержание In в системе возрастает

до 61,3 мас. %, а Ni, соответственно, становится 38,7 мас. %. Содержание компонентов в композите Ni-In определялось рентгено-флуоресцентным методом.

Рентгеноструктурные исследования образцов проводили на дифрактометре HZG-4 в $\text{CuK}\alpha$ -излучении (β -фильтр).

Изготовлены образцы четырех концентраций: №1 - 24 мас. % In (при концентрации $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ 1 г/л); №2 - 38 мас. % In (2 г/л $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$); №3 – 45,6 мас. % In (4 г/л $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$); №4 – 61,3 мас. % In (12 г/л $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$). На фазовой диаграмме [4], приведенной на рис. 1 стрелками отмечены образцы, которые были изготовлены и исследованы.

Результаты работы и их обсуждение

В работе исследован фазовый состав и структура электрохимических композитов Ni-In в зависимости от содержания $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ в электролите. На основании проведенных исследований подобран состав электролита с содержанием сульфата индия $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ в электролите, который позволяет получать мелкокристаллические и равноструктурные Ni-In композиты. При использовании концентрации $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ в электролите 4 г/л получены образцы состава - $\text{Ni}_{70}\text{In}_{30}$. Результаты рентгеноструктурного анализа представлены в таблице.

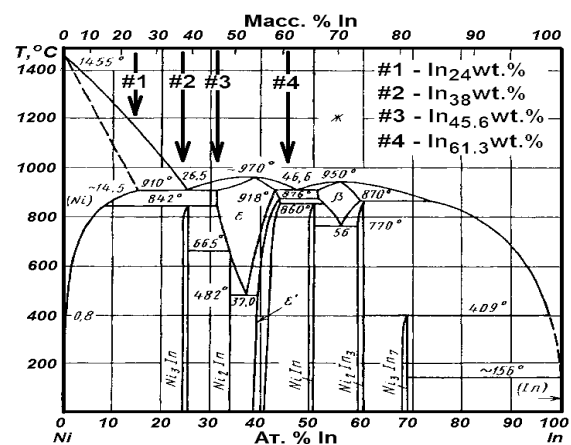


Рис. 1. Диаграмма фазового состояния системы Ni-In [3] и образцы, которые были приготовлены и исследованы: № 1 - 24 мас. % In; № 2 - 38 мас. % In; № 3 – 45,6 мас. % In; № 4 – 61,3 мас. % In

При содержании в электролите $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ в количестве менее 2 г/л на катоде осаждается никель, присутствие чистого

индия и его соединений с никелем не обнаружено. С увеличением содержания сульфата индия (III) в растворе от 2 г/л и выше на катоде осаждается чистый никель и интерметаллиды: InNi_2 , InNi_3 , In_3Ni_2 , $\eta\text{-In}_{27}\text{Ni}_{10}$. о возможности образования, которых свидетельствует фазовая диаграмма системы Ni-In [4].

При увеличении концентрации индия в композитах более 30 мас. % In на дифрактограммах присутствуют линии, соответствующие интерметаллидам InNi_3 и In_2Ni .

При расшифровке рентгенограмм обнаружена фаза, соответствующая интерметаллиду $\eta\text{-In}_{27}\text{Ni}_{10}$. В диаграммах равновесного состояния, согласно [4], фаза $\eta\text{-In}_{27}\text{Ni}_{10}$ отсутствует. Ее отсутствие, по-видимому, связано с тем, что данная фаза является метастабильной. На основании данных американской международной организации, разрабатывающей и издающей добровольные стандарты для материалов, продуктов, систем и услуг ASTM International (American Society for Testing and Materials), в композите Ni-In интерметаллидная фаза $\eta\text{-In}_{27}\text{Ni}_{10}$

с тетрагональной решеткой может присутствовать.

Методом термодесорбционной масс-спектрометрии (ТДС) исследовалась кинетика развития спектра десорбции дейтерия из образцов системы Ni-In в зависимости от соотношения компонент. С целью уменьшения влияния фонового водорода, имеющегося в образцах и в камере мишеней, в экспериментах использовался изотоп водорода - дейтерий. Внедрение дейтерия и измерения спектров термодесорбции были выполнены на экспериментальной установке «СКИФ», детально описанной в работе [5, 6]. Образцы размером $10 \times 5 \text{ мм}^2$ крепились на фольги-нагреватели из тантала размером $5 \times 45 \times 0,1 \text{ мм}^3$. Измерение температуры осуществлялось вольфрам-рениевой термопарой BP5/20, прикрепленной к нагревателю. Образцы подвергались имплантации ионами дейтерия энергией 12 кэВ дозами в пределах $3 \times 10^{17} - 3 \times 10^{18} \text{ D/см}^2$.

Зависимость фазового состава электрохимических композитов никель – индий от содержания индия

Но- мер образ- ца	Содержание $\text{In}_2(\text{SO}_4)_3$ в электролите, г/л	Содержание индия в композите Ni- In, масс. %	Ni	InNi_2	InNi_3	In_3Ni_2	$\text{In}_{27}\text{Ni}_{10}$	In	InNi
1	2	24	+	+	+	+	+	-	-
2	4	38	+	+	+	+	+	+	-
3	8	45,6	+	+	+	+	+	+	+
4	12	61,3	-	+	+	+	+	+	+

Термодесорбционная спектроскопия - один из важнейших методов изучения взаимодействия газов с металлами, позволяет измерять температурные диапазоны десорбции газов, термодинамические параметры системы металл-газ в зависимости от концентрации внедренного газа.

Эксперименты по изучению термоактивированного газовойделения проводятся в измерительной камере № 1 установки «СКИФ». После достижения необходимой дозы внедрения газовых ионов в металлическую мишень пучок выключается, после чего образец нагреется по примерно линейному закону с помощью омического нагрева в диапазоне температур 80 ... 1800 К, а в отдельных случаях (для контроля) - до плавления образца. Температура мишеней, как отмечалось выше, измеряется с помощью термопары.

Никель–индий композиты в процессе изготовления электролитическим осаждением насыщаются водородом. Фактически, одновременно происходит два процесса: формирование никель–индий композита на медной подложке и его насыщение водородом. Проведены исследования по определению количества водорода, накопившегося в композитах в процессе их изготовления. С этой целью образцы помещали в камеру установки СКИФ и методом ТДС получены спектры десорбции водорода (рис. 2). Затем, после охлаждения образца, проведена имплантация водорода дозой $1 \times 10^{17} \text{ H/см}^2$ и с регистрацией спектра, как тестирующего для оценки количества водорода, накопившегося в композитах в процессе их

изготовления. Суммарное количество водорода, выделившегося при нагревании из образца, определялась по площади фигуры, лежащей под кривой газовой выделения, по методике, описанной в работах [5, 6].

Проведены оценочные расчеты количества десорбированного водорода из композитов №2 состава 38 мас. % In и №3 состава 45,6 мас. % In.

Из этого расчета следует, что в композите №3 после его изготовления находилось $1,14 \times 10^{18}$ атомов водорода, что соответствует формуле ат.Мет/ат.Н=2, а в композите №2 концентрация атомов водорода соответствует формуле ат.Мет/ат.Н=4.

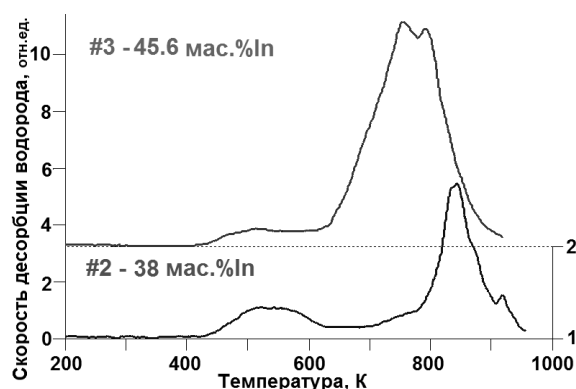


Рис. 2. Спектры термодесорбции водорода, выделившегося из композитов системы Ni-In: № 2 - состава 38 мас. % In и (2); № 3 - состава 45,6 мас. % In

На рис. 2 наблюдаются два водородных пика при температуре 550 К и 850 К (кр. 1). Вполне возможно, что десорбция водорода при температурах выше 650 К может быть обусловлена как десорбцией водорода и водородсодержащих газов из конструкций камеры измерений в процессе нагрева образцов, так и отжигом ловушек, удерживающих водород при температурах выше 650 К.

Далее в электрохимический композит методом ионной имплантации вводили изотоп водорода – дейтерий. Внедрение дейтерия в образцы производилось имплантацией ионов дейтерия энергии 12 кэВ дозами в пределах 3×10^{17} – 3×10^{18} ат.Д/см². Впервые возможность дополнительного введения водорода в электрохимическую систему рассмотрена в [5-8] и продолжена в этом проекте. На рис. 3 представлен спектр термодесорбции дейтерия, имплантированного в образцы композита Ni₇₀In₃₀ в зависимости от дозы имплантированного дейтерия и для одного фазового состава образца. Как видно на рис. 3, структура спектра ТДС дейтерия является функцией имплантационной дозы. При низких дозах имплантированного дейтерия в спектре присутствует один пик с температурой максимума ~530 К. Повышение

дозы приводит к появлению нового низкотемпературного пика с температурой максимума ~420 К. При дальнейшем увеличении дозы температура максимума этого пика газовой выделения постепенно смещается в область более низких температур.

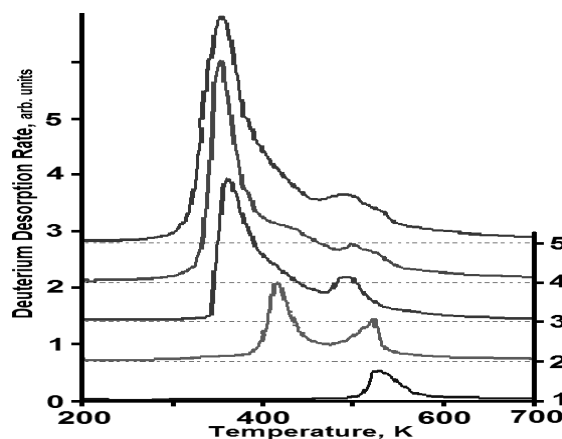


Рис. 3. Спектры термодесорбции дейтерия, имплантированного в образцы композита

Ni₇₀In₃₀:
1 - 3×10^{17} Д/см²; 2 - 7.5×10^{17} Д/см²; 3 - 1.3×10^{18} Д/см²; 4 - 2×10^{18} Д/см²; 5 - 3×10^{18} Д/см²

Рост концентрации дейтерия приводит к образованию как твердого раствора дейтерия в композите Ni₇₀In₃₀, температура распада которого в вакууме ~530 К, так и гидрида, температура распада которого ~350 К. При насыщении композита состава 45,6 мас. % In дейтерием с помощью ионной имплантации предельно достижимая концентрация дейтерия 2 ат.Д/ат.Мет. Увеличение концентрации индия приводит к росту количества удерживаемого дейтерия в композите.

Заключение

Таким образом, по нашим данным, аккумулирующие свойства никеля при наличии в нем интерметаллидов индия увеличиваются, так как в окрестности интерметаллида индия могут возникать напряжения растяжения и водород сегрегируется на границе этих соединений, что подтверждается данными термодесорбционного анализа. Результаты исследований проекта показывают принципиальную возможность синтеза материалов электрохимическим методом для дальнейшей разработки аккумуляторов для хранения водорода в металлгидридном состоянии без криостатных систем и последующего извлечения водорода при

относительно невысоких температурах экстракции по сравнению с применяемыми металлургическими системами [7, 9].

В ходе работы над проектом были достигнуты следующие основные результаты:

1. Подтверждено, что, благодаря формированию структуры сплавов определенной степени дефектности (за счет структурных и примесных ловушек или интерметаллидов индия), изменяется способность металлов к накоплению водорода.

2. Подтвержден факт, что формирование водородных ловушек, изменяющих структуру электрохимических композитов, приводит к изменению способности к поглощению водорода металлами, что является одним из способов управления водородной проницаемостью металлов, приводящему к созданию материалов – накопителей водорода.

3. Продемонстрирована лабораторная методика синтеза электрохимических композитов никель-индий для аккумуляирования водорода, определен их химический состав и подобраны режимы их синтеза.

4. Получены образцы площадью 24 см², толщиной слоя электрохимического композита не менее 8-10 мкм (10⁻⁶ м). Допированные композиты никель-индий-водород обеспечили содержание в них водорода до 8 % мас.

Разработанные образцы нашли применение в изобретении № 2608193 «Устройство для изменения траектории астероида, ядра кометы и других космических объектов». Заявка № 2015128741. Дата подачи заявка 14.07.2015. Решение о выдаче патента от 02.11.2016. Патент отличается от аналогов применением в качестве ударного тела - термоизолированного контейнера с гидридом металла, полученного электрохимическим способом, или на основе никелевой матрицы, имеющей различные варианты насыщения их водородом [10].

Работа выполнена по Договору (Соглашению) № 9856ГУ/2015 от 24.02.2016 ВГТУ.

Литература

1. Звягинцева А.В. Электроосаждение покрытий никель – индий из сульфатно-хлоридного электролита / А.В. Звягинцева, А.И. Фаличева // Гальванотехника и обработка

поверхности. – 1994. – Т. 3. – № 5. – 6. – С. 47 - 51.

2. Звягинцева А.В. Физико-механические и коррозионно-электрохимические свойства никелевых покрытий, легированных индием / А.В. Звягинцева, А.И. Фаличева // Гальванотехника и обработка поверхности. – 1994. – Т. 3. – № 5 - 6. – С. 52 - 54.

3. Звягинцева А.В. Структурно-фазовые изменения в электрохимических системах Ni-In / А.В. Звягинцева // Ученые записки Таврического национального университета им. В. И. Вернадского. Серия «Биология, химия». - 2013. – Т. 26 (65). – № 3. – С. 253-260.

4. Диаграммы состояния двойных металлических систем: справочник, ред. Н.П. Лякишев. – М.: Машиностроение, 2001. – Т. 3. – Кн. 1. – 872 с.

5. Effects of Deuterium Concentration on Deuterium Desorption Temperature Range from Ni - In Composites (Влияние концентрации дейтерия на диапазон десорбции дейтерия из Ni-In-композитов) / A.V. Zvyginceva, O.M. Morozov, V.I. Zhurba, V.O. Prokolaieva // Scientific Journal. Proceedings of the international conference. Nanomaterials: applications and properties. – Vol. 2. – No 1.

6. Звягинцева А.В. Температурные интервалы десорбции дейтерия из Ni-In композитов / А.В. Звягинцева, А.Н. Морозов, И.М. Кирьян // Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. INISM'14: сб. докл. Пятой Междунар. конф. и Девятой Междунар. школы молодых ученых и специалистов им. А.А. Курдюмова. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2015. – С. 106-119.

7. Звягинцева А.В. Способность материалов на основе никеля наноразмерного диапазона к аккумуляированию водорода / А.В. Звягинцева // Альтернативная энергетика и экология. - Саров: НТЦ «ТАТА». - 2015. - № 21 (185). - С. 150-155.

8. Артемьева А.О. Разработка гибридных функциональных материалов на основе никеля / А.О. Артемьева, А.В. Звягинцева // Сборник трудов победителей конкурса научно-исследовательских работ студентов и аспирантов ВГТУ по приоритетным направлениям [Электронный ресурс] – Воронеж: ВГТУ, 2016. – С. 113-111.

9. Звягинцева А.В. Определение водородной емкости структурных дефектов / А.В. Звягинцева // Альтернативная энергетика и экология. - Саров: НТЦ «ТАТА». - 2015. - № 21 (185). - С. 145-149.

10. Пат. № 2608193 Российская Федерация. Устройство для изменения траектории астероида, ядра кометы и других космических объектов / А.О. Артемьева, А.В. Звягинцева Заявка № 2015128741. Дата подачи заявка 14.07.2015. Решение о выдаче патента от 02.11.2016.

Воронежский государственный технический университет

MODERN HYDROGEN STORAGE BASED ON HYBRID FUNCTIONAL MATERIALS

A.V. Zvyagintseva¹, A.O. Artemieva²

¹PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: zvygincevaav@mail.ru

The article introduces the process of developing and researching a hydrogen hydride storage system that meets the requirements of safe storage at relatively low operating costs. The ability of electrochemical systems to absorb hydrogen is studied for the first time. To experimentally confirm the assumption that in electrochemical systems 'intermetallics' can be a structural trap for hydrogen atoms, a system which according to the literature is traditionally not inclined to absorb hydrogen and form the metal-hydride phase-the electrochemical composite of Ni-In, is on-purposely chosen here to demonstrate the above processes. The research ways and methodology for the synthesis of structures of electrochemical composites $Ni_x-In_y-H_z$ based on nickel with an intentionally increased degree of defectiveness are introduced in the article. For electrochemical systems, deuterium was used as the test gas for the first time of studying hydrogen sorption and thermal desorption. Samples with different indium contents were made. The optimum mode of applying nickel samples was determined experimentally - via the density of the cathode current and the temperature of the electrolyte. The electrochemical composite Ni-In with a phase composition - $Ni_{70}In_{30}$, which has a structure providing the retention of the doped deuterium (hydrogen) is synthesized. It is shown that the hydrogen content in the experimental samples of the $Ni_x-In_y-H_z$ composite, determined by thermal desorption, is up to 8 wt. %, which further confirms our statement that the galvanically obtained composite has the ability to accumulate hydrogen and further preserve it in the form of metallic hydrides

Key words: nickel, indium, indium intermetallics, ion implantation, hydrogen storage

References

1. Zvyaginceva A.V., Falicheva A.I. "Electrodeposition of nickel-indium coatings from sulfate-chloride electrolyte" ("Elektroosazhdenie pokrytij nikel' – indij iz sul'fatno-hloridnogo ehlektrolita"), Moscow, 1994, vol. 3 – no. 5 – 6, pp. 47 - 51.
2. Zvyaginceva A.V., Falicheva A.I. "Physico-mechanical and corrosion-electromechanical properties of nickel alloys doped with indium" ("Fiziko-mekhanicheskie i korrozionno-ehlektromekhanicheskie svoystva nikel'nykh pokrytij, legirovannykh indijem"), Moscow, 1994, vol. 3, no. 5- 6, pp. 52 - 54.
3. Zvyaginceva A.V., "Structural-phase changes in electrochemical systems Ni-In", *Scientific notes of Vernadsky Tavrida National University of - "Biology, Chemistry" Series (Uchenyye zapiski Tavricheskogo natsional'nogo universiteta im. V. I. Vernadskogo. Seriya «Biologiya, khimiya»)*, 2013, vol. 26 (65), no. 3, pp. 253-260.
4. Lyakishev N.P. "Diagrams of the state of double metal systems" ("Diagrammy sostoyaniya dvoynykh metallicheskih system"): Moscow, *Machinery (Mashinostroenie)*, 2001, p. 872.
5. Zvyaginceva A.V., Morozov O.M., Zhurba V.I., Progolaieva V.O. "Effects of Deuterium Concentration on Deuterium Desorption Temperature Range from Ni - In Composites", *Proceedings of the international conference. Nanomaterials: applications and properties (Materialy mezhdunarodnoy konferentsii. Nanomaterialy: prilozheniya i svoystva)*, vol. 2, no. 1.
6. Zvyaginceva A.V., Morozov, I.M. Kir'yan "Temperature intervals for desorption of deuterium from Ni-In composites" ("Temperaturnye intervaly desorbtsii deiteriya iz Ni-In kompozitov"), *IHISM'14*, 2015, pp. 106-119.
7. Zvyaginceva A.V. "The ability of nano-dimensional nickel-based materials to accumulate hydrogen", *Alternative Ecology International Journal (Mezhdunarodnyy zhurnal al'ternativnoy ekologii)*, NTC «TATA», Sarov2015, no. 21 (185). pp. 150-155.
8. Artem'eva A.O. Zvyaginceva A.V. "Development of hybrid functional materials based on nickel", *Electronic resource (25 Mb)*, Voronezh, Voronezh State Technical University, 2016, pp. 113-11.
9. Zvyaginceva A.V. "Determining of the hydrogen capacity of structural defects", *Ecology International Journal (Mezhdunarodnyy zhurnal al'ternativnoy ekologii)*, NTC «TATA», Sarov, 2015, no. 185, pp. 145-149.
10. Artem'eva A.O., Zvyaginceva A.V. Patented Study no. 2608193, Application no. № 2015128741 "Device for changing the trajectory of an asteroid, comet nucleus and other space objects" ("Patent № 2608193, Zayavka no. 2015128741 - "Ustrojstvo dlya izmeneniya traektorii asteroida, yadra komety i drugih kosmicheskikh ob"ektov").

БАРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 2D СЛОИСТЫХ СТРУКТУР С РАЗНЫМ ТИПОМ МЕЖСЛОЙНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

А.В. Тучин, Ю.В. Каспер, Т.В. Куликова, Л.А. Битюцкая, Е.Н. Бормонтов

Сочетание высокой подвижности электронов и дырок, теплопроводности и термодинамической стабильности обусловило высокую исследовательскую активность в изучении графена и поиска новых графеноподобных слоистых материалов, таких как 2D карбид кремния. Актуальной задачей является определение способов управления свойствами 2D слоистых материалов внешними воздействиями, такими как электромагнитные поля и давление. Целью работы является теоретическое исследование особенностей перестройки электронной структуры многослойных структур графена и карбида кремния с числом слоев от 1 до 3, подверженных одноосному сжатию. После оптимизации геометрии структур рассчитывались параметры внутрислойных и межслойных связей, эффективный заряд, ширина запрещенной зоны. Выявлена стабилизация структур при их послойном росте. Установлена линейная барическая зависимость эффективного заряда двух- и трехслойного мультиграфена. Обнаружено пороговое изменение электропроводности для двух- и трехслойного графена при критических давлениях 20 и 30 ГПа, что определяется формированием межслойных каналов проводимости. Установлена прямо пропорциональная зависимость ширины запрещенной зоны SiC от давления. Термодинамическая стабильность многослойных структур графена и карбида кремния, чувствительность их электронной структуры к внешнему давлению открывают возможность управления их электрофизическими свойствами внешними механическими воздействиями

Ключевые слова: слоистые материалы, мультиграфен, карбид кремния, электронная структура, давление

Введение

Сочетание высокой подвижности электронов и дырок, теплопроводности и термодинамической стабильности обусловило высокую исследовательскую активность в изучении графена и поиска новых графеноподобных слоистых материалов [1–6]. В многослойных графеновых структурах (мультиграфене) межслойное взаимодействие Ван-дер-Ваальсово, однако к графеноподобным материалам относятся и слоистые структуры с сильными межслойными химическими связями. В настоящее время выделен целый класс графеноподобных элементарных 2D материалов, сформированных элементами III – V групп [5–7]. Продолжением работ по графено-подобным формам элементов IV группы (Si, Ge, Sn) стали исследования бинарных соединений, в частности, SiC [8]. Многослойные структуры на основе SiC рассматриваются как одни из наиболее перспективных материалов нанoeлектроники, т. к. в отличие от графена, они обладают не нулевой шириной запрещенной зоны, достигающей 3.72 эВ и под-

ходят для создания гетероструктур на их основе [9–13]. Привлекательность семейства 2D слоистых материалов обусловлена вариативностью электронной структуры и возможностью ее достаточно легкой модификации внешними полями, конструкцией и числом слоев, наведенными деформациями [14–17].

Методами электронной микроскопии установлено, что в процессе синтеза графеноподобных материалов зачастую образуются многослойные структуры, число аллотропных модификаций которых тем больше, чем больше число слоев. Данные графеноподобные аллотропные модификации перспективны для применения в нанoeлектронике, сенсорике, оптоэлектронике, энергетике, при разработке нанoeлектромеханических устройств [5, 6, 18]. Например, группой ученых под руководством Yoo [18] разработаны литиевые перезаряжаемые батареи, с мультиграфеновыми электродами. Емкость батареи составила 540 мА·ч/г, что превышает теоретически возможный предел для графита 372 мА·ч/г. Авторы связывают данный эффект с изменениями в электронной структуре при переходе от графита к мультиграфену и увеличением числ энергетически выгодных положений ионов лития Li^+ .

Перспективным и слабоизученным направлением является исследование графеноподобных материалов подверженных внешним механическим воздействиям, например сжатию. Целью работы является исследование особенностей перестройки электронной структуры многослойных структур графена и карбида

Тучин Андрей Витальевич – ВГУ, канд. физ.-мат. наук, доцент, e-mail: a.tuchin@bk.ru

Каспер Юлия Викторовна – ВГУ, магистр, e-mail: julilikasper@yandex.ru

Куликова Татьяна Валентиновна – ВГУ, аспирант, e-mail: kaimt@mail.ru

Битюцкая Лариса Александровна – ВГУ, канд. хим. наук, доцент, e-mail: me144@phys.vsu.ru

Бормонтов Евгений Николаевич – ВГУ, д-р физ.-мат. наук, профессор, e-mail: me144@phys.vsu.ru

кремния при одноосном сжатии давлением 0-50 ГПа.

Детали расчетов

Объектами исследования являлись многослойные структуры графена и карбида кремния с числом слоев от 1 до 3. Исходная геометрия мультиграфена представляла собой слои графена с упаковкой АВАА (α-графит) и межплоскостным расстоянием $r_{sh} = c/2 = 3.35 \text{ \AA}$ (с-параметр решетки графита).

Численное моделирование электронной структуры многослойных графеновых и карбид кремниевых структур проводилось теорией функционала электронной плотности DFT (density functional theory) в приближении локальной спиновой плотности LSDA (local spin density approximation) [19, 20]. Расчеты выполнены в Суперкомпьютерном центре Воронежского государственного университета с использованием программного комплекса Gaussian09.

Рассчитывались внутрислойные длины связей (R_{C-C} , R_{Si-C}), межслойные расстояния (r_{sh}), приведенная энергия связи (E_b), межслойная энергия связи (E_{bsh}), ширина запрещенной зоны (E_g).

Приведенные энергии связей в мультиграфене и карбиде кремния рассчитывались по формулам (1) и (2).

$$E_b = \frac{E_{tot}(C_N) - NE_{tot}(C)}{N}, \quad (1)$$

$$E_b = \frac{E_{tot}(Si_N C_N) - NE_{tot}(Si) - NE_{tot}(C)}{2N}, \quad (2)$$

где $E_{tot}(Si)$, $E_{tot}(C)$, $E_{tot}(C_N)$, $E_{tot}(Si_N C_N)$ – полная энергия уединенного атома кремния, углерода, мультиграфена с N атомами углерода, 2D карбида кремния содержащего N атомов кремния и N атомов углерода.

Приведенные межплоскостные энергии связей в мультиграфене и карбиде кремния рассчитывались по формулам (3) и (4):

$$E_{bsh} = \frac{E_{tot}(C_N) - nE_{tot}(C_{n=1})}{n}, \quad (3)$$

$$E_{bsh} = \frac{E_{tot}(Si_N C_N) - nE_{tot}(SiC_{n=1})}{n}, \quad (4)$$

где $E_{tot}(C_{n=1})$, $E_{tot}(SiC_{n=1})$ – полная энергия однослойного мультиграфена, карбида кремния.

Воздействие одноосного сжатия на многослойные структуры определялось по следующей схеме. В оптимизированной структуре уменьшалось расстояние между граничными

слоями. Сила взаимодействия между слоями $F = -dE_{tot}/dr_{sh}$, где E_{tot} – полная энергия элементарной ячейки структуры. Давление P , необходимое для смещения слоев, определялось как $P = F/S$, где S – удвоенная площадь элементарной ячейки. Верхний предел абсолютного давления выбран на основе экспериментальных работ по исследованию барических зависимостей электросопротивления углеродных наноматериалов и составляет 50 ГПа [14].

Результаты и обсуждение

В результате расчета полных энергий различных аллотропных модификаций многослойных структур установлено, что наиболее устойчивым является мультиграфен с укладкой слоев АВА (упаковка α-графита) (рис. 1а). Наиболее стабильной конфигурацией слоев многослойного карбида кремния является ААА (рис. 1б), в которой атомы углерода следующего слоя расположены над атомами кремния предыдущего и наоборот.

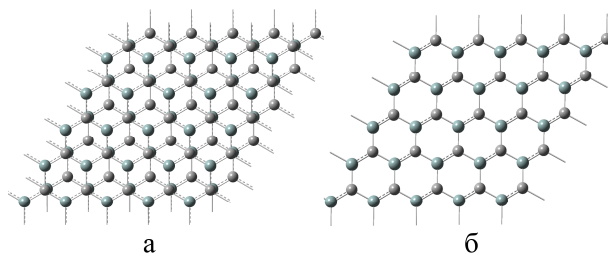


Рис. 1. Строение многослойных структур графена и карбида кремния с упаковкой АВА и ААА соответственно

Межслойное расстояние в двух и трехслойном графене составляет $r_{sh}=3.61$ и $3.53 \text{ \AA}$, что больше, чем в графите $r_{sh}=3.35 \text{ \AA}$. Таким образом, нарушение граничных условий в многослойных структурах определяет изменение параметров межслойных связей, а переход от объемных материалов к многослойным структурам сопровождается увеличением межплоскостного расстояния. Увеличение межплоскостного расстояния делает мультиграфен перспективным материалом для создания водородных ячеек, литий-ионных батарей повышенной емкости.

Установлена стабилизация структур при последовательном увеличении числа слоев от $n=1$ до 3: приведенная энергия связи $E_b=8.90$, 8.93 , 8.94 и 8.32 , 8.40 8.43 эВ/атом для графена и карбида кремния соответственно. Ковалентные полярные межслойные связи энергией $\sim 3 \text{ эВ}$ в SiC определяют его значительную жесткость по сравнению с многослойным графеном, межплоскостные энергии связи в котором

$E_{bsh}=60$ мэВ. Различие межслойных энергий связей проявляется в межплоскостных расстояниях, равных $r_{sh} \approx 3.35$ и 2.20 Å для многослойного графена и SiC.

При одноосном сжатии мультиграфена установлено перераспределение заряда между исходно нейтральными слоями. В противоположность мультиграфену, в карбиде кремния обнаружено уменьшение величин атомных зарядов.

На основе исследования геометрических параметров и стабильности многослойных структур установлено уменьшение межплоскостного расстояния r_{sh} двух- и трехслойного мультиграфена с 3.61 до 1.90 Å и с 3.56 до 2.28 Å при давлении 0 и 50 ГПа. Барическая зависимость эффективного заряда для двух- и трехслойного мультиграфена линейная, что косвенно согласуется с экспериментальными исследованиями барических зависимостей электросопротивления мультиграфена [14].

Установлена прямо пропорциональная зависимость ширины запрещенной зоны SiC от давления, что открывает возможность модуляции электронной структуры и электропроводности 2D карбида кремния внешними механическими воздействиями. Обнаружено наличие критического давления 20 и 30 ГПа для двух- и трехслойного графена, при котором происходит формирование межплоскостных π -связей. Формирование связей имеет два следствия, во-первых, определяет изменение формы потенциальных кривых, которые становятся более крутыми, чем в случае чисто ван-дер-ваальсового взаимодействия (рис. 2). Во-вторых, межплоскостные π -связи выступают в роли каналов электронного переноса в направлении перпендикулярно слоям, уменьшая анизотропию электропроводности мультиграфена.

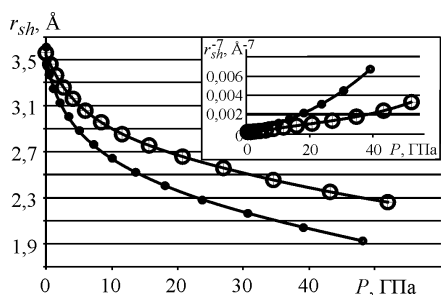


Рис. 2. Барическая зависимость межслойного расстояния для двух- ($\circ$) и трехслойного ($\bullet$) мультиграфена

Заключение и выводы

В работе проведено теоретическое исследование многослойных структур графена и карбида кремния с числом слоев от 1 до 3 подверженных одноосному сжатию давлением 0 - 50 ГПа. Обнаружено пороговое изменение электропроводности для двух- и трехслойного графена при критических давлениях 20 и 30 ГПа, для многослойного карбида кремния установлено монотонное изменение электрофизических свойств.

Стабилизация многослойных структур при увеличении числа слоев, увеличенные межслоевые расстояния относительно объемного графита и SiC, возможность управления их транспортными свойствами определяют к ним интерес для разработки устройств наноэлектромеханических систем, литий-ионных аккумуляторов, элементов сенсорики. Полученные результаты могут использоваться для экспериментальной идентификации многослойных структур графена и карбида кремния подверженных одноосному сжатию, а также открывают возможность эффективного управления электрофизическими свойствами многослойных структур графена и карбида кремния.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ проект № 16-43-360281 p_a.

Литература

1. Graphene-like Boron-Carbon-Nitrogen Monolayers / S. Beniwal, J. Hooper, D.P. Miller, P.S. Costa, G. Chen, S.Y. Liu, P.A. Dowben, E.C. Sykes, E. Zurek, A. Enders // ACS Nano. – 2017. - Vol. 11. - N 3. - Pp. 2486–2493.
2. A new Dirac cone material: a graphene-like Be_3C_2 monolayer / B. Wang, S. Yuan, Y. Li, L. Shia, J. Wang // Nanoscale. – 2017. - N 9. - Pp. 5577–5582.
3. Chiu K.-L. Single-electron transport in graphene-like nanostructures / K.-L. Chiu, Y. Xu // Physics Reports. – 2017. - Vol. 669. - N 31. - Pp. 1–42.
4. Graphene-like silicon nanoribbons on Ag(110): A possible formation of silicone / B. Aufray, A. Kara, S. Vizzini, H. Oughaddou, C. Léandri // Appl. Phys. Lett. – 2010. - Vol. 96. - p. 183102.
5. Isolation and characterization of few-layer black phosphorus / A. Castellanos-Gomez, L. Vicarelli, E. Prada, J.O. Island, K.L. Narasimha-Acharya, S.I. Blanter, D.J. Groenendijk, M. Buscema, G.A. Steele, J.V. Alvarez, H.W. Zandbergen, J.J. Palacios, van der Zant H. S. J. // 2D Materials. – 2014. - № 1. - p. 025001.
6. Few-layer antimonene: large yield synthesis, exact atomical structure and outstanding optical limiting / C. Huo, X. Sun, Z. Yan, X. Song, S. Zhang, Z. Xie, J. Z. Liu, J. Ji, L. Jiang, S. Zhou, H.J. Zeng // Am. Chem. Soc. – 2017. - Vol. 139. - № 9. - p. 3568.
7. Формирование аллотропной наномодификации Sb — мультиантимонена при спонтанной кристаллизации расплава / Т.В. Куликова, Л.А. Битюцкая, А.В. Тучин, А.А. Аверин // Перспективные материалы. – 2017. - № 3. - С. 5–13.

8. Ивановский А.Л. Графеновые и графеноподобные материалы / А.Л. Ивановский // УХН. – 2012. - Т. 81. - № 7. - С. 571–605.
9. Synthesis of SiC nanorods using floating catalyst / Y. Zhang, L. Wang, R. He, X. Chen, J. Zhu // Solid State Communication. – 2001. - Vol. 118. - № 11. Pp. 595–598.
10. Oriented Silicon Carbide Nanowires: Synthesis and Field Emission Properties / Z. Pan, H.L. Lai, F.C.K. Au, X. Duan, W. Zhou, W. Shi, N. Wang, C.S. Lee, N.B. Wong, S.T. Lee, S. Xie // Adv. Mater. – 2000. - № 12. - Pp. 1186–1190.
11. Получение и структурные исследования нанокompозита на основе C-SiC / П.А. Александров, Н.Е. Белова, К.Д. Демаков, Л.М. Иванова, Ю.Ю. Кузнецов, Н.В. Степанов, С.Г. Шемардов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез. – 2007. - № 1. - С. 68–75.
12. Синтез периодической наноструктуры SiC/C / Г.А. Емельченко, В.М. Масалов, А.А. Жохов, М.Ю. Максимук, Т.Н. Фурсова, А.В. Баженов, И.И. Зверькова, С.С. Хасанов, Э.А. Штейнман, А.Н. Терещенко // ФТТ. – 2011. - Т. 53. - № 6. - С. 1059–1063.
13. Получение нитевидных кристаллов карбида кремния из нитрида кремния / Ю.Ф. Каргин, С.Н. Ивичева, А.С. Лысенко, Н.А. Аладьев, С.В. Куцев, Л.И. Шворнева // Неорганические материалы. – 2009. - Т. 45. - № 7. - С. 820–828.
14. Тихомирова Г.В.. Сравнительное исследование проводимости графита и фуллерена при высоких давлениях / Г.В. Тихомирова, А.Н. Бабушкин // ФТТ. – 2002. - Т. 44. - № 4. - С. 618–620.
15. Бокова А.М. Исследование мультиграфеновых структур на основе квантово-химической модели / А.М. Бокова, А.В. Тучин, Л.А. Битюцкая // Известия вузов. Электроника. – 2015. - Т. 20. - № 1. С. 5–9.
16. Kasper Y. Numerical simulation of multi-layer graphene structures based on quantum-chemical model / Y. Kasper, A.V. Tuchin, A.M. Bokova // J. of Phys.: Conf. Series, 2016. - Vol. 741. p. 012022.
17. Осцилляции межслоевых расстояний в мультиграфене / А.В. Тучин, А.М. Бокова, Л.А. Битюцкая, Е.Н. Бормонтов // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2014. - Т. 16. - № 1. - С. 79–83.
18. Yoo E. J. Large Reversible Li Storage of Graphene Nanosheet Families for Use in Rechargeable Lithium Ion Batteries / Nano Lett. – 2008. - Vol. 8. - № 8. Pp. 2277–2282.
19. Hohenberg P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg and W. Kohn // Phys. Rev. – 1964. - Vol. 136. - № 3B. - Pp. 864–871.
20. Kohn W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L. J. Sham // Phys. Rev. – 1965. - Vol. 140. - Pp. 1133–1138.

Воронежский государственный университет

BARIC PROPERTIES OF 2D LAYER STRUCTURES WITH A DIFFERENT TYPE OF INTER-LAYER INTERACTION

A.V. Tuchin¹, Yu.V. Kasper², T.V. Kulikova³, L.A. Bityutskaya⁴, E.N. Bormontov⁵

¹ PhD, Associate Professor, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: a.tuchin@bk.ru

² MA, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: julilikasper@yandex.ru

³ Graduate student, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: kaimt@mail.ru

⁴ PhD, Associate Professor, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: me144@phys.vsu.ru

⁵ Full Doctor, Professor, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: me144@phys.vsu.ru

The combination of high mobility of electrons and holes, thermal conductivity and thermodynamic stability led to strong research activity in studying graphene and finding of new graphene-like layered materials, such as 2D silicon carbide. The actual problem is the determination of ways to control the properties of 2D layered materials external influences such as electromagnetic fields, pressure. The aim of this work is a theoretical study of the restructuring of the electronic structure of multi-layer structures of graphene and silicon carbide with the number of layers from 1 to 3, subject to uniaxial compression. A stabilization of the structures during their layer-by-layer growth was revealed. Equipped with a linear pressure dependence of the effective charge of two - and three-layer multigravida. Discovered a threshold change in conductivity for the two - and three-layer graphene at the critical pressures of 20 and 30 GPA, which is determined by the formation of interlayer conductivity channels. Installed directly proportional relationship of the band gap SiC for high blood pressure. Thermodynamic stability of layered structures of graphene and silicon carbide, the sensitivity of their electronic structure to external pressure to open up the possibility of controlling their electrophysical properties and external mechanical influences

Key words: layered materials, multigrain, silicon carbide, electronic structure, pressure

References

1. Beniwal S., Hooper J., Miller D. P., Costa P.S., Chen G., Liu S. Y., Dowben P.A., Sykes E. C., Zurek E., Enders A. "Graphene-like Boron-Carbon-Nitrogen Monolayers", *ACS Nano*, 2017, vol. 11, no. 3, pp. 2486–2493.
2. Wang B., Yuan S., Li Y., Shia L., Wang J. "A new Dirac cone material: a graphene-like Be₃C₂ monolayer", *Nanoscale*, 2017, vol. 9, pp. 5577–5582.
3. Chiu K.-L., Xu Y. "Single-electron transport in graphene-like nanostructures", *Physics Reports*, 2017, vol. 669, no. 31, pp. 1–42.
4. Aufray B., Kara A., Vizzini S., Oughaddou H., Léandri C. "Graphene-like silicon nanoribbons on Ag(110): A possible formation of silicone", *Appl. Phys. Lett.*, 2010, vol. 96, pp. 102–183.
5. Castellanos-Gomez A., Vicarelli L., Prada E., Island J.O., Narasimha-Acharya K. L., Blanter S. I., Groenendijk D. J., Buscema M., Steele G.A., Alvarez J. V., Zandbergen H. W., Palacios J. J., van der Zant H. S. J. "Isolation and characterization of few-layer black phosphorus", *2D Materials*, 2014, no. 1, p. 025001.
6. Huo C., Sun X., Yan Z., Song X., Zhang S., Xie Z., Liu J. Z., Ji J., Jiang L., Zhou S., Zeng H. J. "Few-layer antimonene: large yield synthesis, exact atomical structure and outstanding optical limiting", *Am. Chem. Soc.*, 2017, vol. 139, no. 9, p. 3568.
7. Kulikova T. V., Bityuckaya L. A., Tuchin A. V., Averin A. A. "Formation of allotropic nanomodification of Cb-multiantimonen under spontaneous crystallization of a melt, *Perspective materials (Perspektivnye materialy)*, 2017, no. 3, pp. 5–13.
8. Ivanovskij A. L. "Graphene and graphene-like materials" ("Grafenovyie i grafenopodobnye materialy"), *UHN*, 2012, vol. 81, no. 7, pp. 571–605.
9. Zhang Y., Wang L., He R., Chen X., Zhu J. "Synthesis of SiC nanorods using floating catalyst", *Solid State Communications*, 2001, vol. 118, no. 11, pp. 595–598.
10. Pan Z., Lai H. L., Au F.C.K., Duan X., Zhou W., Shi W., Wang N., Lee C.S., Wong N. B., Lee S. T., Xie S. "Oriented Silicon Carbide Nanowires: Synthesis and Field Emission Properties", *Advanced Materials*, 2000, no. 12, pp. 1186–1190.
11. Aleksandrov P. A., Belova N. E., Demakov K. D., Ivanova L. M., Kuznecov YU., Stepanov N. V., Hemardov S. G. "Obtaining and structural studies of a C-SiC-based nano-composite", *The Matters of Atomic Science and Technology (Voprosy atomnoj nauki i tekhniki)*, 2007, no. 1, pp. 68–75.
12. Emel'chenko G. A., Masalov V. M., Zhohov A. A., Maksimuk M. YU., Fursova T. N., Bazhenov A. V., Zver'kova I. I., Hasanov S. S., Shtejnman E.H. A., Tereshchenko A. N. "Synthesis of a periodic SiC-C nanostructure", *FTT*, 2011, vol. 53, no. 6, pp. 1059–1063.
13. Kargin YU. F., Ivicheva S. N., Lysenko A. S., Alad'ev N. A., Kucev S. V., Shvorneva L. I., "Obtaining Filamentary Silicon Carbide Crystals from Silicon Nitride", *Non-organic materials" (Neorganicheskie materialy)*, 2009, vol. 45, no. 7, pp. 820–828.
14. Tihomirova G. V., Babushkin A. N. "Comparative study of the conductivity of graphite and fullerene at high pressures", *FTT*, 2002, vol. 44, no. 4, pp. 618–620.
15. Bokova A. M., Tuchin A. V., Bityuckaya L. A. "Study of multigraphen structures on the basis of the quantum-chemical model", *Proceedings of higher educational institutions. Electronics, (Izvestiya vuzov. Elektronika)*, 2015, vol. 20, no. 1, pp. 5–9.
16. Kasper Y., Tuchin A. V., Bokova A. M. "Numerical simulation of multi-layer graphene structures based on quantum-chemical model", *Phys.: Conf. Series*, 2016, vol. 741, p. 012022.
17. Tuchin A. V., Bokova A. M., Bityuckaya L. A., Bormontov E. N. "Oscillations of interlayer distances in a multigraph / Condensed media and interface boundaries", *Condensed environments and interface boundaries (Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granicy)*, 2014, vol. 16, no. 1, pp. 79–83.
18. Yoo E. J. Large Reversible Li "Storage of Graphene Nanosheet Families for Use in Rechargeable Lithium Ion Batteries", *Nano Letters*, 2008, vol. 8, no. 8, pp. 2277–2282.
19. Hohenberg P. and Kohn W. "Inhomogeneous Electron Gas", *Physical Review*, 1964, vol. 136, no. 3B, pp. 864–871.
20. Kohn W., Sham L. J. "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects", *Physical Review*, 1965, vol. 140, pp. 1133–1138.

НЕЛИНЕЙНЫЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК В НАНОСТРУКТУРИРОВАННОМ ТИТАНАТЕ БАРИЯ

О.И. Сысоев, Т.Н. Короткова, В.В. Запорожский, Д.А. Лисицкий, Л.И. Янченко,
Н.А. Емельянов, Л.Н. Коротков

Путем компактирования нанопорошка титаната бария (BaTiO_3) с последующим отжигом на воздухе при температуре 1200 °С получены образцы наноструктурированного титаната бария со средним размером кристаллитов около 50 нм. На основании результатов рентгенофазного анализа и исследований температурных зависимостей диэлектрической проницаемости в интервале температур 20 – 200 °С установлено, что материал при температуре $T_C \approx 140$ °С претерпевает сегнетоэлектрический фазовый переход первого рода. Изучена реверсивная диэлектрическая нелинейность материала в интервале электрических полей $0 - \pm 4$ кВ/см. Обнаруженная в параэлектрической фазе нелинейность диэлектрической проницаемости качественно соответствует предсказаниям феноменологической теории сегнетоэлектрических фазовых переходов первого рода. Наряду с этим обосновано предположение о наличии существенно выше T_C областей сегнетоэлектрической фазы, стабилизированных, предположительно, дефектами кристаллической решетки. Анализ формы, наблюдаемой в полярной фазе электрополовой зависимости диэлектрической проницаемости, указывает на существование в исследуемом материале доменной структуры

Ключевые слова: наноструктурированный сегнетоэлектрик, фазовый переход, диэлектрическая нелинейность, доменный механизм

Введение

В последние годы существенно вырос интерес физиков к проблемам наноразмерных конденсированных сред. Это, с одной стороны, обусловлено их уникальными физико-химическими свойствами, в частности такими, которые отсутствуют у объемных материалов того же химического состава. С другой стороны, внимание к наноматериалам стимулировано их широким практическим использованием, например, в изделиях микро- и нанoeлектроники. Здесь представляется весьма перспективным применение так называемых интегрированных сегнетоэлектриков для создания энергонезависимой электронной памяти. Особый акцент делается на анализе физических свойств наноструктурированных сегнетоэлектриков [1, 2]. В настоящее время надежно установлено, что эти свойства зависят не только от

характерных размеров сегнетоэлектрических частиц, но и от концентрации и типа, содержащихся в них дефектов, значительную роль играют электростатическое и механическое взаимодействия частиц друг с другом и подложкой.

Следует заметить, что высокая концентрация дефектов в нанокристаллических сегнетоэлектриках является следствием технологии получения наноразмерных материалов, синтез которых производится в существенно неравновесных условиях, или в условиях, когда исходный объемный материал подвергается сильным механическим воздействиям [1].

Вероятно, по этой причине свойства однокристаллов по химическому составу материалов, состоящих из наночастиц одинакового размера, заметно различаются.

Целью данной работы стало изучение и нелинейных диэлектрических свойств модельного сегнетоэлектрика титаната бария (BaTiO_3) в наноструктурированном состоянии.

Методика эксперимента и образцы

Для измерения были изготовлены образцы в форме дисков. Порошок высокой степени чистоты был изготовлен компанией «Sigma-Aldrich». Из этого порошка, состоящего из частиц со средним диаметром ≈ 50 нм (рис.1а), были спрессованы образцы диаметром 10 и толщиной 1 мм, которые подверглись термическому отжигу при температуре 1200 °С в течение 1 часа. Как видно из рис.1б, отжиг не привел к рекристаллизации и увеличению размеров

Сысоев Олег Иванович – ВУНЦ ВВС «ВВА им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», канд. физ.-мат. наук, доцент, e-mail: sysoevog@gmail.com
Короткова Татьяна Николаевна – ВИ МВД России, канд. физ.-мат. наук, доцент, e-mail: tn_korotkova@mail.ru
Запорожский Вадим Владимирович – ВГТУ, студент, e-mail: xyligan8117@yandex.ru
Лисицкий Дмитрий Александрович – ВГТУ, аспирант, e-mail: d.a.lisitsky@mail.ru
Янченко Лариса Ивановна – ВГТУ, канд. физ.-мат. наук, доцент, e-mail: lyanchenko74@yandex.ru
Емельянов Никита Александрович – КГУ, канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, e-mail: nikitaemelianov1988@gmail.com
Коротков Леонид Николаевич – ВГТУ, д-р физ.-мат. наук, профессор, e-mail: l_korotkov@mail.ru

кристаллитов. Вместе с тем произошло образование агломератов частиц. Видно, что экспериментальный образец содержит большое количество пор.

Анализ рентгеновской дифрактограммы, представленной на рис. 2 ($\text{Cu K}\alpha$ излучение), показал, что в образце, прошедшем термообработку, сформировалась тетрагональная фаза титаната бария.

Для диэлектрических измерений на поверхности образцов были нанесены серебряные электроды. Образцы помещали в термостат, где температура изменялась от 20 до 200 °С и контролировалась посредством алюмель – хромелевой термопары с погрешностью не превышающей $\pm 0,5$ °С.

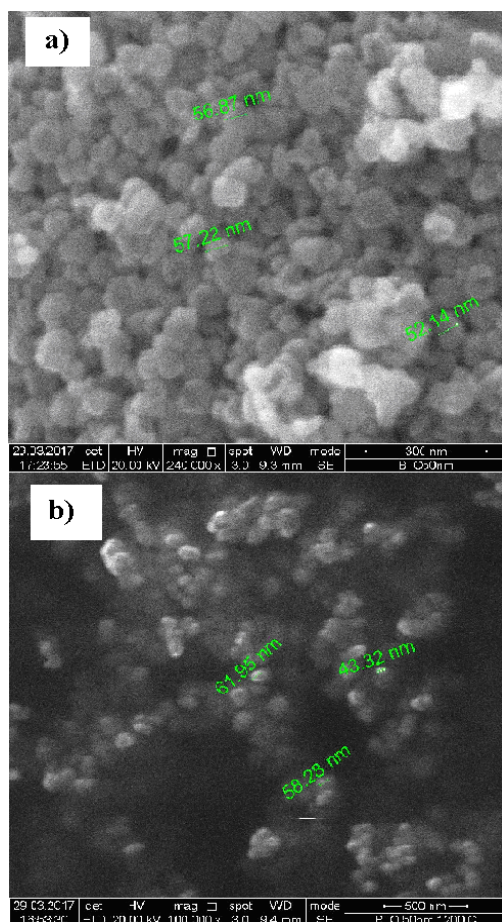


Рис. 1. Изображения поверхности исходного порошка BaTiO_3 (а) и поверхности образца, подвергнутого термическому отжигу при температуре 1200 °С, полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа

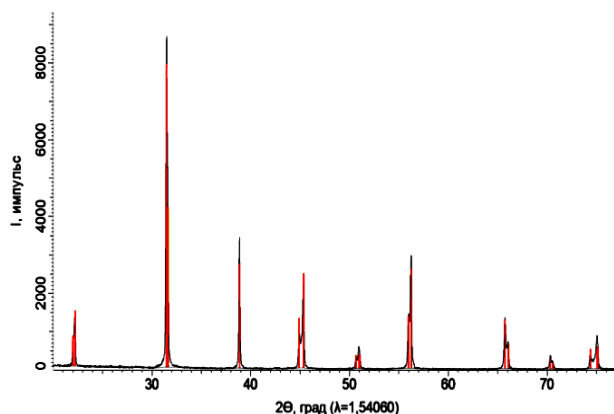


Рис. 2. Рентгенограмма образца BaTiO_3 , подвергнутого отжигу при 1200 °С

Все измерения проводили с помощью измерителя иммитанса Е7-20 на частоте 10 кГц в условиях медленного нагрева/охлаждения образца со скоростью около 2 °С/мин, а также в режиме термостабилизации. В последнем случае отклонения температуры от заданной величины не превышали $\pm 1,5$ °С.

Для изучения реверсивной диэлектрической нелинейности к образцу через развязывающее устройство прикладывали смещающее электрическое напряжение в пределах от 0 до 400 В.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Для определения температуры Кюри в исследуемом материале представлялось целесообразным изучить температурные зависимости диэлектрической проницаемости ϵ (рис. 3). Видно, что зависимость ϵ от температуры является не монотонной и носит гистерезисный характер. На кривой $\epsilon(T)$, полученной в ходе нагрева, в окрестностях температуры $T_{\text{Ch}} \approx 140$ °С наблюдается характерный отчетливый максимум, соответствующий переходу материала из сегнетоэлектрической фазы в параэлектрическую.

При охлаждении образца пик ϵ регистрируется при температуре $T_{\text{Ce}} \approx 130$ °С.

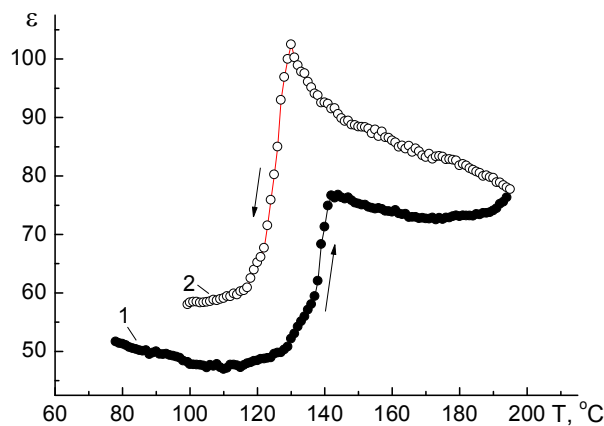


Рис. 3. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости, полученные на частоте 10 кГц в ходе нагрева (1) и охлаждения (2)

Наблюдаемый гистерезис диэлектрической проницаемости свидетельствует о том, что сегнетоэлектрический фазовый переход в данном материале является переходом первого рода. Ширина термического гистерезиса $\Delta T_C = T_{Ch} - T_{Cs}$ составляет $\approx 10^\circ\text{C}$, что приблизительно совпадает с ΔT_C в микрокристаллическом (керамическом) титанате бария.

Следует также заметить, зависимость $\varepsilon(T)$, полученная при охлаждении образца, проходит выше кривой, наблюдаемой в ходе нагрева. Можно предположить, что увеличение ε после нагрева материала может быть вызвано вкладом, даваемым подвижными зарядами, которые в сегнетоэлектрической фазе были локализованы на границах зерен и доменных границах и компенсировали заряд, обусловленный спонтанной поляризацией.

Отметим также, что диэлектрическая проницаемость полученного в условиях эксперимента наноструктурированного BaTiO_3 заметно меньше проницаемости как объемного [1], так и наноструктурированного титаната бария с диаметром частиц около 100 нм [3].

Рассмотрим теперь зависимости ε от напряженности медленно изменяющегося смещающего электрического поля при температурах, соответствующих сегнетоэлектрической (рис. 4) и параэлектрической фазам (рис. 5).

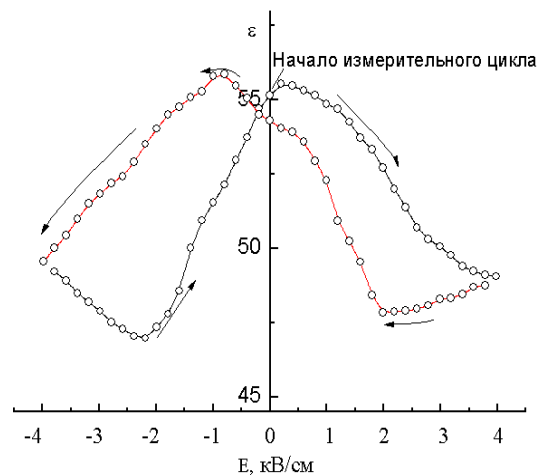


Рис. 4. Зависимость диэлектрической проницаемости от смещающего электрического поля при температуре 60°C

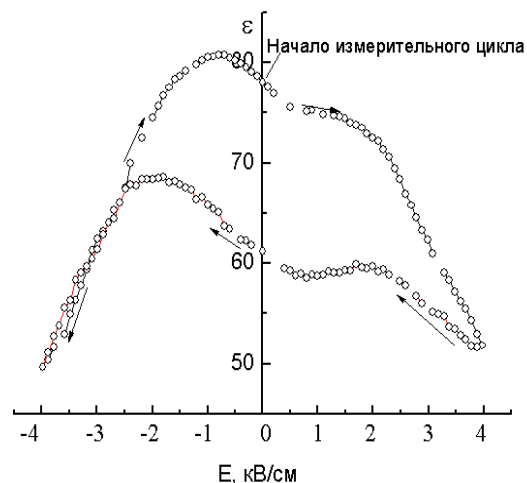


Рис. 5. Зависимость диэлектрической проницаемости от смещающего электрического поля при температуре 160°C

Видно, что кривые $\varepsilon(E)$, наблюдаемые ниже температуры Кюри, носят гистерезисный характер и имеют форму «бабочки», слегка смещенной влево относительно начала координат. Такое смещение, вероятно, обусловлено действием внутреннего поля.

При увеличении напряженности поля E на первом этапе происходит некоторый рост ε , обусловленный отрывом доменных границ от стопоров. Дальнейшее увеличение напряженности смещающего поля приводит к заметному уменьшению диэлектрической проницаемости. Такой вид зависимости $\varepsilon(E)$, в частности, ее выраженный гистерезисный характер, однозначно говорит о значительном вкладе доменного механизма в реверсивную нелинейность в исследуемом материале.

Вместе с тем вид кривой $\varepsilon(E)$ отличается от канонического [4], что, вероятно, связано

как со специфической доменной структурой нанокристаллического BaTiO_3 , так и с тем, что смещающее поле, прилагаемое в условиях эксперимента к образцу, не превысило значения коэрцитивного поля.

Зависимость $\varepsilon(E)$, полученная при температуре, соответствующей параэлектрической фазе (рис. 5), заметно отличается от рассмотренный выше. Гистерезисные явления здесь выражены слабее, что естественно ожидать, поскольку выше T_C доменные границы должны отсутствовать.

С повышением абсолютной величины поля E вначале происходит некоторый рост диэлектрической проницаемости, которая достигает максимума при $|E| \approx 1,5$ кВ/см. С дальнейшим повышением поля E происходит уменьшение ε .

Подобный вид кривой $\varepsilon(E)$ предсказывается феноменологической теорией сегнетоэлектрических фазовых переходов первого рода для температур, незначительно превышающих T_C [5], где возможно существование метастабильной полярной фазы. В нашем случае, однако, данная зависимость получена при температуре, лежащей на 20°C выше T_C . Можно предположить, что в случае наноструктурированного BaTiO_3 имеет место сосуществование сегнетоэлектрической и параэлектрической фаз в широком интервале температур, лежащем выше точки Кюри.

Такое предположение согласуется с данными работы [6], в которой сообщается о возможности существования метастабильной полярной фазы в монокристаллическом титанате бария при температурах существенно превышающих T_C .

Заключение

На основании анализа результатов исследования установлено, что в частицах титаната бария с размерами около 50 нм, отожженных при температуре 1200°C реализуется сегнетоэлектрический фазовый переход первого рода.

Обнаруженная выше температуры Кюри нелинейность диэлектрической проницаемости качественно соответствует предсказаниям феноменологической теории сегнетоэлектрических фазовых переходов первого рода, развитой для объемных сегнетоэлектриков.

Наряду с этим гистерезис зависимости $\varepsilon(E)$, наблюдаемый глубоко в параэлектрической фазе ($T - T_C \approx 20^\circ\text{C}$), позволяет предположить существование в ней сегнетоэлектрических областей, сохранившихся, по-видимому, благодаря взаимодействию с дефектами кристаллической решетки, подобно случаям, рассмотренным в работах [6 и 7].

Наблюдаемая в сегнетоэлектрической фазе гистерезисная зависимость $\varepsilon(E)$ указывает на существование в исследуемом материале ниже температуры Кюри доменной структуры.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, грант № 16-32-00378 мол_а".

Литература

1. Глинчук М.Д. Наноферроики / М.Д. Глинчук, А.В. Пагуля. – Киев: Наукова Думка. – 2010. – 312 с.
2. Nanoscale Ferroelectrics and Multiferroics Vol. 1./ Edited by Alguero M., Gregg J. M., Mitoseriu L. 2016 John Wiley & Sons Ltd.
3. Электрические, диэлектрические и магнитные свойства наноструктурированного титаната бария / В.М. Аль Мандалави, Т.Н. Короткова, А.И. Дунаев, М.А. Каширин, А.В. Калгин, Н.А. Емельянов, Л.Н. Коротков // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2016. – Т. 12. – № 5. – С. 19-27.
4. Физика сегнетоэлектрических явлений / Г.А. Смоленский, В.А. Боков В.А. Исупов и др.; под ред. Г.А. Смоленского. – Л.: Наука, - 1985. – 476 с.
5. Иона Ф. Сегнетоэлектрические кристаллы / Ф. Иона, Д. Ширане. - М.: Мир, - 1965. – 556 с.
6. Bednyakov P.S. Investigation of ferroelectric materials by the thermal noise method: Advantages and limitations / P.S. Bednyakov, I.V. Shnidshtein, B.A. Strukov // Ferroelectrics. - 2016. - Vol. 500:1. - P. 203-217.
7. Гринев С.А. Диэлектрическая релаксация в несоизмеримой фазе Rb_2ZnCl_4 / С.А. Гринев, В.В. Горбатенко, Б.Н. Прасолов // Известия АН. Сер. физич.- 1993. - Т. 57.- № 3.- С. 97 - 100.

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина» (г. Воронеж)
Воронежский институт МВД России
Воронежский государственный технический университет
Курский государственный университет

LINEAR AND NONLINEAR DIELECTRIC RESPONSE IN NANOSTRUCTURED BARIUM TITANATE

**O.I. Sysoev¹, T.N. Korotkova², V.V. Zaporozhskiy³, D.A. Lisitskiy⁴, L.I. Yanchenko⁵,
N.A. Emelianov⁶, L.N. Korotkov⁷**

¹PhD, Associate Professor, Military training and scientific center of air forces "Air Force Academy", Voronezh, Russian Federation
e-mail: sysoevog@gmail.com

²PhD, Associate Professor, Voronezh Institute of RF Ministry of Internal Affairs, Voronezh, Russian Federation
e-mail: tn_korotkova@mail.ru

³Student, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: xyligan8117@yandex.ru

⁴Graduate Student, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: d.a.lisitsky@mail.ru

⁵PhD, Associate Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: lyanchenko74@yandex.ru

⁶PhD, Researcher, Kursk State University, Kursk, Russian Federation
e-mail: nikitaemelianov1988@gmail.com

⁷Full Doctor, Professor, Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation
e-mail: l_korotkov@mail.ru

By compaction of barium titanate nanopowder (BaTiO₃) followed by annealing in air at a temperature of 1200 °C, samples of nanostructured barium titanate with an average crystallite size of about 50 nm were obtained. Based on the results of X-ray analysis and the studies of the temperature dependencies of the dielectric permittivity in the temperature range 20-200 °C, it was found that the material undergoes the first-order ferroelectric phase transition at a temperature of 140 °C. The reverse dielectric nonlinearity of the material in the electric field range 0 ± 4 kV / cm was studied. The nonlinearity of the dielectric constant found within the ferroelectric phase corresponds qualitatively to the predictions of the phenomenological theory of first-order ferroelectric phase transitions. Along with this, the authors justify the existence of areas of the ferroelectric phase, which are stabilized, presumably, by crystal lattice defects substantially higher than the T_C . Analysis of the shape observed in the polar phase of the electric field dependence of the dielectric permittivity indicates the existence of a domain structure in the material under study

Key words: nanostructured ferroelectric, phase transition, dielectric nonlinearity, domain mechanism

References

1. Glinchuk M.D., Ragulya A.V. "Nanoferroics" ("Nanoferroiki"), Kiev, *Naukova Dumka*, 2010, p. 312.
2. Alguero M., Gregg J. M., Mitoseriu L. "Nanoscale Ferroelectrics and Multiferroics" , Edited by John Wiley & Sons Ltd, 2016, vol. 1
3. Al Mandalawi W.M., Korotkova T.N., Dunaev A.I., Kashirin M.A., Kalgin A.V., Emelianov N.A., Korotkov L.N. "Electrical, dielectrical and magnetic properties of nanostructured barium titanate", *Bulletin of Voronezh State Technical University (Vestnik Voronezhskogo Gosudarstvennogo Technicheskogo Universiteta.)*, 2016, vol.12, no.5 , pp. 19-27.
4. Smolensky G.A. Bokov V.A. Isupov V.A. et al "Physics of ferroelectric phenomena" ("Fizika segnetoelektricheskikh yavlenij"), Leningrad, *Nauka*, 1985, p. 476.
5. Iona F., Shirane D. "Ferroelectric crystals" ("Segnetoelektricheskie kristally"), Moscow, *Mir*, 1965, p. 556.
6. Bednyakov P. S. Shnaidshtein I. V., Strukov B. A. "Investigation of ferroelectric materials by the thermal noise method: Advantages and limitations", *Ferroelectrics (Ferroelktiki)*, 2016, vol. 500, pp. 203-217.
7. Gridnev S.A. V.V. Gorbatenko, B.N. Prasolov "Dielectric relaxation in incommensurate phase" ("Dielektricheskaya relaksatsiya v nesorazmernoy faze Rb₂ZnCl₄") *Izvestiya, Proceedings of the Academy of Sciences. Ser. physicist (Izvestiya AN ser. Fizich.)*, 1993, vol. 57, no. 5, pp. 97 – 100.