



ОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

10 • 2012

Науково-теоретичний журнал Президії Національної академії наук України

Заснований у 1939 р.

Виходить щомісяця

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ ЖУРНАЛУ

А. Г. НАУМОВЕЦЬ (головний редактор), П. І. Андон, С. А. Андронаті, Л. А. Булавін, А. Ф. Булат, Г. М. Гавричкова (заст. головного редактора), В. М. Геєць (заст. головного редактора з наук. питань), В. В. Гончарук, В. Т. Грінченко, Я. М. Григоренко, Д. М. Гродзинський, В. М. Єремєєв, В. О. Іванов, І. М. Коваленко, С. В. Комісаренко, В. П. Кухар, В. М. Локтєв, О. О. Мойбенко, В. В. Моргун, І. М. Неклюдов, Г. Г. Полікарпов, В. Д. Походенко, І. К. Походня, А. М. Самойленко, В. П. Семиноженко, І. В. Сергієнко, В. І. Старостенко, Б. С. Стогній, В. М. Шестопапов, Я. С. Яцків

Зміст

Математика

- Акбергенов А. А., Пелюх Г. П.* Побудова неперервних розв'язків одного класу систем нелінійних різницевих рівнянь 7
- Kurta V. V.* A Liouville comparison principle for solutions of quasilinear singular parabolic second-order partial differential inequalities 13
- Олійник Б. В.* Самоподібність і вінцеві добутки метричних просторів 18
- Халіна К. С.* Про керованість крайовими умовами Діріхле для неоднорідної струни на півосі 24

Інформатика та кібернетика

- Богаєнко В. О., Даниленко Ю. Ю., Фінін Г. С.* Інтерполяція геоінформаційних даних з використанням методу функцій Гріна 30
- Марценюк В. П., Андрущак І. Є., Гвоздецька І. С., Климук Н. Я.* Математичні моделі в системі підтримки прийняття рішень страхового забезпечення лікування онкологічних захворювань: підхід на основі динаміки Гомперца 34
- Шевченко А. И., Миненко А. С., Замула А. А.* Об одном подходе при моделировании сложных систем 40

Механіка

- Бастун В. Н.* К оценке нижней границы интервала рассеяния предельных напряжений в элементах оболочечных конструкций 44
- Гололобов В. И.* Осесимметричные резонансные колебания гибкой шарнирно опертой вязкоупругой пластины с пьезослоями 50
- Никитина Н. В.* О бифуркациях и аналитическом решении в модели Рикитакі 56

Фізика

- Баранський П. І., Гайдар Г. П.* Визначення параметра анізотропії термоерс захоплення в багатодолінних напівпровідниках 64
- Дяченко М. М., Мирошніченко В. І., Холодов Р. І.* Електрична сприйнятливність замагніченої електронної плазми з урахуванням анізотропії температури в рамках квантової теорії поля 70
- Черепанов В. В., Сененко А. І., Прилуцький Ю. І., Марченко О. А., Наумовець А. Г.* Структура плівок немодифікованих фулеренів C_{60} , адсорбованих з фізіологічних розчинів на поверхні слюди і золота 77

Матеріалознавство

- Григорьев О. Н., Галанов Б. А., Коротеев А. В., Котенко В. А., Мелаш Л. М.* Структура и сопротивление внедрению гетерофазной керамики $V_4C-SrV_6-TiB_2$ 83

Науки про Землю

- Алексеев Д. В.* Численное моделирование влияния гидротехнических сооружений на характеристики ветрового волнения в Севастопольской бухте 89
- Даниленко В. А., Скуратівський С. І.* Солітоноподібні хвилі в нерівноважних середовищах 96
- Жолобак Г. М., Шпортюк З. М., Сибірцева О. М., Дугін С. С.* Дослідження спектрів відбиття посівів озимої пшениці молочно-воскової стиглості в зоні червоного краю як потенційних індикаторів дистанційної диференціації гетерогенності рослинного покриву 103
- Костюченко Ю. В., Соловйов Д. М., Ющенко М. В., Дугін С. С., Копачевський І. М., Артеменко І. Г.* Використання наземних гіперспектрометричних вимірювань для калібрування даних ДЗЗ в задачах оцінки стану навколишнього середовища 109
- Тарасов В. Н., Логвинов И. М., Гордиенко И. В.* Результаты магнитотеллурических исследований юга Воронежской антеклизы 115

Хімія

- Братичак М. М., Яцишин О. І.* Пероксидна похідна монометакрилату епоксидної смоли ЕД-24 119
- Давідовіч І. С., Калітовська Г. В., Антонюк Н. Г., Бурбан А. Ф.* Отримання альгінатних мікрокапсул мікроемульсійним методом: вплив параметрів процесу на характеристики мікрокапсул 125
- Курочкін В. Д.* Частотний коефіцієнт в теорії абсолютних швидкостей реакцій 130
- Руденко Л. И., Хан В. Е.-И., Джужа О. В., Кашиковский В. И., Аксеновская О. А., Пархоменко В. И.* Комплексный способ очистки жидких радиоактивных отходов от органических соединений и радионуклидов 136
- Співак В. В., Астрелін І. М., Толстопалова Н. М., Атаманюк І. В.* Регулювання фізико-хімічних та адсорбційних властивостей українських сапонітів 142

Біологія

- Андреева А. Ю., Солдатов А. А.* Изменения объема ядерных эритроцитов скорпены в условиях внешней гипоксии (эксперименты *in vitro*) 149
- Анистратенко В. В., Рябцева Ю. С., Цегельник З. В.* Репродуктивные характеристики моллюсков рода *Viviparus* (Gastropoda: Viviparidae) в зимний период на примере украинских популяций 154
- Федоренко О. А., Марченко С. М.* Потенціалзалежність активності внутрішньоклітинних іонних каналів нейронів — новий механізм регуляції кальцієвого сигналу 160
- Харчук І. В., Рибальченко В. К., Андрухов О.* Вплив АТФ-конкурентних інгібіторів тирозинкіназ похідних малеїмиду і дигідропіролу на життєздатність та апоптоз клітин ротової порожнини 165

Біохімія

Весельська Н. С., Янчук П. І., Барановський В. А., Макаrchук М. Ю. Особливості жовчоутворення при зміні функціонального стану ендотелінових рецепторів 171

Сабирова Т. Ю., Лозовая О. Й., Юзвенко Л. В., Жидкевич Н. В., Диденко Л. Ф., Сливак Н. Я. Фиторабдовирусы как регрессирующий фактор растительной опухоли 177

Біофізика

Гребнева Е. А. Природа и механизмы образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза 181

Contents

Mathematics

Akbergenov A. A., Pelyukh G. P. Constructing the continuous solutions for one class of systems of nonlinear difference equations 7

Kurta V. V. A Liouville comparison principle for solutions of quasilinear singular parabolic second-order partial differential inequalities 13

Oliynyk B. V. Self-similarity and wreath products of metric spaces 18

Khalina K. S. On the controllability over Dirichlet boundary conditions for an inhomogeneous string on the half-axis 24

Informatics and cybernetics

Bohaienko V. O., Danylenko Ju. Ju., Finin G. S. Interpolation of geoinformational data using Green's function method 30

Martsenyuk V. P., Andrushchak I. E., Gvozdetska I. S., Klymuk N. Y. Mathematical models in a system of the support of decisions for the oncological treatment insurance: an approach based on the Homperzian dynamics 34

Shevchenko A. I., Minenko A. S., Zamula A. A. About one approach to the modeling of complex systems 40

Mechanics

Bastun V. N. On the estimation of the lower boundary of a dispersion interval of limiting stresses in shell structure elements 44

Gololobov V. I. Axisymmetric resonance vibrations of a flexible hinged viscoelastic laminated piezoelectric plate 50

Nikitina N. V. About bifurcations and an analytical solution in the Rikitaki model 56

Physics

Baranskii P. I., Gaidar G. P. Determination of the anisotropy parameter of thermoelectromotive-drag in multivalley semiconductors 64

Dyachenko M. M., Miroshnichenko V. I., Kholodov R. I. Electric susceptibility of magnetized electron plasma with regard for the temperature anisotropy in the frame of quantum field theory 70

Cherepanov V. V., Senenko A. I., Prylutskyy Yu. I., Marchenko A. A., Naumovets A. G. Film structure of unmodified C₆₀ fullerenes adsorbed from physiological solutions on the surface of mica and gold 77

Materials science

Grigoriev O. N., Galanov B. A., Koroteev A. V., Kotenko V. A., Melakh L. M. Structure and resistance of the heterophase ceramic B₄C–CaB₆–TiB₂ to penetration 83

Geosciences

Alekseev D. V. Numerical simulation of the effect of hydrotechnical structures on wind wave parameters in the Sevastopol Bay 89

Danylenko V. A., Skurativskyy S. I. Soliton-like waves in nonequilibrium media 96

Zholobak G. M., Shportiuk Z. M., Sibirtseva O. N., Dugin S. S. The study of reflectance spectra for winter wheat at the early dough stage in the red edge range as potential indicators for the remote differentiation of vegetation cover heterogeneity 103

Kostyuchenko Yu. V., Solovyov D. M., Yuschenko M. V., Dugin S. S., Kopachevskiy I. M., Artemenko I. G. Utilization of in-field hyperspectral measurements for the calibration of satellite observation data for the environmental condition analysis 109

Tarasov V. N., Logvinov I. M., Gordienko I. V. The results of magnetotelluric investigations on the south of the Voronezh antecline 115

Chemistry

Bratychak M. M., Iatsyshyn O. I. Peroxy derivative of ED-24 epoxy resin monomethacrylate 119

Davidovich I. S., Kalitovska H. V., Antoniuk N. G., Burban A. F. Microemulsion technique for the production of alginic microcapsules: influence of parameters of the process on the characteristics of microcapsules 125

Kurochkin V. D. Frequency factor in the theory of absolute reaction rates 130

Rudenko L. I., Khan V. E., Dzhuzha O. V., Kashkovsky V. I., Aksenovskaya O. A., Parkhomenko V. I. A complex method for liquid radioactive waste purification from organic compounds and radionuclides 136

Spivak V. V., Astrelin I. M., Tolstopalova N. M., Atamaniuk I. V. Regulation of physico-chemical and adsorption properties of Ukrainian saponites 142

Biology

Andrieieva O. Y., Soldatov A. A. Changes in volume of scorpaena erythrocytes under outer hypoxia (*in vitro* experiments) 149

Anistratenko V. V., Ryabceva Yu. S., Tsehelnik Z. V. Reproductive characteristics of *Viviparus* (Gastropoda: Viviparidae) in winter time exemplified on the Ukrainian populations 154

Fedorenko O. A., Marchenko S. M. The voltage-dependence of the intracellular ion channels of neurons – a new mechanism of Ca²⁺ signal regulation 160

Kharchuk I. V., Rybalchenko V. K., Andrukhov O. The effects of ATP-competitive tyrosine kinase inhibitors, maleimide and dihydropyrrol derivatives, on viability and apoptosis of oral cavity cells 165

Biochemistry

Veselska N. S., Yanchuk P. I., Baranovsky V. A., Makarchuk M. Yu. Some peculiarities of bile formation under changes of a functional state of endothelin receptors 171

Sabirova T. Yu., Lozova O. Yo., Yuzvenko L. V., Zhitkevich N. V., Didenko L. F., Spivak N. Ya. Phytorhabdoviruses as a regressive factor of plant tumors 177

Biophysics

Grebneva H. A. Nature and mechanisms of formation of hot and cold spots of ultraviolet mutagenesis 181

Редактори розділів

Л. М. Литвинова, Л. І. Пузанкова, Т. І. Хоменко

Оформлення художника В. Г. Самсонова

Комп'ютерна верстка В. І. Бойко, Г. В. Попович

Видавничий дім «Академперіодика»

Свідоцтво про внесення до Держреєстру суб'єкта видавничої справи

серії ДК № 544 від 27.07.2001

01004, Київ, вул. Терещенківська, 4

Підписано до друку 10.10.2012. Формат 84×108/16. Ум. друк. арк. 19,74. Обл.-вид. арк. 16.

Тираж 269 прим. Зам. 3399. Ціна 25 грн.

Друкарня Видавничого дому «Академперіодика». 01004, Київ, вул. Терещенківська, 4



УДК 517.929

© 2012

А. А. Акбергенов, Г. П. Пелюх

Побудова неперервних розв'язків одного класу систем нелінійних різницевих рівнянь

(Представлено академіком НАН України А. М. Самоїленком)

Встановлено умови існування неперервних розв'язків одного класу нелінійних різницевих рівнянь і розроблено метод їх побудови.

У роботі досліджується структура множини неперервних розв'язків системи нелінійних різницевих рівнянь вигляду

$$x(t+1) = \Lambda x(t) + f(t, x(t)), \quad (1)$$

де $t \in \mathbb{R}^+$, Λ — стала дійсна $(n \times n)$ -матриця, $f: \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, в околі тривіального розв'язку $x(t) = 0$ ($f(t, 0) = 0$). При різних припущеннях відносно матриці Λ і вектор-функції $f(t, x)$ це питання вивчалось багатьма математиками і зараз досить добре досліджене [1–7]. Незважаючи на це в ряді випадків вдається отримати нові результати, які суттєво доповнюють і розвивають отримані раніше. Саме це є основною метою даної роботи, в якій система рівнянь (1) розглядається при таких припущеннях:

1) вектор-функція $f(t, x)$ є неперервною в області $D: t \in \mathbb{R}^+, |x| = \max_{1 \leq j \leq n} |x_j| \leq b, f(t, 0) = 0$, і задовольняє співвідношення

$$|f(t, x') - f(t, x'')| \leq L(|x'| + |x''|)^\alpha |x' - x''|,$$

де $|f| = \max_{1 \leq i \leq n} |f_i|$, $L, \alpha = \text{const} > 0$, $(t, x'), (t, x'') \in D$;

2) $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, $0 < |\lambda_1| < |\lambda_2| < \dots < |\lambda_n| < 1$,

$$|\lambda_1|^{-1} |\lambda_n|^{1+\alpha} \geq 1.$$

Внаслідок умови 2 доведена в [7] теорема про лінеаризацію системи рівнянь (1) не має місця і, отже, актуальною є задача про побудову неперервних розв'язків системи рівнянь (1) і дослідження їх властивостей.

Система рівнянь (6) матиме вигляд (4), якщо функції $f_i^{(1)}(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_n^{(1)})$, $i = 1, 2, \dots, n$, визначити таким чином:

$$\begin{aligned} f_i^{(1)}(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_n^{(1)}) &= f_i(t, x_1^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}, x_n^{(1)} + \gamma^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})), \\ i &= 1, \dots, n-1, \\ f_n^{(1)}(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_n^{(1)}) &= \lambda_n \gamma^1(t, x_1^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}) - \\ &- \gamma^1(t+1, x_1^{(1)}(t+1), \dots, x_{n-1}^{(1)}(t+1)) + f_n(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}, x_n^{(1)} + \\ &+ \gamma^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})). \end{aligned} \quad (7)$$

Безпосередньо із (7) випливає, що для доведення теореми достатньо довести існування розв'язку $\gamma^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})$ функціонального рівняння

$$\begin{aligned} &\gamma^1(t+1, \lambda_1 x_1^{(1)} + f_1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}, \gamma^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})), \dots, \\ &\lambda_{n-1} x_{n-1}^{(1)} + f_{n-1}(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}, \gamma^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})) = \\ &= \lambda_n \gamma^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}) + f_n(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}, \gamma^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})). \end{aligned} \quad (8)$$

Розв'язок рівняння (8) побудуємо за допомогою методу послідовних наближень, які визначимо таким чином:

$$\begin{aligned} \gamma_0^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}) &= 0, \\ \gamma_m^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}) &= \\ &= \lambda_n^{-1} \gamma_{m-1}^1(t+1, \lambda_1 x_1^{(1)} + f_1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}, \gamma_{m-1}^1(t, x_1^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})), \\ &\dots, \lambda_{n-1} x_{n-1}^{(1)} + f_{n-1}(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}, \gamma_{m-1}^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})) - \\ &- \lambda_n^{-1} \cdot f_n(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}, \gamma_{m-1}^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})), \quad m \geq 1. \end{aligned} \quad (9)$$

Використовуючи умови теореми та співвідношення (9), можна показати, що при достатньо малому b^* функції $\gamma_m^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})$, $m = 0, 1, \dots$, є неперервними при $t \in \mathbb{R}^+$, $|x_i^{(1)}| \leq b^* < b$, $i = 1, \dots, n-1$, і задовольняють умови

$$|\gamma_m^1(t, \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{n-1}) - \gamma_m^1(t, \tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_{n-1})| \leq K \left(\sum_{s=1}^{n-1} |\hat{x}_s| + \sum_{s=1}^{n-1} |\tilde{x}_s| \right)^\alpha \left(\sum_{i=1}^{n-1} |\hat{x}_i - \tilde{x}_i| \right), \quad (10)$$

$$|\gamma_m^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)}) - \gamma_{m-1}^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})| \leq M \cdot \Delta^{m-1} \left(\sum_{k=1}^{n-1} |x_k^{(1)}| \right)^{1+\alpha}, \quad (11)$$

де $(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})$, $(t, \hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_{n-1})$, $(t, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_{n-1}) \in D^*$, K, M — деякі додатні сталі, $0 < \Delta < 1$.

Безпосередньо з (11) випливає, що при $t \geq 0$, $|x_i^{(1)}| \leq b_*$ послідовність неперервних функцій $\gamma_m^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})$, $m \geq 0$, рівномірно збігається до деякої неперервної функції $\gamma^1(t, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n-1}^{(1)})$. Переходячи в (9), (10) до границі при $m \rightarrow \infty$, легко показати,

Теорема 2. Нехай виконуються умови 1, 2 та (18). Тоді в деякій області $D^* \subset D$ існує заміна змінних

$$x^{(k)}(t) = k(t, y(t)) = y(t) + \chi(t, y(t)), \quad (19)$$

де вектор-функція $\chi(t, y(t))$ є неперервною при $t \in \mathbb{R}$, $|y| \leq b^* < b$, $\chi(t, 0) = 0$, і такою, що для довільних (t, y') та (t, y'') з області D^* виконується співвідношення

$$|\chi(t, y') - \chi(t, y'')| \leq K(|y'| + |y''|)^\alpha |y' - y''|, \quad (20)$$

де $K = \text{const}$, яка приводить систему рівнянь (17) до вигляду

$$y(t+1) = \Lambda_k y(t). \quad (21)$$

Доведення теореми аналогічне доведенню теореми 1 із [7].

Оскільки загальний неперервний розв'язок системи рівнянь (21) має вигляд

$$y_i(t) = |\lambda_i|^t \omega_i(t), \quad i = 1, \dots, n-k, \quad (22)$$

де $\omega_i(t)$, $i = 1, \dots, n-k$, — довільні функції, що задовольняють умови

$$\omega_i(t+1) = \omega_i(t) \text{sign } \lambda_i, \quad i = 1, \dots, n-k, \quad (23)$$

то з урахуванням (15), (16), (19) та (22) можна побудувати сім'ю неперервних розв'язків системи (1), що залежить від $n-k$ довільних функцій, які задовольняють умови (23). Більше того, кожен розв'язок $x_i(t)$, $i = 1, \dots, n$, із цієї сім'ї визначається формулами

$$\begin{aligned} x_i(t) &= x_i^{(1)}(t), \quad i = 1, \dots, n-1, \\ x_n(t) &= \gamma_1(x_1^{(1)}(t), \dots, x_{n-1}^{(1)}(t)), \\ &\dots\dots\dots \\ x_i^{(k-1)}(t) &= x_i^{(k)}(t), \quad i = 1, 2, \dots, n-k, \\ x_{n-k+1}^{(k-1)}(t) &= \gamma_k(x_1^{(k)}(t), \dots, x_{n-k}^{(k)}(t)), \\ x^{(k)}(t) &= y(t) + \chi(t, y(t)), \end{aligned}$$

де $x^{(k)}(t) = (x_1^{(k)}(t), \dots, x_{n-k}^{(k)}(t))$, $y(t) = (y_1(t), \dots, y_{n-k}(t))$ і $y_i(t)$, $i = 1, \dots, n-k$, визначаються співвідношеннями (22).

1. Арнольд В. И. Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. — Москва: Наука, 1978. — 304 с.
2. Пуанкаре А. О кривых, определяемых дифференциальными уравнениями. — Москва; Ленинград: Гостехиздат, 1947. — 392 с.
3. Токапо В. К. Solutions containing arbitrary periodic functions of systems of nonlinear difference equations // Функц. еквациој. — 1973. — **16**, № 2. — Р. 137–164.
4. Хартман Ф. Обыкновенные дифференциальные уравнения. — Москва: Мир, 1970. — 720 с.
5. Пелюх Г. П. Общее решение систем нелинейных разностных уравнений с непрерывным аргументом // Укр. мат. журн. — 2000. — **52**, № 7. — С. 936–953.

6. *Пелюх Г. П.* О линеаризации систем нелинейных функционально-разностных уравнений в окрестности положения равновесия // Доп. НАН України. – 2009. – № 9. – С. 36–41.
7. *Пелюх Г. П.* Исследование структуры множества непрерывных решений систем нелинейных разностных уравнений с непрерывным аргументом // Укр. мат. журн. – 2007. – **59**, № 1. – С. 99–108.

Институт математики НАН України, Київ

Надійшло до редакції 23.05.2012

А. А. Акбергенов, Г. П. Пелюх

Построение непрерывных решений одного класса систем нелинейных разностных уравнений

Установлены условия существования непрерывных решений одного класса нелинейных разностных уравнений и разработан метод их построения.

A. A. Akbergenov, G. P. Pelyukh

Constructing the continuous solutions for one class of systems of nonlinear difference equations

We have obtained conditions for the existence of continuous solutions for one class of systems of nonlinear difference equations with continuous argument and developed a method of their construction.

A Liouville comparison principle for solutions of quasilinear singular parabolic second-order partial differential inequalities

(Presented by Corresponding Member of the NAS of Ukraine V. Ya. Gutlyanskyi)

The purpose of this work is to obtain a Liouville comparison principle for entire weak solutions (u, v) of quasilinear singular parabolic second-order partial differential inequalities of the form $u_t - A(u) - |u|^{q-1}u \geq v_t - A(v) - |v|^{q-1}v$ in the half-space $\mathbb{S} = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^n$, where $n \geq 1$, $q > 0$ and the differential operator A satisfies the α -monotonicity condition. Model examples of the operator A are the well-known p -Laplacian operator, defined by the relation $\Delta_p(w) := \operatorname{div}_x(|\nabla_x w|^{p-2} \nabla_x w)$, and its well-known modification, defined by $\tilde{\Delta}_p(w) :=$

$$= \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left| \frac{\partial w}{\partial x_i} \right|^{p-2} \frac{\partial w}{\partial x_i} \right).$$

1. Introduction and definition. The purpose of this work is to obtain a Liouville comparison principle of elliptic type for entire weak solutions (u, v) of quasilinear singular parabolic second-order partial differential inequalities of the form

$$u_t - A(u) - |u|^{q-1}u \geq v_t - A(v) - |v|^{q-1}v \quad (1)$$

in the half-space $\mathbb{S} = (0, +\infty) \times \mathbb{R}^n$, where $n \geq 1$ is a natural number and $q > 0$ is a real number. Typical examples of the differential operator A and the main subjects in our study are the p -Laplacian operator defined by

$$\Delta_p(w) := \operatorname{div}_x(|\nabla_x w|^{p-2} \nabla_x w) \quad (2)$$

and its well-known modification, see, e. g., [1, p. 155], defined by

$$\tilde{\Delta}_p(w) := \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left| \frac{\partial w}{\partial x_i} \right|^{p-2} \frac{\partial w}{\partial x_i} \right). \quad (3)$$

Note that the Laplacian operator is a special case of (2) or (3) with $p = 2$. Also, it is important to note that if $u = u(t, x)$ and $v = v(t, x)$ satisfy the inequalities

$$u_t \geq A(u) + |u|^{q-1}u, \quad (4)$$

$$v_t \leq A(v) + |v|^{q-1}v, \quad (5)$$

then the pair (u, v) satisfies inequality (1). Thus, all the results obtained in this work for solutions of (1) are valid for the corresponding solutions of system (4)–(5).

As the entire solutions of inequalities (1), (4), and (5), we understand the solutions of these inequalities defined in the whole half-space \mathbb{S} . Moreover, as the Liouville results of elliptic type

for the solutions of inequalities (1), (4), and (5) in the half-space \mathbb{S} , we understand Liouville-type results which, in their formulations, have no restrictions on the behavior of solutions of these inequalities on the hyper-plane $t = 0$. We would like to underline that we impose neither growth conditions on the behavior of solutions of inequalities (1), (4), and (5) or on that of any of their partial derivatives at infinity.

Let A be a differential operator defined by the formula

$$A(w) := \sum_{i=1}^n \frac{d}{dx_i} A_i(t, x, \nabla_x w), \quad (6)$$

where $n \geq 1$ and $(t, x) \in \mathbb{S}$. Assume that the functions $A_i(t, x, \xi)$, $i = 1, \dots, n$, satisfy the Carathéodory conditions in $\mathbb{S} \times \mathbb{R}^n$; namely, they are continuous in ξ at almost all $(t, x) \in \mathbb{S}$ and measurable in t, x at all $\xi \in \mathbb{R}^n$.

Definition 1. Let $n \geq 1$ and $\alpha > 1$. The operator A given by (6) is said to be α -monotone if $A_i(t, x, 0) = 0$, $i = 1, \dots, n$, at almost all $(t, x) \in \mathbb{S}$ and the inequalities

$$0 \leq \sum_{i=1}^n (\xi_i^1 - \xi_i^2)(A_i(t, x, \xi^1) - A_i(t, x, \xi^2)), \quad (7)$$

$$\left(\sum_{i=1}^n (A_i(t, x, \xi^1) - A_i(t, x, \xi^2))^2 \right)^{\alpha/2} \leq \mathcal{K} \left(\sum_{i=1}^n (\xi_i^1 - \xi_i^2)(A_i(t, x, \xi^1) - A_i(t, x, \xi^2)) \right)^{\alpha-1}, \quad (8)$$

where \mathcal{K} is some positive constant, hold for all $\xi^1, \xi^2 \in \mathbb{R}^n$ and almost all $(t, x) \in \mathbb{S}$.

Note that condition (7) is the well-known monotonicity condition in PDE theory, while condition (8) is the proper α -monotonicity condition for evolution differential operators considered first in [2], see also [3]. Note also that the α -monotonicity condition (8) in the case where $\xi^2 = 0$ is, in turn, a special case of the very general growth condition for quasilinear differential operators considered first in [4].

We now present the algebraic inequalities, from which it follows immediately that the p -Laplacian operator Δ_p and its modification $\tilde{\Delta}_p$ satisfy the α -monotonicity condition for $\alpha = p$ and $1 < p \leq 2$.

Lemma 1. Let $n \geq 1$ and $1 < \alpha \leq 2$, and let $a = (a_1, \dots, a_n)$ and $b = (b_1, \dots, b_n)$ be arbitrary vectors in \mathbb{R}^n of length $|a| = \sqrt{a_1^2 + \dots + a_n^2}$ and $|b| = \sqrt{b_1^2 + \dots + b_n^2}$. Then there exists a positive constant \mathcal{K} such that the inequalities

$$\left(\sum_{i=1}^n (a_i |a|^{\alpha-2} - b_i |b|^{\alpha-2})^2 \right)^{\alpha/2} \leq \mathcal{K} \left(\sum_{i=1}^n (a_i - b_i)(a_i |a|^{\alpha-2} - b_i |b|^{\alpha-2}) \right)^{\alpha-1} \quad (9)$$

and

$$\left(\sum_{i=1}^n (a_i |a|^{\alpha-2} - b_i |b|^{\alpha-2})^2 \right)^{\alpha/2} \leq \mathcal{K} \left(\sum_{i=1}^n (a_i - b_i)(a_i |a|^{\alpha-2} - b_i |b|^{\alpha-2}) \right)^{\alpha-1} \quad (10)$$

hold.

Remark 1. The statements of Lemma 1 were proved in [2], see also [5].

It is important to note that there exist α -monotone differential operators with arbitrary degeneracy. For example, the weighted p -Laplacian operator defined by

$$\Delta_p^*(w) := \operatorname{div}_x(d(t, x)|\nabla_x w|^{p-2}\nabla_x w), \quad (11)$$

see, e. g., [6, p. 55], where $d(t, x)$ is an arbitrary function measurable, non-negative, and uniformly bounded in \mathbb{S} , is α -monotone with $\alpha = p$ for any fixed $1 < p \leq 2$.

Below, we consider inequality (1) with the differential operator A , which is α -monotone.

Definition 2. Let $n \geq 1$, $q > 0$ and $\alpha > 1$, and let the operator A be α -monotone. A pair (u, v) of functions $u = u(t, x)$ and $v = v(t, x)$ is called an entire weak solution of inequality (1) in \mathbb{S} , if these functions are defined and measurable in \mathbb{S} , belong to the function space $L_{q,\text{loc}}(\mathbb{S})$, with $u_t, v_t \in L_{1,\text{loc}}(\mathbb{S})$ and $|\nabla_x u|^\alpha, |\nabla_x v|^\alpha \in L_{1,\text{loc}}(\mathbb{S})$, and satisfy the integral inequality

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{S}} \left[u_t \varphi + \sum_{i=1}^n \varphi_{x_i} A_i(t, x, \nabla_x u) - \varphi |u|^{q-1} u \right] dt dx &\geq \\ &\geq \int_{\mathbb{S}} \left[v_t \varphi + \sum_{i=1}^n \varphi_{x_i} A_i(t, x, \nabla_x v) - \varphi |v|^{q-1} v \right] dt dx \end{aligned} \quad (12)$$

for every non-negative function $\varphi \in C^\infty(\mathbb{S})$ with compact support in \mathbb{S} , where $C^\infty(\mathbb{S})$ is the space of all functions defined and infinitely differentiable in \mathbb{S} .

Analogous definitions of solutions of inequalities (4) and (5), as special cases of inequality (1) for $v \equiv 0$ or $u \equiv 0$, follow immediately from Definition 2.

2. Results.

Theorem 1. Let $n \geq 1$, $2 \geq \alpha > 1$ and $1 < q \leq \alpha - 1 + \alpha/n$, let the operator A be α -monotone, and let (u, v) be an entire weak solution of inequality (1) in \mathbb{S} such that $u \geq v$. Then $u = v$ in \mathbb{S} .

As we have observed above, since any solutions $u = u(t, x)$, $v = v(t, x)$ of inequalities (4), (5) are a solution (u, v) of inequality (1), then the following statement is a direct corollary of Theorem 1.

Theorem 2. Let $n \geq 1$, $2 \geq \alpha > 1$ and $1 < q \leq \alpha - 1 + \alpha/n$, let the operator A be α -monotone, and let $u = u(t, x)$ be an entire weak solution of inequality (4) and $v = v(t, x)$ be an entire weak solution of inequality (5) in \mathbb{S} such that $u \geq v$. Then $u = v$ in \mathbb{S} .

We call the results in Theorems 1 and 2, which evidently have a comparison principle character, a Liouville-type comparison principle, since, in particular cases where either $u \equiv 0$ or $v \equiv 0$, it becomes a Liouville-type theorem of elliptic type for the solutions of inequality (5) or (4), respectively. In addition, since we impose no conditions in Theorems 1 and 2 on the behavior of the entire solutions of inequality (1) and system (4), (5) on the hyper-plane $t = 0$, we can formulate, as direct corollaries of the results in Theorems 1 and 2, the following comparison principle, which can be called, in turn, a Fujita comparison principle, for the weak solutions of the Cauchy problem for inequality (1) and system (4), (5).

Theorem 3. Let $n \geq 1$, $2 \geq \alpha > 1$ and $1 < q \leq \alpha - 1 + \alpha/n$, let the operator A be α -monotone, and let (u, v) be an entire weak solution of the Cauchy problem, with arbitrary initial data for $u = u(t, x)$ and $v = v(t, x)$, for inequality (1) in \mathbb{S} such that $u \geq v$. Then $u = v$ in \mathbb{S} .

Remark 2. The initial data for $u = u(t, x)$ and $v = v(t, x)$ in Theorem 3 may be different.

Theorem 4. Let $n \geq 1$, $2 \geq \alpha > 1$ and $1 < q \leq \alpha - 1 + \alpha/n$, let the operator A be α -monotone, and let $u = u(t, x)$ be a weak solution of the Cauchy problem, with arbitrary initial

data, for inequality (4) and $v = v(t, x)$ be a weak solution of the Cauchy problem, with arbitrary initial data, for inequality (5) in \mathbb{S} such that $u \geq v$. Then $u = v$ in \mathbb{S} .

Note that the results in Theorems 1–4 are sharp, and that the hypotheses on the parameter α in these theorems in fact force α to be greater than $2n/(n+1)$. The sharpness of the results for $n \geq 1$, $2 \geq \alpha > 1$ and $q > \alpha - 1 + \alpha/n \geq 1$ follows, for example, from the existence of non-trivial non-negative self-similar entire solutions of the equation

$$w_t - \Delta_p(w) = |w|^{q-1}w \quad (13)$$

for $p = \alpha$ in \mathbb{S} , see, e. g., [7]. One can find a Fujita-type theorem on the non-existence of non-trivial non-negative entire solutions of the Cauchy problem for Eq. (13), which was obtained as a very interesting generalization of the famous blow-up result in [8] to quasilinear parabolic equations. The sharpness of the results for $n \geq 1$, $2 \geq \alpha > 1$, and $0 < q \leq 1$ follows, for example, from the fact that the function $u(t, x) = e^t$ is a positive entire classical super-solution of (13) in \mathbb{S} .

In addition to Theorem 1, we obtain an *a priori* estimate for solutions of (1). So, in what follows, for $q > 1$ and $2 \geq \alpha > 1$, let

$$\omega = \frac{\alpha(q-1)}{q-\alpha+1} \quad (14)$$

and

$$P(R) = \{(t, x) \in \mathbb{S} : t^{2/\omega} + |x|^2 < R^{2/\omega}\}$$

for all $R > 0$. It is clear that $0 < \omega \leq 2$.

Theorem 5. *Let $n \geq 1$, $2 \geq \alpha > 1$, $q > \max\{1, \alpha - 1 + \alpha/n\}$, and $\alpha - 1 > \nu > 0$, and let the operator A be α -monotone. Then there exists a constant C such that the inequality*

$$\int_{P(R)} (u-v)^{q-\nu} dt dx \leq CR^{\frac{n+\omega}{\omega} - \frac{q-\nu}{q-1}} \quad (15)$$

holds for every entire weak solution (u, v) of (1) in \mathbb{S} such that $u \geq v$, for all $R > 0$.

The following statement is a simple corollary of Theorem 5.

Corollary 1. *Let $n \geq 1$, $2 \geq \alpha > 1$, and $q > \max\{1, \alpha - 1 + \alpha/n\}$, and let the operator A be α -monotone. Then there exists no entire weak solution (u, v) of (1) in \mathbb{S} such that $u - v$ is bounded below by a positive constant.*

As we have noted above, since any solutions $u = u(t, x)$, $v = v(t, x)$ of inequalities (4), (5) are a solution (u, v) of inequality (1), similar results for solutions $u = u(t, x)$, $v = v(t, x)$ of inequalities (4), (5) follow directly from Theorem 5 and Corollary 1. We note that all the results obtained are new. To prove them, we essentially use the concept of α -monotonicity for differential operators and continue to develop an approach in [9], [10], the elliptic analog of which was proposed in [2].

1. Lions J.-L. Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires. – Paris: Dunod, Gauthier-Villars, 1969. – 554 p.
2. Kurta V. V. Some problems of qualitative theory of nonlinear second-order equations // Doctoral Dissert., Steklov Math. Inst. – Moscow, 1994. – 323 p.
3. Kurta V. V. Comparison principle for solutions of parabolic inequalities // C. r. Acad. Sci. Paris. Sér. I. – 1996. – 322. – P. 1175–1180.

4. Miklyukov V. M. Capacity and a generalized maximum principle for quasilinear equations of elliptic type // Dokl. AN SSSR. – 1980. – **250**. – P. 1318–1320.
5. Kurta V. V. Comparison principle and analogues of the Phragmén–Lindelöf theorem for solutions of parabolic inequalities // Appl. Anal. – 1999. – **71**. – P. 301–324.
6. Heinonen J., Kilpeläinen T., Martio O. Nonlinear potential theory of degenerate elliptic equations. – New York: Clarendon Press; Oxford Univ. Press, 1993. – 363 p.
7. Galaktionov V. A., Levine H. A. A general approach to critical Fujita exponents in nonlinear parabolic problems // Nonlinear Anal. – 1998. – **34**, No 7. – P. 1005–1027.
8. Fujita H. On the blowing up of solutions of the Cauchy problem for $u_t = \Delta u + u^{1+p}$ // J. Fac. Sci. Univ. Tokyo. Sect. I. – 1966. – **13**. – P. 109–124.
9. Kartsatos A. G., Kurta V. V. On a comparison principle and the critical Fujita exponents for solutions of semilinear parabolic inequalities // J. London Math. Soc. Ser 2. – 2002. – **66**, No 2. – P. 351–360.
10. Kartsatos A. G., Kurta V. V. On the critical Fujita exponents for solutions of quasilinear parabolic inequalities // J. Math. Anal. Appl. – 2002. – **269**. – P. 73–86.

Mathematical Reviews, Ann Arbor, USA

Received 29.03.2012

В. В. Курта

Принцип порівнювання Ліувілля для розв’язків квазілінійних, сингулярних, параболічних нерівностей другого порядку в частинних похідних

Встановлюється принцип порівнювання Ліувілля для цілих, слабких розв’язків (u, v) квазілінійних, сингулярних, параболічних нерівностей другого порядку в частинних похідних виду $u_t - A(u) - |u|^{q-1}u \geq v_t - A(v) - |v|^{q-1}v$ в напівпросторі $\mathbb{S} = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^n$, де $n \geq 1$, $q > 0$ і диференціальний оператор A задовольняє умову α -монотонності. Модельними прикладами оператора A є добре відомий p -лапласіан, визначений співвідношенням $\Delta_p(w) := \operatorname{div}_x(|\nabla_x w|^{p-2} \nabla_x w)$, та його добре відома модифікація, визначена співвідношенням

$$\tilde{\Delta}_p(w) := \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left| \frac{\partial w}{\partial x_i} \right|^{p-2} \frac{\partial w}{\partial x_i} \right).$$

В. В. Курта

Принцип сравнения Лиувилля для решений квазилинейных, сингулярных, параболических неравенств второго порядка в частных производных

Устанавливается принцип сравнения Лиувилля для целых, слабых решений (u, v) квазилинейных, сингулярных, параболических неравенств второго порядка в частных производных вида $u_t - A(u) - |u|^{q-1}u \geq v_t - A(v) - |v|^{q-1}v$ в полупространстве $\mathbb{S} = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^n$, где $n \geq 1$, $q > 0$ и дифференциальный оператор A удовлетворяет условию α -монотонности. Модельными примерами оператора A являются хорошо известный p -лапласиан, определенный соотношением $\Delta_p(w) := \operatorname{div}_x(|\nabla_x w|^{p-2} \nabla_x w)$, и его хорошо известная модификация, определенная

$$\tilde{\Delta}_p(w) := \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left| \frac{\partial w}{\partial x_i} \right|^{p-2} \frac{\partial w}{\partial x_i} \right).$$

Самоподібність і вінцеві добутки метричних просторів

(Представлено академіком НАН України М. О. Перестюком)

Розглянуто конструкцію нескінченно ітерованого вінцевого добутку метричних просторів. Встановлено умови, за яких нескінченно ітерований вінцевий степінь скінченного метричного простору є самоподібним, а також доведено, що група ізометрій діє на ньому самоподібно. Показано, що для довільної скінченної групи нескінченно ітерований вінцевий степінь цієї групи реалізується як повна група ізометрій самоподібного метричного простору з самоподібною дією.

1. Нехай $s: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ — монотонно зростаюча неперервна функція, $s(0) = 0$, що називається шкалою. Трансформацією метричного простору (X, d_X) за допомогою шкали s називається простір $(X, s(d_X))$, в якому відстань d_X замінюється відстанню $s(d_X)$. В загальному випадку $s(d_X)$ є напівметрикою, тобто для неї може не виконуватись нерівність трикутника. Якщо $s(d_X)$ є метрикою, то трансформація називається метричною. Це матиме місце зокрема тоді, коли похідна шкали s' не зростає (див. [1]).

Поняття метричної трансформації було введено Л. М. Блюменталем у 30-х роках минулого століття (див. [2]). Дослідженню метричних трансформацій просторів присвячено багато праць, зокрема метричні трансформації евклідових просторів у підпростори гільбертового простору вивчались в роботах Д. фон Неймана і І. Шонберга [3, 4].

Відповідно до роботи [5] метричні простори (X, d_X) і (Y, d_Y) називатимемо ізоморфними, якщо існують бієкція $g: X \rightarrow Y$ і шкала s такі, що для довільних $u, v \in X$ виконується рівність

$$d_X(u, v) = s(d_Y(g(u), g(v))),$$

тобто метричний простір X ізометричний трансформації простору (Y, d_Y) за допомогою шкали s . У цьому випадку простір (X, d_X) позначатимемо як $s(Y)$. Якщо простір (X, d_X) ізоморфний деякому підпростору простору (Y, d_Y) , то говоритимемо, що (X, d_X) ізоморфно занурюється в (Y, d_Y) . Ізоморфні метричні простори є топологічно еквівалентними, а їх групи ізометрій ізоморфні.

2. Нехай простір (X, d_X) є рівномірно дискретним, тобто існує таке додатне число r , що для довільних точок x_1 і x_2 простору X , $x_1 \neq x_2$, виконується нерівність $d_X(x_1, x_2) \geq r$. Припустимо, що простір (Y, d_Y) обмежений. Зафіксуємо деяку функцію-шкалу $s(t)$, для якої виконується нерівність

$$\text{diam}(s(Y)) < r. \tag{1}$$

На множині $X \times Y$ розглянемо метрику d_s , яку задамо таким чином:

$$d_s((x_1, y_1), (x_2, y_2)) = \begin{cases} d_X(x_1, x_2), & \text{якщо } x_1 \neq x_2, \\ s(d_Y(y_1, y_2)), & \text{якщо } x_1 = x_2. \end{cases}$$

Метричний простір $(X \times Y, d_s)$ називається *вінцевим добутком* метричних просторів X і Y та позначається $X \text{ wr } Y$ (див. [6]). Зауважимо, що вінцевий добуток $X \text{ wr } Y$ містить ізоморфну копію кожного з просторів X і Y .

Нехай тепер $(X_1, d_1), (X_2, d_2), \dots$ — нескінченна послідовність рівномірно дискретних метричних просторів скінченного діаметра, а r_1, r_2, \dots — нескінченна послідовність додатних дійсних чисел така, що для довільних точок $a, b \in X_i, a \neq b$, справедливі нерівності $d_i(a, b) \geq r_i, i \geq 1$.

Оскільки простори $(X_1, d_1), (X_2, d_2), \dots$ рівномірно дискретні і скінченного діаметра, то існує послідовність шкал $\alpha = (s_2(x), s_3(x), s_4(x), \dots)$, для якої справедливі нерівності

$$\text{diam}(s_2(X_2)) < r_1, \quad \text{diam}(s_i(X_i)) < s_{i-1}(r_{i-1}), \quad i \geq 3. \quad (2)$$

На декартовому добутку множин $\prod_{i=1}^{\infty} X_i$ визначимо метрику ρ_α за правилом

$$\begin{aligned} \rho_\alpha((a_1, a_2, \dots), (b_1, b_2, \dots)) = \\ = \begin{cases} d_1(a_1, b_1), & \text{якщо } a_1 \neq b_1, \\ s_2(d_2(a_2, b_2)), & \text{якщо } a_1 = b_1 \text{ and } a_2 \neq b_2, \\ \dots\dots\dots \\ s_n(d_n(a_n, b_n)), & \text{якщо } a_1 = b_1, \dots, a_{n-1} = b_{n-1}, a_n \neq b_n, \\ \dots\dots\dots \end{cases} \end{aligned} \quad (3)$$

Означення 1. Метричний простір $\left(\prod_{i=1}^{\infty} X_i, \rho_\alpha\right)$ називатимемо нескінченно ітерованим вінцевим добутком метричних просторів $(X_1, d_1), (X_2, d_2), \dots$ з послідовністю шкал α і позначатимемо $\overset{\infty}{\text{wr}}(\alpha)X_i$.

Нескінченно ітерований вінцевий добуток метричних просторів $(X_1, d_1), (X_2, d_2), \dots$ гомеоморфний проєктивній границі скінченно ітерованих вінцевих добутків метричних просторів $X_1, X_1 \underset{s_2}{\text{wr}} X_2, (X_1 \underset{s_2}{\text{wr}} X_2) \underset{s_3}{\text{wr}} X_3, \dots$ (див. [7]) з природними проєкціями.

Конструкція простору $\overset{\infty}{\text{wr}}(\alpha)X_i$ є єдиною з точністю до ізоморфізму. Це впливає з такого твердження.

Твердження 1. *Нехай α_1 і α_2 — дві послідовності шкал такі, що виконуються нерівності (2). Тоді метричні простори $\overset{\infty}{\text{wr}}(\alpha_1)X_i$ і $\overset{\infty}{\text{wr}}(\alpha_2)X_i$ ізоморфні.*

Група ізометрій простору $\overset{\infty}{\text{wr}}(\alpha_1)X_i$ характеризується в термінах нескінченно ітерованих вінцевих добутків груп. Нагадаємо означення цієї конструкції (див. [8]).

Нехай $(G_1, X_1), (G_2, X_2), \dots$ — нескінченна послідовність груп перетворень. Група перетворень $\left(G, \prod_{i=1}^{\infty} X_i\right) = \zeta_{i=1}^{\infty}(G_i, X_i)$ називається нескінченно ітерованим вінцевим добутком груп $(G_1, X_1), (G_2, X_2), \dots$, якщо для кожного перетворення $u \in G$ виконуються такі умови:

1) якщо $(x_1, \dots, x_n, \dots)^u = (y_1, \dots, y_n, \dots)$, то для кожного $i \geq 1$ значення y_i залежить тільки від значень x_1, \dots, x_i ;

2) для фіксованих x_1, \dots, x_{i-1} відображення $g_i(x_1, \dots, x_{i-1})$, що визначається рівністю

$$g_i(x_1, \dots, x_{i-1})(x_i) = y_i, \quad x_i \in X_i,$$

є перетворенням на множині X_i , яке належить G_i .

Як випливає з означення, кожен елемент $u \in G$ можна записати у вигляді таблиці

$$u = [g_1, g_2(x_1), g_3(x_1, x_2), \dots],$$

де $g_1 \in G_1$, $g_i(x_1, \dots, x_{i-1}) \in G_i^{X_1 \times \dots \times X_{i-1}}$, $i \geq 2$. Кожен елемент $u \in G$ діє на $(m_1, m_2, \dots) \in \prod_{i=1}^{\infty} X_i$ за таким правилом:

$$(m_1, m_2, m_3 \dots)^u = (m_1^{g_1}, m_2^{g_2(m_1)}, m_3^{g_3(m_1, m_2)}, \dots).$$

Теорема 1. Група ізометрій нескінченно ітерованого вінцевого добутку метричних просторів (X_1, d_1) , (X_2, d_2) , ... ізоморфна як група перетворень нескінченно ітерованому вінцевому добутку їх груп ізометрій

$$\text{Isom}(\overline{\text{wr}}_{i=1}^{\infty} X_i) \simeq \overline{\text{wr}}_{i=1}^{\infty} \text{Isom } X_i.$$

3. Нагадаємо означення самоподібного метричного простору (див. [9]).

Нехай (X, d) — метричний простір.

Неперервне відображення $f: X \rightarrow X$ називається *стискуючим*, якщо існує додатне дійсне число $r < 1$ таке, що для всіх $x, y \in X$ виконується нерівність

$$d(f(x), f(y)) \leq rd(x, y). \quad (4)$$

Якщо в нерівності (4) досягається рівність, то функція f називається *відображенням подібності*.

Якщо метричний простір (X, d) повний і задані стискуючі відображення $f_i: X \rightarrow X$, $1 \leq i \leq n$, то існує непорожній компактний підпростір K простору X , для якого виконується рівність

$$K = f_1(K) \cup \dots \cup f_n(K). \quad (5)$$

У цьому випадку K називається *самоподібною множиною* відносно стискуючих відображень f_1, \dots, f_n (див. [9]).

Якщо метричний простір (X, d) компактний і існують такі стискуючі відображення f_1, \dots, f_n , що рівність (5) виконується для всього простору X , тобто $X = f_1(X) \cup \dots \cup f_n(X)$, то називатимемо такий метричний простір *самоподібним*.

Теорема 2. Нехай (X, d_X) — скінченний метричний простір і для довільного $i \geq 1$ виконується рівність $X_i = X$. Припустимо, що послідовність шкал $\alpha = (s_2(x), s_3(x), \dots)$ задовольняє умову (2) і існує таке дійсне додатне число $q < 1$, що виконуються нерівності

$$\frac{\text{diam } s_{i+1}(X)}{\min_{x, y \in X, x \neq y} s_i(d_X(x, y))} \leq q, \quad i \geq 1. \quad (6)$$

Тоді нескінченно ітерований вінцевий добуток $\overline{\text{wr}}_{i=1}^{\infty}(\alpha)X_i$ є самоподібним простором.

Доведення. Оскільки простір (X, d_X) є скінченним, то він є компактним, а тому $\overline{\text{wr}}_{i=1}^{\infty}(\alpha)X_i$ компактний як тихонівський добуток компактних просторів.

Припустимо, що $X = \{x_1, \dots, x_n\}$. Для кожного $1 \leq j \leq n$ визначимо відображення $f_i: \prod_{i=1}^{\infty} X_i \rightarrow \prod_{i=1}^{\infty} X_i$ за таким правилом:

$$f_i(u_1, u_2, u_3, \dots) = (x_i, u_1, u_2, u_3, \dots).$$

Покажемо, що для кожного i відображення f_i є стискуючим. Нехай $\bar{u} = (u_1, u_2, \dots)$, $\bar{v} = (v_1, v_2, \dots) \in \prod_{i=1}^{\infty} X_i$. Припустимо, що

$$\rho_{\alpha}(\bar{u}, \bar{v}) = s_l(d(u_l, v_l)). \quad (7)$$

За визначенням метрики ρ_{α} маємо

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha}(f_i(\bar{u}), f_i(\bar{v})) &= \rho_{\alpha}((x_i, u_1, u_2, \dots), (x_i, v_1, v_2, \dots)) = \\ &= \begin{cases} s_2(d(u_1, v_1)), & \text{якщо } u_1 \neq v_1, \\ s_3(d(u_2, v_2)), & \text{якщо } u_1 = v_1 \text{ і } u_2 \neq v_2, \\ \dots\dots\dots \end{cases} \end{aligned} \quad (8)$$

З формул (3) і (7) випливає, що $u_1 = v_1, \dots, u_{l-1} = v_{l-1}, u_l \neq v_l$. А тому з (8) отримуємо

$$\rho_{\alpha}(f_i(\bar{u}), f_i(\bar{v})) = s_{l+1}(d(u_l, v_l)). \quad (9)$$

З нерівностей (6), (7), (9) випливає такий ланцюг нерівностей:

$$\rho_{\alpha}(f_i(\bar{u}), f_i(\bar{v})) \leq \text{diam } s_{l+1}(X) < q \min_{x,y \in X, x \neq y} s_l(d_X(x, y)) \leq q s_l(d(u_l, v_l)) = q \rho_{\alpha}(\bar{u}, \bar{v}).$$

Отже, відображення f_i є стискуючим. Крім того, має місце така рівність:

$$\prod_{i=1}^{\infty} X_i = f_1 \left(\prod_{i=1}^{\infty} X_i \right) \cup \dots \cup f_n \left(\prod_{i=1}^{\infty} X_i \right).$$

Таким чином, простір $\bigcap_{i=1}^{\infty} (\alpha)X_i$ є самоподібним відносно стискуючих відображень f_1, \dots, f_n .

4. Нагадаємо деякі означення (див. [10]). Нехай, як і в п. 3, $X = \{x_1, \dots, x_n\}$. Множину всіх нескінченних послідовностей, елементами яких є елементи множини X , позначимо X^{ω} . Визначимо метрику за таким правилом: для довільних $\gamma_1 = (u_1, u_2, \dots)$, $\gamma_2 = (v_1, v_2, \dots) \in X^{\omega}$

$$\sigma(\gamma_1, \gamma_2) = \begin{cases} \frac{1}{m+1}, & \text{якщо } \gamma_1 \neq \gamma_2, \\ 0, & \text{якщо } \gamma_1 = \gamma_2, \end{cases}$$

де m — довжина найбільшого спільного початку послідовностей γ_1 і γ_2 .

Означення 2 [10, с. 10]. Точна дія групи G на просторі X^{ω} називається самоподібною, якщо для довільних $g \in G$ і $x \in X$ існують $h \in G$ і $y \in X$ такі, що рівність

$$g(xw) = yh(w) \quad (10)$$

виконується для довільної нескінченної послідовності $w \in X^{\omega}$.

Теорема 3. Нехай (X, d_X) – скінченний метричний простір і для довільного $i \geq 1$ виконується рівність $X_i = X$. Тоді для довільної послідовності шкал α , що задовольняє умову (2), група ізометрій нескінченно ітерованого вінцевого степеня $\prod_{i=1}^{\infty} (\alpha)X_i$ має самоподібну дію.

Доведення. Припустимо, що $\alpha = (s_2(x), s_3(x), \dots)$. Метричні простори X^ω і $\prod_{i=1}^{\infty} (\alpha)X_i$ визначені на одній множині. Крім того, з теореми 1 випливає, що кожна ізометрія простору $\prod_{i=1}^{\infty} (\alpha)X_i$ є ізометрією простору X^ω .

Нехай $g \in \text{Isom}(\prod_{i=1}^{\infty} (\alpha)X_i)$. Виберемо деякі $x \in X$ і $w = (w_1, w_2, \dots)$ – нескінченну послідовність, елементами якої є елементи множини X . З теореми 1 випливає, що

$$g = [g_1, g_2(x_1), g_3(x_1, x_2), \dots],$$

де $g_1 \in \text{Isom } X$, $g_i(x_1, \dots, x_{i-1}) \in \text{Isom } X^{X_1 \times \dots \times X_{i-1}}$, $i \geq 2$, і елемент g діє на послідовність $(x, w_1, w_2, \dots) \in \prod_{i=1}^{\infty} X_i$ згідно з рівністю

$$g(x, w_1, w_2, \dots) = (x^{g_1}, w_1^{g_2(x)}, w_2^{g_3(x, w_1)}, \dots).$$

Позначимо $g_1(x) = y$, $h_1 = w_1^{g_2(x)}$, $h_2 = w_2^{g_3(x, w_1)}$, \dots . Оскільки елемент x є фіксованим, то y є деяким елементом множини X , а h_1 – деяким елементом групи g_1 . Аналогічно, можемо вважати, що $h_i = w_i^{g_{i+1}(x, w_1, \dots, w_{i-1})} = h_i(w_1, \dots, w_{i-1}) \in \text{Isom } X^{X_1 \times \dots \times X_{i-1}}$. Отже, елемент h можна записати у вигляді таблиці $h = [h_1, h_2(x_1), h_3(x_1, x_2), \dots]$. Він є елементом групи $\prod_{i=1}^{\infty} \text{Isom } X$, тобто, за теоремою 1, елементом групи $\text{Isom}(\prod_{i=1}^{\infty} (\alpha)X_i)$. Крім того, за визначенням елементів y і h виконується рівність

$$g(xw) = yh(w).$$

Таким чином, група $\text{Isom}(\prod_{i=1}^{\infty} (\alpha)X_i)$ має самоподібну дію.

Довільна абстрактна група ізоморфна групі ізометрій деякого повного, зв'язного, локально зв'язного метричного простору (див. [11]). Відповідно, довільна скінченна група ізоморфна як абстрактна група групі ізометрій деякого скінченного метричного простору. А тому з теорем 1–3 випливає таке твердження.

Наслідок 1. Нехай G – деяка скінченна група. Тоді існує самоподібний метричний простір X такий, що має місце ізоморфізм $\prod_{i=1}^{\infty} G \simeq \text{Isom}(X)$, причому група ізометрій $\text{Isom}(X)$ має на X самоподібну дію.

1. Deza M. M., Deza E. Encyclopedia of distances. – Berlin: Springer, 2009. – 590 p.
2. Blumenthal L. M. Remarks concerning the Euclidean four-point property // *Ergeb. eines Math. Kolloquiums.* – 1936. – No 7. – P. 8–10.
3. von Neumann J., Schoenberg I. J. Fourier integrals and metric geometry // *Trans. Amer. Math. Soc.* – 1941. – **50**. – P. 226–251.
4. Schoenberg I. J. Metric spaces and completely monotone functions // *Ann. Math.* – 1938. – **39**, No 4. – P. 811–841.
5. Maehara H. Metric transforms of finite spaces and connected graphs // *Discrete Math.* – 1986. – **61**. – P. 235–246.
6. Oliynyk B. Isometry groups of wreath products of metric spaces // *Algebra and Discrete Math.* – 2007. – No 4. – P. 123–130.

7. *Oliyuk B.* Semigroup of contractions of wreath products of metric spaces // *Discuss. Math. Gen. Algebra and Appl.* – 2010. – **30**. – P. 35–43.
8. *Kaloujnine L. A., Beleckij P. M., Feinberg V. T.* *Kranzprodukte.* – Leipzig: Teubner, 1987. – 168 p.
9. *Kigami J.* *Analysis on fractals.* – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2001. – 226 p.
10. *Nekrashevych V.* Self-similar groups // *Mathematical Surveys and Monographs.* Vol. 117. – Providence, RI: Amer. Math Soc., 2005. – 231 p.
11. *de Groot J.* Groups represented by homeomorphism groups. I // *Math. Ann.* – 1959. – **138**. – P. 80–102.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 22.02.2012

Б. В. Олійник

Самоподобность и сплетения метрических пространств

Рассмотрена конструкция бесконечно итерированного сплетения метрических пространств. Получены условия, при которых бесконечно итерированное сплетение конечного метрического пространства на себя есть самоподобное пространство, а также доказано, что группа изометрий действует на нем самоподобно. Показано, что для любой конечной группы бесконечно итерированное сплетение этой группы на себя реализуется как полная группа изометрий самоподобного метрического пространства с самоподобным действием.

B. V. Oliyuk

Self-similarity and wreath products of metric spaces

Infinitely iterated wreath products of metric spaces are considered. For a finite metric space, sufficient conditions under which its infinitely full wreath power is self-similar are presented. It is shown that the isometry group of such a space acts on it self-similarly. For an arbitrary finite group, it is found a self-similar metric space such that its full isometry group is the infinitely iterated wreath power of this group acting on the space self-similarly.

К. С. Халіна

Про керованість крайовими умовами Діріхле для неоднорідної струни на півосі

(Представлено академіком НАН України Є. Я. Хрусловим)

Розглянуто рівняння коливання неоднорідної струни на півосі з потенціалом, що не дорівнює сталій, та з керуванням класу L^∞ на лівому кінці. Задачу керованості розглянуто в просторах Соболева. Одержано достатні умови 0- та ε -керованості за вільний час $T > 0$. Керування знайдено в явному вигляді.

Розглянемо керовану систему на півосі з початковими умовами

$$w_{tt}(x, t) = w_{xx}(x, t) - q(x)w(x, t), \quad x \in (0, +\infty), \quad t \in (0, T), \quad (1)$$

$$w(0, t) = u(t), \quad t \in (0, T), \quad (2)$$

$$w(x, 0) = W_0^0(x), \quad w_t(x, 0) = W_1^0(x), \quad x \in (0, +\infty), \quad (3)$$

де $T > 0$, u — керування таке, що $u \in L^\infty(0, T)$, а потенціал q задовольняє умови

$$q \in C[0, \infty) \cap L^\infty[0, \infty), \quad \int_0^\infty x|q(x)| dx < \infty. \quad (4)$$

У роботі вивчаються питання 0- та ε -керованості для системи (1)–(3) за вільний час T . Крайову керованість у скінченних областях для випадку $q \neq 0$, взагалі кажучи, добре вивчено в [1–6]. На півосі одержано результати для випадку $q = 0$ за вільний час [7, 8] та для випадку $q = \text{const} \geq 0$ за фіксований та вільний час [9, 10]. Зауважимо, що випадок $q \neq \text{const}$ потребує інших методів дослідження, ніж у [7–10]. Одержані результати сформульовані у теоремах 5 та 6.

У роботі будемо розглядати такі простори [11; 12, гл. 1]:

$$\mathcal{S} = \{\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}) : \forall m, l \in \mathbb{N} \cup \{0\} \exists C_{ml} > 0 : \forall x \in \mathbb{R} \mid \varphi^{(m)}(x)(1 + |x|^2)^l \leq C_{ml}\},$$

\mathcal{S}' — простір узагальнених функцій над \mathcal{S} ,

$$H_l^s = \{f \in \mathcal{S}' : (1 + x^2)^{l/2}(1 + |D|^2)^{s/2}f \in L^2(\mathbb{R})\}, \quad D = -\frac{id}{dx}, \quad s, l \in \mathbb{R},$$

$$H_{l,o}^s = \{f \in H_l^s : f \text{ — непарна}\}, \quad \mathbb{H}_{l,o}^s = H_{l,o}^s \times H_{l,o}^{s-1},$$

$$\|f\|_l^s = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |(1 + x^2)^{l/2}(1 + |D|^2)^{s/2}f(x)|^2 dx \right)^{1/2}.$$

1. Постановка задачі. Нехай $W^0 = \begin{pmatrix} W_0^0 \\ W_1^0 \end{pmatrix} \in \mathbb{H}_{0,o}^0$. Розв'язки системи (1)–(3) розглядаються в просторі H_0^0 . Позначимо Q — парне продовження q , а $W(\cdot, t)$ — непарне продовжен-

ня $w(\cdot, t)$, $t \in (0, T)$. Очевидно, що $W(\cdot, t) \in H_{0,o}^0$, ($t \in (0, T)$). Легко побачити, що непарне продовження розв'язку системи (1)–(3) буде розв'язком системи

$$W_{tt}(x, t) = W_{xx}(x, t) - Q(x)W(x, t) - 2u(t)\delta'(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \in (0, T), \quad (5)$$

$$W(x, 0) = W_0^0(x), \quad W_t(x, 0) = W_1^0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (6)$$

де δ — дельта-функція Дірака, $\delta = H'$, H — функція Хевісайда.

Для заданих $T > 0$ та $W^0 \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ через $\mathcal{R}_T(W^0)$ позначимо множину $h \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ таких, що існує $u \in L^\infty(0, T)$ таке, що розв'язок системи (5), (6) задовольняє умову $\begin{pmatrix} W(\cdot, T) \\ W_t(\cdot, T) \end{pmatrix} = h$.

Означення 1. Стан $W^0 \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ називається 0-керованим відносно системи (5), (6), якщо 0 належить $\bigcup_{T>0} \mathcal{R}_T(W^0)$, та ε -керованим відносно системи (5), (6), якщо 0 належить замиканню $\bigcup_{T>0} \mathcal{R}_T(W^0)$ у $\mathbb{H}_{0,o}^0$.

Для подальшого дослідження використовуються оператори перетворення, які зберігають на нескінченності асимптотику розв'язку рівняння Штурма–Ліувілля [13, гл. 3]. У наступному пункті розглядається їх продовження у простори $H_{0,o}^s$, $s = 0, -1, -2$.

2. Оператори перетворення. Визначимо оператори $\mathcal{M}, \mathcal{M}^{-1}: H_{0,o}^0 \rightarrow H_{0,o}^0$, $D(\mathcal{M}) = D(\mathcal{M}^{-1}) = H_{0,o}^0$, за формулами

$$\mathcal{M}f(x) = f(x) + \operatorname{sign} x \int_{|x|}^{\infty} \mathbf{M}(|x|, t) f(t) dt, \quad (7)$$

$$\mathcal{M}^{-1}g(x) = g(x) + \operatorname{sign} x \int_{|x|}^{\infty} \mathbf{N}(|x|, t) g(t) dt,$$

де $f, g \in H_{0,o}^0$, $\mathbf{M}(\xi, \eta)$ та $\mathbf{N}(\xi, \eta)$ — ядра операторів, $(\xi, \eta) \in [0, \infty) \times [0, \infty)$, такі, що $\mathbf{M}(\xi, \eta) = \mathbf{N}(\xi, \eta) = 0$, коли $\eta < \xi$, і задовольняють системи [13, гл. 3]

$$\mathbf{M}_{xx}(x, t) - \mathbf{M}_{tt}(x, t) = q(x)\mathbf{M}(x, t), \quad \mathbf{N}_{xx}(x, t) - \mathbf{N}_{tt}(x, t) = -q(t)\mathbf{N}(x, t), \quad 0 < x < t, \quad (8)$$

$$\mathbf{M}(x, x) = \frac{1}{2} \int_x^{\infty} q(\xi) d\xi, \quad \mathbf{N}(x, x) = -\frac{1}{2} \int_x^{\infty} q(\xi) d\xi, \quad x \geq 0, \quad (9)$$

$$\lim_{x+t \rightarrow \infty} \mathbf{M}_x(x, t) = \lim_{x+t \rightarrow \infty} \mathbf{M}_t(x, t) = 0, \quad \lim_{x+t \rightarrow \infty} \mathbf{N}_x(x, t) = \lim_{x+t \rightarrow \infty} \mathbf{N}_t(x, t) = 0. \quad (10)$$

Позначимо $\sigma(x) = \int_x^{\infty} |q(\xi)| d\xi$, $\sigma_1(x) = \int_x^{\infty} \sigma(\xi) d\xi$, $x \in [0, \infty)$. Завдяки умовам (4) можна довести, що $\sigma \leq \sigma(0) < \infty$, $\sigma_1 \leq \sigma_1(0) < \infty$ на $[0, \infty)$, та такі оцінки:

$$|\mathbf{M}(x, t)| \leq \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{x+t}{2} \right) e^{2\sigma_1(0)}, \quad |\mathbf{N}(x, t)| \leq \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{x+t}{2} \right) e^{2\sigma_1(0)}, \quad 0 < x < t,$$

$$|\mathbf{M}'_z(x, t)| \leq \frac{1}{4} \left| q \left(\frac{x+t}{2} \right) \right| + \frac{1}{2} \sigma(x) \sigma \left(\frac{x+t}{2} \right) e^{2\sigma_1(0)}, \quad 0 < x < t, \quad z = x, t,$$

$$|N'_z(x, t)| \leq \frac{1}{4} \left| q \left(\frac{x+t}{2} \right) \right| + \frac{1}{2} \sigma(x) \sigma \left(\frac{x+t}{2} \right) e^{2\sigma_1(0)}, \quad 0 < x < t, \quad z = x, t.$$

Користуючись цими оцінками, можна довести неперервність \mathcal{M} і \mathcal{M}^{-1} у $H_{0,o}^0$. Нехай $\varphi, \psi \in H_{0,o}^0$. Спряжені оператори \mathcal{M}^* та $(\mathcal{M}^{-1})^*$, $D(\mathcal{M}^*) = D((\mathcal{M}^{-1})^*) = H_{0,o}^0$ діють за формулами

$$\mathcal{M}^* \psi(t) = \psi(t) + \operatorname{sign} t \int_0^{|t|} \mathcal{M}(x, |t|) \psi(x) dx, \quad (\mathcal{M}^{-1})^* \varphi(t) = \varphi(t) + \operatorname{sign} t \int_0^{|t|} \mathcal{N}(x, |t|) \varphi(x) dx$$

і неперервні в $H_{0,o}^0$. Завдяки оцінкам для ядер операторів можна довести, що звуження спряжених операторів на $H_{0,o}^1$ і $H_{0,o}^2$ будуть неперервними на цих просторах. Отже, продовжені на $H_{0,o}^{-1}$ та $H_{0,o}^{-2}$ за правилом нижче оператори \mathcal{M} та \mathcal{M}^{-1} будуть там неперервними:

$$(\mathcal{M}f, \psi) = (f, \mathcal{M}^* \psi), \quad (\mathcal{M}^{-1}g, \varphi) = (g, (\mathcal{M}^{-1})^* \varphi),$$

$$\text{де } f, g \in H_{0,o}^s, \quad \varphi, \psi \in H_{0,o}^{-s}, \quad s = -1, -2.$$

Тут області визначення \mathcal{M} та \mathcal{M}^{-1} охоплюють весь простір $H_{0,o}^s$, $s = -1, -2$.

Користуючись (8), (9), неважко довести таку лему:

Лема 1. Нехай $f, g \in H_{0,o}^0$. Тоді $\mathcal{M}(f'') = (\mathcal{M}f)'' - Q\mathcal{M}f - 2\delta' \int_0^\infty \mathcal{M}(0, \xi) f(\xi) d\xi$,

$$\mathcal{M}^{-1}(g'') = (\mathcal{M}^{-1}g)'' + \mathcal{M}^{-1}(Qg) - 2\delta' \int_0^\infty \mathcal{N}(0, \xi) g(\xi) d\xi.$$

На підставі оцінок для ядер операторів вірною є така лема.

Лема 2. Нехай $f \in H_{0,o}^0$ така, що $f \in L^\infty(\mathbb{R})$. Тоді $\mathcal{M}f, \mathcal{M}^{-1}f \in L^\infty(\mathbb{R})$.

3. Умови керованості. Розглянемо допоміжну керовану систему

$$V_{tt}(x, t) = V_{xx}(x, t) - 2p(t)\delta'(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \in (0, T), \quad (11)$$

$$V(x, 0) = V_0^0(x), \quad V_t(x, 0) = V_1^0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (12)$$

де $V(\cdot, t) \in H_{0,o}^0$, $V^0 = \begin{pmatrix} V_0^0 \\ V_1^0 \end{pmatrix} \in \mathbb{H}_{0,o}^0$, p – керування таке, що $p \in L^\infty(0, T)$.

Для заданих $T > 0$ та $V^0 \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ через $\mathcal{Y}_T(V^0)$ позначимо множину $g \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ таких, що існує $p \in L^\infty(0, T)$ таке, що розв'язок системи (11), (12) задовольняє умову $\begin{pmatrix} V(\cdot, T) \\ V_t(\cdot, T) \end{pmatrix} = g$.

Означення 2. Стан $V^0 \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ називається 0-керованим відносно системи (11), (12), якщо 0 належить $\bigcup_{T>0} \mathcal{Y}_T(V^0)$, та ε -керованим відносно системи (11), (12), якщо 0 належить замиканню $\bigcup_{T>0} \mathcal{Y}_T(V^0)$ у $\mathbb{H}_{0,o}^0$.

Питання керованості для системи (11), (12) досить детально вивчено в [7]. Сформульовані нижче дві теореми є окремими випадками результатів, одержаних у [7]:

Теорема 1. Стан $V^0 \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ є ε -керованим відносно системи (11), (12) тоді і лише тоді, коли виконано умови: (i) $V_0^0 \in L^\infty(\mathbb{R})$, (ii) $V_1^0 = (\operatorname{sign} x V_0^0)'$.

Якщо, крім цього, $\int_T^\infty |V_0^0(x)|^2 dx < \varepsilon^2$ для деяких $T > 0$ та $\varepsilon > 0$, то керування $p = V_0^0$ м. с. на $(0, T)$ є розв'язком задачі ε -керуваності.

Теорема 2. Стан $V^0 \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ є 0-керуваним відносно системи (11), (12) тоді і лише тоді, коли умови (i), (ii) теореми 1 виконано та існує таке $T > 0$, що $\text{supp } V_0^0 \subset [-T, T]$. За цих умов керування, що розв'язує задачу 0-керуваності, має вигляд $p = V_0^0$ м. с. на $(0, T)$.

Далі будемо використовувати поняття значення узагальненої функції в точці [14, гл. 1 §3]. Авторами доведено таку лему, після чого дається означення:

Лема 3 [14]. Якщо існує границя $g(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} f(\alpha x + x_0)$, то $g(x)$ є сталою функцією.

Означення 3 [14]. Значення узагальненої функції f у точці x_0 визначається за формулою $f(x_0) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} f(\alpha x + x_0)$.

Зауваження 1. У [14 гл. 1, §3] показано, що якщо узагальнена функція локально інтегровна, то її значення існують майже скрізь. При цьому значення $f(x_0)$ в узагальненому сенсі та у звичайному сенсі майже скрізь збігаються. Отже, для функцій $f \in L^2(\mathbb{R})$ під значенням $\lim_{x \rightarrow +0} f(x)$ розуміємо $\lim_{x \rightarrow +0} f(x) = \lim_{x \rightarrow 0} f(|x|)$.

Лема 4. Нехай $V(x, t)$ – розв'язок системи (11), (12). Тоді $V(+0, t) = p(t)$, $t \in (0, T)$.

Доведення. З [7, (18)] одержуємо

$$V(x, t) = \frac{1}{2} [V_0^0(x+t)V_0^0(x-t) + \tilde{V}_1^0(x+t) - \tilde{V}_1^0(x-t)] - P^t(x+t)P^t(-x+t), \quad (13)$$

де $\tilde{V}_1^0 \in H_0^0$ – парна функція така, що $(\tilde{V}_1^0)' = V_1^0$, $P^t(x) = p(x)[H(x) - H(x-t)]$, $x \in \mathbb{R}$, $t \in (0, T)$.

Користуючись зауваженням 1 та враховуючи носії функцій $P^t(x+t)$ і $P^t(-x+t)$, непарність V_0^0 та парність \tilde{V}_1^0 , з (13) одержуємо твердження леми. Лему доведено.

Теорема 3. Нехай $V(\cdot, t) = \mathcal{M}^{-1}W(\cdot, t)$, $t \in (0, T)$, $V_j^0 = \mathcal{M}^{-1}W_j^0$, $j = 0, 1$. Нехай також

$$u(t) = p(t) + \int_0^\infty M(0, \xi)V(\xi, t) d\xi, \quad t \in (0, T), \quad (14)$$

де $V(\xi, t)$ визначається за формулою (13). Тоді:

(i) $W(x, t)$ є розв'язком системи (5), (6) у тому і лише тому випадку, коли $V(x, t)$ є розв'язком системи (11), (12);

(ii) Для розв'язку $W(x, t)$ системи (5), (6) вірне таке: $W(+0, t) = u(t)$, $t \in (0, T)$.

Твердження (i) доводиться шляхом застосування \mathcal{M} до системи (11), (12), леми 1 і (14) в один бік, та \mathcal{M}^{-1} до системи (5), (6), леми 1, (14) і (7) в інший бік. Твердження (ii) доводиться шляхом застосування \mathcal{M}^{-1} до рівняння (5), леми 1, твердження (i) цієї теореми та леми 4.

Лема 5. Нехай для керування u системи (5), (6) виконано (14), де $p \in L^\infty(0, T)$ – керування, що розв'язує задачу ε -керуваності для системи (11), (12). Тоді $u \in L^\infty(0, T)$.

Ця лема доводиться за допомогою (14), (13) та теореми 1.

Зауваження 2. Завдяки теоремі 3 легко побачити, що звуження на $[0, \infty)$ розв'язку системи (5), (6) буде розв'язком системи (1)–(3).

Зауваження 3. З теореми 3 зрозуміло, що $\begin{pmatrix} W(\cdot, T) \\ W_t(\cdot, T) \end{pmatrix} \in \mathcal{R}_T(W^0)$ тоді, коли $\begin{pmatrix} V(\cdot, T) \\ V_t(\cdot, T) \end{pmatrix} \in \mathcal{U}_T(V^0)$ за умови, що відповідні керування зв'язані співвідношенням (14).

Користуючись неперервністю операторів перетворення, зауваженням 3 та лемою 5, одержуємо таку теорему.

Теорема 4. Нехай стан V^0 є ε -керованим відносно системи (11), (12) за час $T > 0$. Тоді стан W^0 є ε -керованим відносно системи (5), (6) за час $T > 0$.

З теорем 3 і 4 та леми 2 випливають достатні умови керованості для системи (5), (6), а отже, і для системи (1)–(3).

Теорема 5. Стан $W^0 \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ є ε -керованим відносно системи (5), (6), якщо виконано умови:

- (i) $W_0^0 \in L^\infty(\mathbb{R})$;
- (ii) $W_1^0 = \mathcal{M}(\text{sign } x \mathcal{M}^{-1} W_0^0)'$.

Якщо, крім цього, $\int_T^\infty |(\mathcal{M}^{-1} W_0^0)(x)|^2 dx < \varepsilon^2$ для деяких $T > 0$ та $\varepsilon > 0$, то керування

$$u = p + \int_0^\infty \mathcal{M}(0, \xi) V(\xi, \cdot) d\xi = \mathcal{M}^{-1} W_0^0 + \int_0^\infty \mathcal{M}(0, \xi) V(\xi, \cdot) d\xi, \quad \text{м. с. на } (0, T), \quad (15)$$

де $V(\xi, t)$ визначається за (13), є розв'язком задачі ε -керованості.

Теорема 6. Стан $W^0 \in \mathbb{H}_{0,o}^0$ є 0-керованим відносно системи (5), (6), якщо умови (i), (ii) теореми 5 виконано та існує таке $T > 0$, що $\text{supp } \mathcal{M}^{-1} W_0^0 \subset [-T, T]$. За цих умов керування, що розв'язує задачу 0-керованості, має вигляд (15) м. с. на $(0, T)$.

1. Эмануилов О. Ю. Граничная управляемость гиперболическими уравнениями // Сиб. мат. журн. – 2000. – **41**, № 4. – С. 944–959.
2. Russell D. L. Controllability and stabilizability theory for linear partial differential equations: recent progress and open questions // SIAM Rev. – 1978. – **20**, No 4. – P. 639–739.
3. Vancostenoble J., Zuazua E. Hardy inequalities, observability, and control for the wave and Schrödinger equations with singular potentials // SIAM J. Math. Anal. – 2009. – **41**, No 4. – P. 1508–1532.
4. Ильин В. А., Моисеев Е. И. О граничном управлении на одном конце процессом, описываемым телеграфным уравнением // Докл. АН. – 2002. – **387**, № 5. – С. 600–603.
5. Khalina K. S. Controllability problems for the non-homogeneous string that is fixed at the right end point and has the Dirichlet boundary control at the left end point // J. Math. Phys. Anal. Geom. – 2011. – **7**, No 1. – P. 34–58.
6. Khalina K. S. On the Neumann boundary controllability for the non-homogeneous string on a segment // J. Math. Phys. Anal. Geom. – 2011. – **7**, No 4. – P. 333–351.
7. Sklyar G. M., Fardigola L. V. The Markov power moment problem in problems of controllability and frequency extinguishing for the wave equation on a half-axis // J. Math. Anal. Appl. – 2002. – **276**, No 1. – P. 109–134.
8. Фардигола Л. В. Проблема керованості крайовими умовами Неймана для рівняння струни на півосі // Доп. НАН України. – 2009. – № 10. – С. 36–41.
9. Fardigola L. V. Controllability problems for the string equation on a half-axis with a boundary control bounded by a hard constant // SIAM J. Control Optim. – 2008. – **47**. – P. 2179–2199.
10. Fardigola L. V. Controllability problems for the 1 – D wave equation on a half-axis with the Dirichlet boundary control // ESAIM: Control Optim. Calc. Var. – doi:10.1051/cocv/2011169.
11. Schwartz L. Théorie des distributions. I, II. – Paris: Hermann, 1950–1951.
12. Волевич Л. Р., Гиндикин С. Г. Обобщенные функции и уравнения в свертках. – Москва: Физматлит, 1994. – 336 с.
13. Марченко В. А. Операторы Штурма–Лиувилля и их приложения. – Киев: Наук. думка, 1977. – 331 с.

14. Антосиж П., Мижусинский Я., Сикорский Р. Теория обобщенных функций. Секвенциальный подход. – Москва: Мир, 1976. – 311 с.

Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б. І. Веркіна НАН України, Харків

Надійшло до редакції 20.03.2012

Е. С. Халина

Об управляемости краевыми условиями Дирихле для неоднородной струны на полуоси

Рассмотрено уравнение колебания неоднородной струны на полуоси с потенциалом, который не равняется постоянной, и с управлением класса L^∞ на левом конце. Задача управляемости рассмотрена в пространствах Соболева. Получены необходимые и достаточные условия 0- и ε -управляемости за свободное время $T > 0$. Управление найдено в явном виде.

K. S. Khalina

On the controllability over Dirichlet boundary conditions for an inhomogeneous string on the half-axis

The wave equation for an inhomogeneous string is considered on the half-axis. The potential of the string is not equal to a constant. At the left end point, we consider a control of the class L^∞ . The control problem is considered in the Sobolev spaces. Sufficient conditions for the 0- and ε -controllabilities for a free time $T > 0$ are obtained. The control is found explicitly.



УДК 519.6

© 2012

В. О. Богаєнко, Ю. Ю. Даниленко, Г. С. Фінін

Інтерполяція геоінформаційних даних з використанням методу функцій Гріна

(Представлено академіком НАН України В. Н. Редьком)

Пропонується параметричний алгоритм інтерполяції, в якому використовується метод функцій Гріна та спрощені математичні моделі фізичних процесів, до яких відносяться аналізовані дані.

1. Нерегулярний просторовий розподіл геоінформаційних даних ускладнює їх візуалізацію та аналіз, зокрема на етапі інтерполяції. З відомих методів інтерполяції, що застосовуються при постобробці даних, які мають просторову прив'язку, найбільш поширеними є [1]: лінійна інтерполяція, метод обернених зважених відстаней, крігінг [2], інтерполяція сплайнами та тренд-інтерполяція.

У згаданих методах інтерполяції не використовується інформація стосовно фізичної суті аналізованих даних, тоді як з її врахуванням можна будувати інтерполяції, які більш адекватно описують модельовані процеси. Зокрема, процеси у ґрунтових водах описуються досить складними нелінійними системами диференціальних рівнянь у частинних похідних, які, до певного наближення, мають характер еліптичних для опису стаціонарного стану.

Маючи спрощену детерміновану математичну модель такого процесу, пропонуємо задачу інтерполяції розглядати як задачу відновлення значень функції цієї моделі за даними, що вимірюються. Для розв'язання такої задачі використаємо символічний метод функцій Гріна й методику псевдообернення.

2. Для проведення інтерполяції геоінформаційних даних розглянемо обернену задачу щодо рівняння

$$\operatorname{div}(\vec{k} \operatorname{grad} y(x) - \vec{w}y(x)) = q(x), \quad x = (x_1, x_2) \in \Omega, \quad (1)$$

де компоненти коефіцієнта $\vec{k} = (k_1, k_2)$ — задані додатні числа; вектор $\vec{w} = (w_1, w_2)$; $q(x)$ — інтегровна за Ріманом в області моделювання Ω та обмежена функція, а $y(x)$ — шукана функція.

Крайові умови для рівняння (1) мають вигляд

$$\left. \frac{\partial y(x)}{\partial n} \right|_{x \in \gamma_1} = u_1(x), \quad y(x)|_{x \in \gamma_2} = u_2(x), \quad (2)$$

де n — зовнішня нормаль до γ_1 ; $\gamma_1 \cup \gamma_2$ — контур, який обмежує область Ω ; $u_1(x)$, $u_2(x)$ — задані функції.

Розв'язок задачі (1), (2) будується у вигляді суми

$$\begin{aligned} y(s) &= y_\infty(s) + y_1(s), \quad s = (x_1, x_2), \\ y_\infty(s) &= \int_{\mathbb{R}^2} G(s - s') q(s') ds', \\ y_1(s) &= \int_S G(s - s') q(s') ds', \end{aligned} \quad (3)$$

складові якої моделюють вплив на стан системи функції зовнішніх збурень та крайових умов (2). Тут $S = \mathbb{R}^2 \setminus \Omega$; $G(\cdot)$ — функція Гріна рівняння (1) в необмежених областях зміни координат (x_1, x_2) .

Розв'язання задачі зводиться до визначення функції фіктивних зовнішніх впливів $q(s')$, яка через складові (3) враховує дію крайових умов. При розв'язанні отримуваних таким чином задач значення просторових координат s дискретизуються точками $s_l^{(1)} = x_l^{(1)} \in \Gamma_1$ ($l = \overline{1, L}$), $s_m^{(2)} = x_m^{(2)} \in \Gamma_2$, $m = \overline{1, M}$, а s' — точками $s_n = x_n \in S$ ($n = \overline{1, N}$), що дозволяє задачу знаходження дискретних значень моделюючих функцій звести до обернення системи інтегральних співвідношень

$$\int_S A_j(s') q(s') ds' = Y_j, \quad j = 1, 2, \quad (4)$$

де

$$\begin{aligned} Y_1 &\triangleq \text{col} \left(u_1(s_l^{(1)}) - \frac{\partial}{\partial n} y_\infty(s_l^{(1)}), \quad l = \overline{1, L} \right), \\ Y_2 &\triangleq \text{col} \left(u_2(s_m^{(2)}) - y_\infty(s_m^{(2)}), \quad l = \overline{1, M} \right), \\ A_1(s') &\triangleq \text{col} \left(\frac{\partial}{\partial n} G(s_l^{(1)} - s'), \quad l = \overline{1, L} \right), \\ A_2(s') &\triangleq \text{col} \left(G(s_m^{(2)} - s'), \quad m = \overline{1, M} \right). \end{aligned}$$

З використанням методики псевдообернення [3, 4] можна побудувати множини розв'язків рівняння (4), або середньоквадратичних наближень до них у вигляді

$$\overline{\Omega} = \left\{ \widehat{q}(s) : \widehat{q}(s) = A(s)^+ \overline{Y} + v(s) - A^+(s) A(s) v(s), \quad s \in S \right\}. \quad (5)$$

Тут $v(s)$ — довільна функція, інтегрована в області зміни своїх аргументів; $^+$ — операція псевдообернення; $A(s) = \{A_1(s), A_2(s)\}$, $\overline{Y} = \{Y_1, Y_2\}$.

У випадку оберненої задачі функція $u(x)$ невідома і знаходиться з умов

$$y(x) = Y_3(x)|_{D^C}, \quad (6)$$

де $Y_3(x)$ — задана функція; D^C — задана підобласть області моделювання Ω . Область D^C дискретизується точками $s_{n^c}^3 = x_{n^c}^3 \in D^c$ ($n^c = \overline{1, N^c}$).

Множини розв'язків рівняння задачі (1), (2), (6), або середньоквадратичних наближень до них [3, 4] знаходяться з співвідношення

$$\int_S A_j(s')q(s') ds' + \int_{\mathbb{R}^2} A_j(s')u(s') ds' = u_j, \quad j = \overline{1, 3},$$

й мають вигляд

$$\overline{\Omega}^c = \left\{ (\widehat{q}(s), \widehat{u}(s)) : (\widehat{q}(s), \widehat{u}(s)) = A^c(s)^+U + v(s) - A^{c+}(s)A^c(s)v(s), s \in S \right\}, \quad (7)$$

де $A^c(s) \triangleq \text{col}(A_1(s), A_2(s), A_3(s))$; $U \triangleq \text{col}(u_1(s), u_2(s), u_3(s))$; $A_3(s') = \text{col}(G(s_{n^c}^{(3)} - s'), n^c = \overline{1, N^c})$, $s' \in \mathbb{R}^2$, а область визначення матриць $A_1(s')$ та $A_2(s')$ розширена до $s' \in \mathbb{R}^2$.

Для проведення інтерполяції геоінформаційних даних розглянемо рівняння (1) за відсутності крайових умов (2), але за наявності умов (6). Вважаємо, що точки $s_{n^c}^{(3)} = x_{n^c}^{(3)} \in D^c$ та значення шуканої функції в цих точках збігаються з точками та значеннями функції, вихідними для задачі інтерполяції. Розв'язок (інтерполююча функція) знаходиться за дискретним аналогом формули (7) з використанням апарату псевдообернення матриць.

Точність розв'язання при цьому залежатиме від точності чисельного інтегрування, яка, в свою чергу, буде залежати від форми елементів, на які буде дискретизуватись область моделювання. В зв'язку з цим доцільним є використання як такої дискретизації триангуляції Делоне [5]. До початкової триангуляції можна застосовувати різноманітні методики підрозбиття таким чином, щоб кількість її елементів була значно більша за кількість вихідних точок. У такому випадку отримувані після дискретизації системи СЛАР будуть недовизначені й матимуть множину розв'язків.

Оскільки коефіцієнти рівняння (1) не фіксовані, а вибір розв'язку з множини є довільним, отримуємо параметричний інтерполятор з трьома параметрами: коефіцієнтами \vec{k} , коефіцієнтами \vec{w} та функцією $v(s)$ вибору розв'язку, яку будемо вважати константою $v(s) = v_0$.

Запропонований параметричний інтерполятор програмно реалізований та тестований на наборі даних з 52 точок щодо аніонно-катіонного складу води, відбір зразків якої проводився у пунктах, рівномірно розміщених в межах Херсонської області. При аналізі таких даних важливим є виявлення зональності та азональності у просторовому розподілі для встановлення територій, однорідних за показником, та ділянок, в межах яких присутні фактори, що ведуть до зміни хімічного складу поверхневих вод. Результат інтерполяції при наборі параметрів інтерполятора $k_1 = k_2 = 1$, $w_1 = w_2 = 0$, $v_0 = 0$ разом з вихідними точками зображено на рис. 1.

3. Для випадку процесів у ґрунтах та ґрунтових водах розроблено параметричний алгоритм інтерполяції, за допомогою якого проведена інтерполяція й візуалізація даних щодо аніонно-катіонного складу води в межах Херсонської області. Отримані результати показали адекватність інтерполяції фізичним процесам.

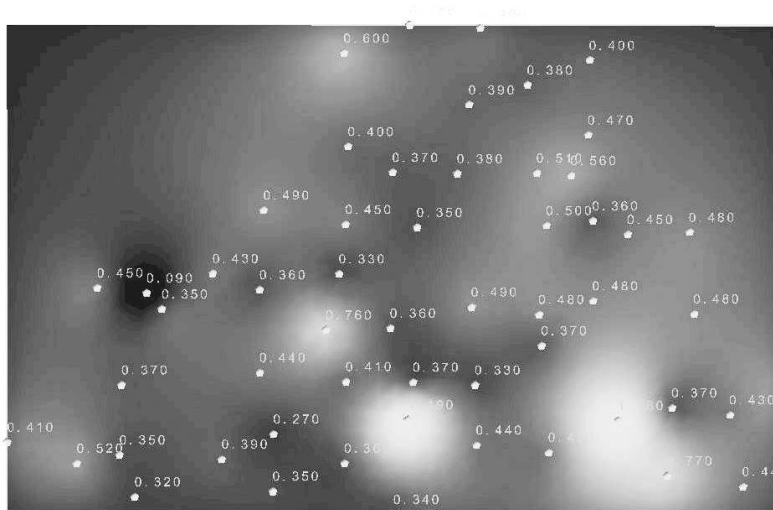


Рис. 1. Результат інтерполяції

1. Li J., Heap A.D. A review of spatial interpolation methods for environmental scientists. – Canberra: Geoscience, 2008. – 137 p.
2. Matheron G. Principles of geostatistics // Economic Geology. – 1963. – **58**. – P. 1246–1266.
3. Скопецький В.В., Стоян В.А., Кривонос Ю.Г. Математичне моделювання прямих та обернених задач динаміки систем з розподіленими параметрами. – Київ: Наук. думка, 2002. – 361 с.
4. Стоян В.А. Псевдообращение интегральных операторов в задачах наблюдения, терминального управления и моделирования динамики систем с распределенными параметрами // Пробл. управления и информатики. – 1998. – № 4. – С. 112–120.
5. Malanchara A., Gerstle W. Comparative study of unstructured meshes made of triangles and quadrilaterals // Proc. 6th Internat. Meshing Roundtable, 1997. – P. 437–447.

Інститут водних проблем і меліорації
НААН України, Київ

Надійшло до редакції 15.03.2012

В. О. Богаєнко, Ю. Ю. Даниленко, Г. С. Финин

Інтерполяція геоінформаційних даних з використанням методу функцій Грина

Предлагается параметрический алгоритм интерполяции, в котором используется метод функций Грина и упрощенные математические модели физических процессов, к которым относятся анализируемые данные.

V. O. Bohaienko, Ju. Ju. Danylenko, G. S. Finin

Interpolation of geoinformational data using Green's functions method

A parametric interpolation algorithm that uses Green's function method and simplified mathematical models of physical processes, on which the analyzed data rely, has been proposed.

В. П. Марценюк, І. Є. Андрущак, І. С. Гвоздецька, Н. Я. Климук

Математичні моделі в системі підтримки прийняття рішень страхового забезпечення лікування онкологічних захворювань: підхід на основі динаміки Гомперца

(Представлено академіком НАН України І. М. Коваленком)

Запропоновано математичні моделі для системи підтримки прийняття рішень у страховому забезпеченні лікування онкологічних захворювань. Моделі включають як опис процесу росту онкологічного утворення, так і багатостадійні ймовірнісні моделі з метою страхування.

Сучасний стан охорони здоров'я тісно пов'язаний з орієнтацією на доказову медицину, головними напрямками якої є: стандартизація охорони здоров'я та медичних досліджень, активне використання систем підтримки рішень в медичних наукових дослідженнях, розробка клінічних довідкових систем.

Подоланню суперечностей між обсягом медичної інформації і можливістю її повноцінного аналізу буде сприяти використання в медицині інформаційних систем, що спираються на методи моделювання, системного аналізу та теорії прийняття рішень.

При цьому основою для декомпозиції в алгоритмах системного аналізу в медицині є змістовна модель захворювання. Поняття захворювання розуміємо як інтеграцію патологічних процесів, що характеризується обмеженням захисно-притосувальних явищ та зниженням працездатності людини [1]. Звідси визначальним в аналізі захворювання має бути вивчення патологічного процесу. До того ж при використанні моделей захворювань в клінічній практиці необхідно враховувати такі процеси, як фармакокінетика та фармакодинаміка лікарського препарату.

З іншого боку, системно-аналітичне обґрунтування застосування схем та методик лікування повинно спиратися на адекватні фінансові моделі, такі як медичне страхування з розрахунком тривалості перебування пацієнта на стадії захворювання, вартості лікування, визначенням основних показників полісу медичного страхування.

Наведена вище проблематика спонукає до розробки інформаційно-аналітичної системи підтримки прийняття рішень, націленої на розв'язання задач вибору оптимальних схем лікування на основі інтеграції моделей патологічного процесу та медичного страхування. Критеріями якості в таких моделях є як характеристики патологічного процесу, показники токсичності лікування, так і основні параметри медичного страхового полісу.

Аналіз програмного забезпечення даної проблеми. Аналізуючи існуюче програмне забезпечення системних медичних досліджень [2], необхідно вказати на відсутність програмних продуктів, які б інтегрували математичні моделі патологічних процесів з урахуванням фармакокінетики та моделі медичного страхування. Створення таких продуктів приводить до необхідної розробки ефективних математичних моделей та методів.

Основні твердження. Одним з найскладніших патологічних процесів є процес росту патологічного утворення. В роботі [3] для опису пухлинного росту запропоновано використовувати динаміку Гомперца. Тому в даній роботі як базова модель пропонується модель

протипухлинного імунітету з урахуванням впливу пошкодженого органу-мішені на імунну відповідь. До того ж практичні задачі, пов'язані з радіотерапевтичним та радіохірургічним (гаманіж, кіберніж) лікуванням вимагають розгляду імпульсних впливів в таких моделях. Отже, для патологічного процесу застосовується модель

$$\begin{aligned}
 \frac{dL(t)}{dt} &= \alpha_L L(t) \ln \frac{\theta_L}{L(t)} - \gamma_L F(t) L(t), \\
 \frac{dC(t)}{dt} &= \xi(m) \alpha_L L(t - \tau) F(t - \tau) - \mu_C (C(t) - C_0), \\
 \frac{dF(t)}{dt} &= b_f C(t) - (\mu_f + \eta \gamma_L L(t)) F(t), \\
 \frac{dm(t)}{dt} &= \sigma L(t) - \mu_m m(t), \quad t \neq nT, \quad n \in N, \\
 \left. \begin{aligned}
 \Delta L(t) &= -pL(t) \quad (0 < p < 1), \\
 \Delta C(t) &= \Delta F(t) = 0, \\
 \Delta m(t) &= -pm(t)
 \end{aligned} \right\} \quad t = nT, \quad n \in N
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

з початковими умовами

$$\begin{aligned}
 (\phi_1(s), \phi_2(s), \phi_3(s), \phi_4(s)) &\in C_+ = C([- \tau, 0], \mathbb{R}_+^4), \\
 \phi_i(0) &> 0 \quad (i = \overline{1, 3}).
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Система (1) розглядається в біологічно значущій області

$$D = \{(L, C, F, m) \mid L, C, F, m \geq 0\}.$$

Значення змінних та коефіцієнтів моделі описані в роботі [1].

Відзначимо, що імпульсні диференціальні рівняння в загальному вигляді можуть не мати жодного розв'язку, навіть коли відповідні диференціальні рівняння є досить гладкими. Тому в роботі [4] запропоновано оцінки розв'язків системи (1), (2) в термінах параметрів моделі в явному вигляді.

Модель (1), (2) може бути використана для опису патологічного процесу пухлинного росту та для вибору схем лікування в задачах оптимального керування. В той же час задачі медичного страхування у випадку онкологічних захворювань вимагають поряд з (1), (2) розгляду моделей для визначення основних показників страхового полісу — виживаність пацієнта, розмір страхових премій, розрахунок вартості лікування тощо. Це вимагає розгляду ймовірнісних моделей багатостадійних захворювань, у яких параметри розподілів показників пухлинного росту впливають з моделі (1), (2).

У роботі [5] запропоновано багатостадійну модель онкологічного захворювання як компартментний процес, для якого відомі закони розподілу часу перебування пацієнта на кожній із стадій. Так чотиристадійна модель захворювання має вигляд, наведений на рис. 1. Тут V_i , $i = \overline{0, 2}$, — час перебування пацієнта на стадії i , $i = \overline{0, 2}$, до моменту переходу на стадію $i + 1$, $i = \overline{0, 2}$; U_i — час перебування пацієнта на стадії i , $i = \overline{0, 2}$, до настання смерті, тобто переходу на стадію 3 (для коректності вважаємо, що $V_2 = U_2$).

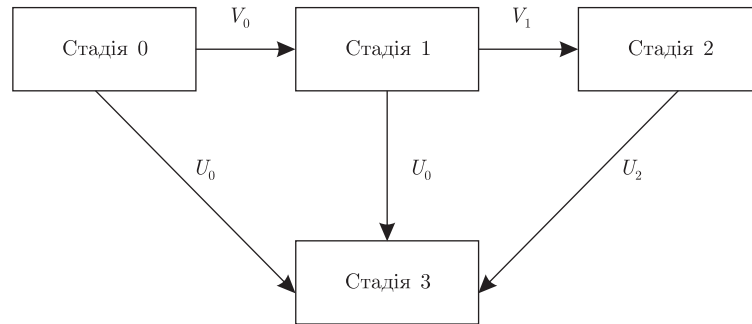


Рис. 1. Компартментна модель чотирьохстадійного захворювання

Щоб отримати перехідні ймовірності та розрахунок ряду страхових функцій, вводяться такі випадкові величини:

$$\begin{aligned}
 H_i &= \min(U_i, V_i), \quad i = \overline{0, 2}, \\
 W_i &= U_i - V_i, \quad i = \overline{0, 2}, \\
 Y_{ij} &= \sum_{k=1}^j H_k, \quad i \leq j = \overline{0, 2}.
 \end{aligned}$$

Основний результат роботи стверджує

Теорема 1. *Перехідні ймовірності $q_{ij}(t)$, $i \leq j = \overline{0, 2}$, можуть бути розраховані згідно з співвідношеннями*

$$\begin{aligned}
 q_{ij}(t) &= P\left\{S(t) = \frac{j}{S(0) = i}\right\} = P\{W_k > 0, k = \overline{i, j-1}\} \times \\
 &\times \left(P\{Y_{ij} > t / W_k > 0, k = \overline{i, j-1}\} - P\{Y_{ij-1} > t / W_k > 0, k = \overline{i, j-1}\}\right).
 \end{aligned} \quad (3)$$

Припустимо далі експоненціальний розподіл величин U_i та V_i , $i = \overline{0, 2}$, а саме:

$$U_i \sim \exp(\theta), \quad i = \overline{0, 2}, \quad V_i \sim \exp(\lambda_i), \quad i = 0, 1. \quad (4)$$

Теорема 2. *У випадку припущення (4) щодо характеру розподілу величин U_i та V_i , $i = \overline{0, 2}$, перехідні ймовірності $q_{ij}(t)$, $i \leq j = \overline{0, 2}$, можуть бути розраховані таким чином:*

$$\begin{aligned}
 q_{00}(t) &= e^{-(\theta_0 + \lambda_0)t}, \quad t > 0, \\
 q_{01}(t) &= \frac{\lambda_0}{\theta_0 + \lambda_0} \left(\frac{\theta_0 + \lambda_0}{\theta_1 + \lambda_1 - \theta_0 - \lambda_0} e^{-(\theta_1 + \lambda_1)t} - e^{-(\theta_0 + \lambda_0)t} \right), \quad t > 0, \\
 q_{02}(t) &= \frac{\lambda_0 \lambda_1}{(\theta_0 + \lambda_0)(\theta_1 + \lambda_1)} \times \\
 &\times \left(\frac{(\theta_0 + \lambda_0)(\theta_1 + \lambda_1) e^{-\theta_2 t}}{(\theta_1 + \lambda_1 - \theta_0 - \lambda_0)(\theta_2 - \theta_1 - \lambda_1)\theta_2} - \frac{(\theta_0 + \lambda_0)}{(\theta_1 + \lambda_1 - \theta_0 - \lambda_0)} e^{-(\theta_1 + \lambda_1)t} \right), \quad t > 0,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
q_{03}(t) &= 1 - q_{00}(t) - q_{01}(t) - q_{02}(t), \quad t > 0, \\
q_{11}(t) &= e^{-(\theta_1 + \lambda_1)t}, \quad t > 0, \\
q_{12}(t) &= \frac{\lambda_1}{\theta_1 + \lambda_1} \left(\frac{\theta_1 + \lambda_1}{\theta_2 - \theta_1 - \lambda_1} e^{-\theta_2 t} - e^{-(\theta_1 + \lambda_1)t} \right), \quad t > 0, \\
q_{13}(t) &= 1 - q_{11}(t) - q_{12}(t), \quad t > 0, \\
q_{22}(t) &= e^{-(\theta_2 + \lambda_2)t}, \quad t > 0, \\
q_{23}(t) &= 1 - e^{-(\theta_2 + \lambda_2)t}, \quad t > 0.
\end{aligned}$$

Відзначимо, що припущення (4) щодо експоненціального розподілу величин U_i та V_i , $i = \overline{0, 2}$, хоча й дає явний вигляд формул для обчислення перехідних ймовірностей і може бути застосоване в багатьох випадках, та все ж не зовсім відповідає пухлинному росту, який, як підтверджено експериментально [3], відповідає динаміці Гомперца. Даному закону розподілу підлягають і виживаність онкохворих, а також час їх перебування на стадіях захворювання. Тому далі також розглядаємо випадок, коли величини U_i , V_i , $i = \overline{0, 2}$, мають розподіл Гомперца, тобто $U_i \sim G(\mu_i, \eta_i)$, $V_i \sim G(\alpha_i, \beta_i)$, $i = \overline{0, 2}$. При цьому використовується переозначення параметрів розподілу Гомперца, відповідно до якого

$$\begin{aligned}
F_{U_i}(t) &= 1 - \exp[-e^{(t-\mu_i)/\eta_i}], \\
F_{V_i}(t) &= 1 - \exp[-e^{(t-\alpha_i)/\beta_i}], \quad i = \overline{0, 2}.
\end{aligned}$$

У подальшому розглядатимемо лише випадок, коли $\eta_i = \beta_i$, $i = \overline{0, 2}$.

Теорема 3. Нехай $U \sim G(\mu, \eta)$ і $V \sim G(\alpha, \beta)$ — випадкові величини, розподілені відповідно до розподілу Гомперца, причому $\eta = \beta$. Тоді різниця $W = U - V$ розподілена за законом розподілу із щільністю

$$f_{U-V}(t) = \frac{\eta e^{-(t+\mu+\alpha)/\eta}}{(e^{-\mu/\eta} + e^{-(t+\alpha)/\eta})^2}. \quad (5)$$

При розрахунку загального часу перебування на стадіях захворювання в даному випадку ми неодмінно прийдемо до спеціальних функцій. Як приклад — результат, отриманий у випадку моделі при відсутності смертності на проміжних стадіях захворювання.

Теорема 4. Нехай V_0 — розподілена відповідно $G(\mu, \eta)$, а V_1 — відповідно, $G(0, \eta)$ -незалежні випадкові величини. Тут $\mu, \eta > 0$.

Тоді випадкова величина $Y = V_0 + V_1$ має функцію розподілу

$$F_Y(t) = 1 - 2\sqrt{Z}K_1(2\sqrt{Z}), \quad (6)$$

де $Z = e^{(t-\mu)/\eta}$, а $K_1(\cdot)$ — модифікована функція Бесселя другого роду.

Далі наведемо порядок обчислення в моделі страхових функцій, пов'язаних із рівнем премій, очікуваних виплат і тривалістю життя. Більш детально такі страхові функції описані в роботі [6].

Виплати і премії переважно описуються в термінах грошових одиниць (наприклад \$1). Майбутня виплата в \$1 для особи, яка пережила t одиниць часу, зараз становить $\$e^{-\delta t}$, де δ — сила зацікавленості. Цей \$1 буде виплачено лише якщо особа виживе і буде на стадії j

в момент t . Позначимо $\bar{E}_i(t)$ поточну очікувану вартість для особи, яка зараз знаходиться на стадії i . Тоді $\bar{E}_i(t) = \sum_{j=i}^2$ (поточна вартість \$1) $q_{ij}(t)$. Звідси загальна разова премія для t -річного страхування для особи на стадії i в момент видачі страхового полісу становить:

$$\bar{E}_i(t) = \sum_{j=i}^2 e^{-\delta t} q_{ij}(t).$$

Страховий поліс з неперервним анuitетом на t років для особи, яка знаходиться на стадії i , має вартість:

$$\bar{a}_i(t) = \sum_{j=i}^2 \int_0^t e^{-\delta s} q_{ij}(s) ds.$$

Це можна переписати як

$$\bar{a}_i(t) = \sum_{j=i}^2 \int_0^t Q_{ij}^*(t), \quad \text{де} \quad Q_{ij}^*(t) = \int_0^t e^{-\delta s} q_{ij}(s) ds, \quad i \leq j \leq 2.$$

Загальна разова премія для такого страхового полісу з неперервним t -річним анuitетом може бути розрахована так:

$$\bar{A}_i(t) = \sum_{j=i}^2 \int_0^t \theta'_j \int_0^t e^{-\delta s} q_{ij}(s) ds = \sum_{j=i}^2 \theta'_j Q'_{ij}(t),$$

де θ'_j — параметр смертності для особи на стадії j , тобто $\theta'_j = \theta_j$.

І, нарешті, отримуємо загальну неперервно сплачувану премію за одиницю часу для t -річного страхового полісу з неперервним анuitетом для особи, що перебуває на стадії i в момент видачі полісу:

$$\bar{P}_i(t) = \frac{\bar{A}_i(t)}{\bar{a}_i(t)}.$$

Очікувана тривалість життя для особи на стадії i становить

$$e_i = \sum_{j=i}^2 \theta'_j \int_0^\infty t q_{ij}(t) dt = \sum_{j=i}^2 \theta_j \int_0^\infty t q_{ij}(t) dt = \sum_{j=i}^2 \theta_j Q_{ij},$$

де $Q_{ij} = \int_0^\infty t q_{ij}(t) dt$.

Очевидно, що параметри страхового полісу повинні впливати з вартості медичних послуг, які будуть надаватися. Так вартість t -річного полісу з неперервним анuitетом $\bar{a}_i(t)$ має відповідати очікуваній вартості медичних послуг для особи, яка знаходиться в даний час на стадії i з урахуванням вартості \$1 в майбутньому. Наприклад, вартість медичних послуг

для особи, яка зараз знаходиться на стадії $i = 0, 1$, яка впродовж часу $(0, t)$ переходить на завершальну стадію 2, може бути обчислена як

$$H(t, i) = \int_0^t (c_{1i} + c_{2i}e^{h_i s})e^{-\delta s} q_{i2}(s) ds,$$

де c_{1s} , c_{2s} , h_1 — додатні сталі. Тут c_{1i} — деяка фіксована вартість медичних послуг для стадії i (наприклад, вартість основного лікування); $c_2 e^{h_i s}$ ($0 < s < t$) — змінна вартість лікування, яка визначається початковою стадією i та часом s .

1. *Патологическая физиология* / Под ред. А. Д. Адо и Л. М. Ишимовой. — Москва, 1980. — 535 с.
2. Андрущак І. С. Програмне забезпечення фармакокінетичних системних досліджень // Медична інформатика та інженерія. — 2009. — № 3. — С. 76–82.
3. Laird A. K. Dynamics of tumor growth // Br J. of Cancer. — 1964. — 18. — P. 490–502.
4. Марценюк В. П., Андрущак І. Е., Гвоздецкая І. С. Построение оценок решений в модели противоопухолевого иммунитета с импульсными возмущениями // Кибернетика и системный анализ. — 2012. — № 2. — С. 50–54.
5. Марценюк В. П., Климук Н. Я. Модель багатостадійного захворювання для задач медичного страхування // Штучний інтелект. — 2012. — № 1. — С. 40–46.
6. Bowers N. L., Yerber H. U., Hickmen J. C. et al. Actuarial mathematics. — Schaumbury: The Society of Actuaries, 1997. — 753 p.

Тернопільський державний медичний університет
ім. І. Я. Горбачевського

Надійшло до редакції 29.03.2012

В. П. Марценюк, І. Е. Андрущак, І. С. Гвоздецкая, Н. Я. Климук

**Математические модели в системе поддержки принятия решений
страхового обеспечения лечения онкологических заболеваний:
подход на основе динамики Гомперца**

Предложены математические модели для системы поддержки принятия решений в страховом обеспечении лечения онкологических заболеваний. Модели включают как описание процесса роста онкологического образования, так и многостадийные вероятностные модели с целью страхования.

V. P. Martsenyuk, I. E. Andrushchak, I. S. Gvozdetska, N. Y. Klymuk

**Mathematical models in a system of the support of decisions for the
oncological treatment ensurance: an approach based on the Homperzian
dynamics**

We have proposed models for a decision supporting system in the oncological diseases' treatment insurance. The models describe the growth of oncological formations and include multistage probability models aimed at the insurance.

Член-корреспондент НАН Украины А. И. Шевченко, А. С. Миненко,
А. А. Замула

Об одном подходе при моделировании сложных систем

Построена системно-динамическая модель деятельности банковской системы, получены функциональные зависимости между основными факторами влияния. В результате реализации модели получен прогноз ключевых показателей банковской системы на пять лет, выявлены основные тенденции развития.

Постановка задачи. Данная работа посвящена моделированию сложных систем применительно к банковской деятельности. Построенная модель позволит выявить основные закономерности и тенденции развития, факторы, влияющие на финансовые результаты банковской системы, а также осуществить прогноз его дальнейшей деятельности. При построении математической модели банковской системы выделяются следующие основные факторы, влияющие на эту систему: 1) образование (уровень развития общего и специального образования); 2) мировая экономика (показатель кредитования частного сектора LPS, индекс настроений в экономике EMU); 3) валовый внутренний продукт (ВВП); 4) инвестиции (показывают суммарный объем капиталовложений всех предприятий страны); 5) промышленность — показатель объема промышленного производства, занимающего значительную долю в ВВП государства; 6) резервы банка; 7) объем кредитования; 8) объем привлеченных денежных средств — депозитов [1].

Ставится задача: построить динамическую модель деятельности банковской системы, учитывающей основные факторы влияния на макроуровне с целью получения прогноза основных показателей и анализа общих тенденций развития.

Построение динамической модели. Шагом моделирования служит один год, а интервалом — пять лет. Построенная математическая модель должна основываться на принципах системной динамики [2]. Следовательно, необходимо ввести описание уровней, темпов и переменных модели. При построении уравнений переменные были разделены на два больших класса — уровни и темпы. Для данной модели банковской системы целесообразно ввести один уровень — уровень накопленной прибыли (капитализации). Основными темпами в модели являются: 1) темп доходов банковской системы (bs); 2) темп расходов bs.

Уровень капитализации опишем с помощью следующего уравнения:

$$K_{bs} = K_{bs} + \int_{t_0}^t P_{bs} dt,$$

где K_{bs} — уровень капитализации банковской системы в момент времени t ; P_{bs} — объем прибыли — $P_{bs} = D_{bs} - R_{bs}$ (D_{bs} — доходы bs, R_{bs} — расходы bs).

Темпы доходов и расходов описываются уравнениями

$$D_{bs(t)} = \frac{c(t)r_k(t)}{100},$$

где $c(t)$ — объем кредитования bs в момент времени t ; $r_k(t)$ — среднегодовая процентная ставка по кредитам в процентах,

$$R_{bs(t)} = \frac{d(t)r_d(t)}{100} + OR(t) + \text{Reserv.}$$

Здесь $d(t)$ — объем привлеченных денежных средств (депозитов) в момент времени t ; $r_d(t)$ — среднегодовая процентная ставка по депозитам в процентах; $OR(t)$ — размер обязательного резерва — $OR(t) = n(t)d(t)/100$, где $n(t)$ — норма обязательного резерва, установленная НБУ в процентах; Reserv — объем резервов на покрытие убытков.

Единицей измерения показателей K_{bs} , D_{bs} , R_{bs} , $c(t)$, $d(t)$, $P_{bs(t)}$, $OR(t)$, Reserv служит млн грн/год.

Построение функциональных зависимостей. Для выявления функциональных зависимостей между переменными использовались официальные данные за 10 лет [3].

Вид функциональных зависимостей определялся исходя из максимального значения коэффициента детерминации (R^2) и минимального значения среднеквадратической ошибки прогноза (σ) [4]. Таким образом, можно получить следующие функциональные зависимости ($t \in [1, 5]$):

1) процентная ставка по кредитам

$$r_k(t) = y_1 = 0,0397t^3 - 0,402t^2 - 0,3357t + 29,16, \quad R^2 = 0,93, \quad \sigma = 0,024;$$

2) процентная ставка по депозитам

$$r_d(t) = y_2 = -0,025t^3 + 0,6529t^2 - 4,7145t + 17,617, \quad R^2 = 0,90, \quad \sigma = 0,001;$$

3) индекс LPS

$$y_3 = -0,0052t^2 - 0,607t + 11,753, \quad R^2 = 0,98, \quad \sigma = 0,00029;$$

4) индекс EMU

$$y_4 = 0,014t^3 - 0,039t^2 - 4,539t + 104,04, \quad R^2 = 0,92, \quad \sigma = 0,001;$$

5) зависимость размера ВВП от объема промышленного производства

$$y_5 = 0,5051y_9^{1,067}, \quad R^2 = 0,95, \quad \sigma = 0,002;$$

6) объем депозитов

$$d(t) = y_6 = -2245,9t^3 + 49688t^2 - 209672t + 245723, \quad R^2 = 0,95, \quad \sigma = 0,003;$$

7) зависимость объема инвестиций от размера ВВП

$$y_7 = 0,0169y_5^{1,1835}, \quad R^2 = 0,95, \quad \sigma = 0,002;$$

8) зависимость объема кредитования от объема инвестиций (y_7) и состояния мировой экономики (y_3 , y_4)

$$y_8 = 2,02y_7 - 161637,9y_3 - 13199,73y_4 + 333782,8, \quad R^2 = 0,99, \quad \sigma = 0,0004;$$

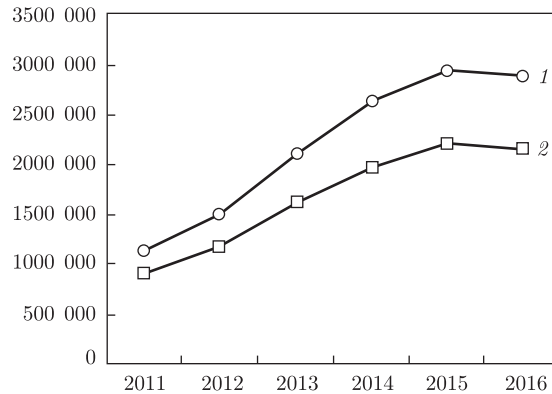


Рис. 1. Прогноз объема ВВП и промышленного производства: 1 — объем ВВП; 2 — объем промышленного производства

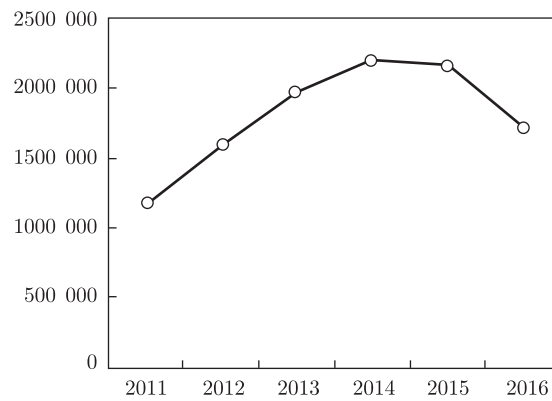


Рис. 2. Прогноз объема кредитования

9) объем промышленного производства

$$y_9 = -655,26t^3 + 16242t^2 - 38530t + 190742, \quad R^2 = 0,97, \quad \sigma = 0,0002;$$

10) объем резервов на покрытие убытков

$$\text{Reserv} = y_{10} = -67,782t^4 + 1884,4t^3 - 15166t^2 + 43545t - 31397, \quad R^2 = 0,93, \quad \sigma = 0,019.$$

Таким образом, построена динамическая модель банковской системы, в основу которой положено восемь факторов. Однако методика построения модели такова, что может быть использовано и большее число факторов.

В результате численной реализации получен прогноз банковской системы на пять лет. Выявлено, что на данном этапе банковская система находится в кризисном состоянии, происходит падение прибыли. Это связано с сокращением кредитных вложений, уменьшением объемов производства, падением уровня ВВП (рис. 1, 2).

Замечание. В дальнейшем предполагается организация интеллектуального управления банковской системой на основе построенной математической модели при помощи нечеткой логики. Данная работа является естественным продолжением результатов по моделированию сложных систем, полученных авторами ранее [1, 5].

1. Замула А. А. Моделирование деятельности банковской системы на макроуровне // Восточно-Европейский журн. передовых технологий. – 2011. – № 6. – С. 47–52.
2. Форрестер Дж. Мировая динамика. – Москва: Наука, 1978. – 164 с.
3. Официальный сайт Национального Банка Украины (электронный ресурс). – Режим доступа: www.bank.gov.ua.
4. Дащинская Н. П. Финансовая статистика. – Минск: БГУ, 2007. – 320 с.
5. Миненко А. С. Вариационные задачи со свободной границей. – Киев: Наук. думка, 2005. – 341 с.

Институт информатики и искусственного интеллекта ДонНТУ, Донецк

Поступило в редакцию 19.03.2012

Член-корреспондент НАН України **А. І. Шевченко, О. С. Міненко, А. О. Замула**

Про один підхід при моделюванні складних систем

Побудовано системно-динамічну модель діяльності банківської системи, одержано функціональні залежності між основними факторами впливу. В результаті реалізації моделі отримано прогноз ключових показників банківської системи на п'ять років, виявлено основні тенденції розвитку.

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **A. I. Shevchenko, A. S. Minenko, A. A. Zamula**

About one approach to the modeling of complex systems

A system dynamic model of bank system activity and the functional dependences between main factors are constructed. The forecast of the bank system key indices on five years and basic trends are obtained.



УДК 539.3

© 2012

В. Н. Бастун

К оценке нижней границы интервала рассеяния предельных напряжений в элементах оболочечных конструкций

(Представлено академиком НАН Украины Я. М. Григоренко)

Предложен подход к оценке нижней границы интервала рассеяния предельных напряжений в элементах оболочечных конструкций в вероятностной постановке на основе корреляционной связи параметров разброса границы прочности с характеристиками пластичности материала. В качестве примера рассмотрена тонкостенная круговая цилиндрическая оболочка, изготовленная из высокопрочной стали мартенситного класса и нагруженная осевой растягивающей силой и внутренним давлением.

В процессе эксплуатации материал многих элементов конструкций в результате воздействия ряда факторов (усталость при циклическом деформировании, наличие агрессивной окружающей среды, накопление микроповреждений) претерпевает структурные изменения, приводящие к деградации его механических свойств, увеличению разброса значений предельных напряжений, охрупчиванию. Сказанное подтверждается увеличением в результате наработки разброса характеристик твердости [1], которые тесно коррелируют с характеристиками прочности. Заметим, что охрупчивание материала может быть обусловлено также работой конструкции в условиях сложного напряженного состояния [2, 3] и низких температур [4], воздействием радиационного облучения [5, 6]. Вследствие возможности существенного увеличения интервала разброса прочностных свойств материала в процессе эксплуатации конструкции актуальной является оценка величины этого интервала, что позволяет устанавливать величину запаса прочности по отношению к нижнему значению предела прочности, т. е. по нижней границе прочности, а не по отношению к его среднему значению.

Ниже рассматривается подход к оценке нижней границы интервала рассеяния предельных (разрушающих) напряжений в элементах оболочечных конструкций в вероятностной постановке на основе корреляционной связи параметров разброса предела прочности с пластичностью материала. Полагаем, что значения предела прочности σ_b есть случайные величины, их рассеяние является следствием статистического распределения дефектов и подчиняется нормальному закону распределения, а величина интервала рассеяния определяется

уровнем пластичности материала. Согласно этому закону, функция F распределения случайной величины x имеет вид [7]

$$F(x) = \frac{1}{D_x \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp \left[-\frac{(x - \bar{m}_x)^2}{2D_x^2} \right] dx. \quad (1)$$

Здесь \bar{m}_x — математическое ожидание; D_x — среднее квадратичное отклонение (стандарт).

Значения этих параметров находятся экспериментально на основании испытаний представительной партии образцов по формулам

$$\bar{m}_x = \frac{\sum_{i=1}^k x_i n_i}{N}; \quad D_x = \left[\frac{\sum_{i=1}^k (x_i - \bar{m}_x)^2}{\sum_{i=1}^k n_i - 1} \right]^{1/2}, \quad (2)$$

где n_i — абсолютная частота в данном интервале значений x_i .

Построение нижней границы интервала рассеяния предельных напряжений рассмотрим на примере гладкой круговой цилиндрической оболочки, нагруженной осевой растягивающей силой P и внутренним давлением p . При этом в стенке оболочки возникает двухосное напряженное состояние, характеризуемое продольным σ_z и поперечным σ_θ напряжениями, которые определяются по формулам

$$\sigma_z = \frac{P}{\pi(D-h)h} + \frac{p(D-2h)}{2h}, \quad \sigma_\theta = \frac{p(D-2h)}{2h}, \quad (3)$$

где D — наружный диаметр оболочки; h — толщина стенки.

Полагая, что в исходном состоянии материал изотропен и наступление разрушения определяется условием постоянства энергии формоизменения, граница интервала рассеяния значений предельных напряжений будет описываться уравнением

$$\sigma_z^2 - \sigma_z \sigma_\theta + \sigma_\theta^2 = \sigma_b^2. \quad (4)$$

Здесь σ_b — предел прочности материала. Тогда нижнюю границу интервала рассеяния предельных напряжений можно построить, вычитая из каждой точки границы прочности (4) величину вероятностного интервала рассеяния δ . Величина интервала рассеяния в рассматриваемом случае напряженного состояния определяется как $K D_{\sigma_{вз}}(\bar{\varepsilon}_3^p)$, где $D_{\sigma_{вз}}$ — стандарт предельного (разрушающего) эквивалентного напряжения $\sigma_{вз}$, являющийся функцией предельного значения эквивалентной пластической деформации $\bar{\varepsilon}_3^p$; K — коэффициент, характеризующий величину разброса предельных напряжений и определяемый принятым вероятностным уровнем события Q . Так, например, при вероятности события $Q = 95\%$ $K = 2$, а при $Q = 99\%$ $K = 3$ [8]. Предельное эквивалентное напряжение $\sigma_{вз}$ и эквивалентная пластическая деформация $\bar{\varepsilon}_3^p$ определяются по формулам [3]

$$\sigma_{вз} = [(\sigma_z^{pp})^2 - \sigma_z^{pp} \sigma_\theta^{pp} + (\sigma_\theta^{pp})^2]^{1/2}, \quad (5)$$

$$\bar{\varepsilon}_3^p = \frac{2}{\sqrt{3}} [(\bar{\varepsilon}_z^p)^2 + \bar{\varepsilon}_z^p \bar{\varepsilon}_\theta^p + (\bar{\varepsilon}_\theta^p)^2]^{1/2}, \quad (6)$$

где σ_z^{np} и $\sigma_\theta^{\text{np}}$ — предельные значения осевого и окружного напряжений; $\bar{\varepsilon}_z^p$ и $\bar{\varepsilon}_\theta^p$ — равномерные составляющие остаточных продольной и поперечной деформаций. Заметим, что в случае одноосного растяжения, например, в направлении оси z (при этом $\sigma_\theta = 0$ и $\bar{\varepsilon}_\theta^p = -(1/2)\bar{\varepsilon}_z^p$) имеем $\sigma_{\text{вз}} = \sigma_z^{\text{np}} = \sigma_{\text{в}}$, $\bar{\varepsilon}_3^p = \bar{\varepsilon}_z^p$.

Зависимость приведенного стандарта $\bar{D}_{\sigma_{\text{вз}}} = D_{\varepsilon_{\text{вз}}}/D_{\varepsilon_{\text{вз}}|\bar{\varepsilon}_3^p=0,03}$ от эквивалентной пластической деформации описывается полученным эмпирическим путем уравнением вида

$$\bar{D}_{\sigma_{\text{вз}}} = \frac{1}{a + b\bar{\varepsilon}_3^p}, \quad (7)$$

где a и b — коэффициенты, зависящие от свойств материала. Здесь величина $\bar{\varepsilon}_3^p$ является функцией вида напряженного состояния q , характеризуемого соотношением σ_z/σ_θ , и может быть определена из условия нарушения устойчивости процесса упруго-пластического деформирования.

Нарушение устойчивости процесса деформирования в рассматриваемом случае произойдет при выполнении одного из условий: $dP = 0$ или $dp = 0$. Величины P и p , полагая $h \ll D$, определяются из (3) следующим образом:

$$P = \frac{\pi}{2}(2q - 1)hD\sigma_\theta; \quad p = \frac{2h\sigma_\theta}{D}.$$

Тогда при условии $dP = 0$ получаем:

$$\frac{dD}{D} + \frac{dh}{h} + \frac{d\sigma_\theta}{\sigma_\theta} = 0. \quad (8)$$

Вводя обозначения $dD/D = d\varepsilon_\theta^p$ и $dh/h = d\varepsilon_r^p$ (здесь $d\varepsilon_r^p$ — приращение радиальной составляющей пластической деформации), выражение (8) представим в виде

$$d\varepsilon_\theta^p + d\varepsilon_r^p + \frac{d\sigma_\theta}{\sigma_\theta} = 0. \quad (9)$$

С учетом условия несжимаемости равенство (9) упростится и запишется так:

$$d\varepsilon_\theta^p = \frac{d\sigma_\theta}{\sigma_\theta}. \quad (10)$$

Из (6) следует

$$\varepsilon_\theta^p = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\bar{\varepsilon}_3^p}{\sqrt{\left(\frac{\bar{\varepsilon}_z^p}{\bar{\varepsilon}_\theta^p}\right)^2 + \frac{\bar{\varepsilon}_z^p}{\bar{\varepsilon}_\theta^p} + 1}},$$

отсюда

$$d\varepsilon_\theta^p = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{d\bar{\varepsilon}_3^p}{\sqrt{\left(\frac{\bar{\varepsilon}_z^p}{\bar{\varepsilon}_\theta^p}\right)^2 + \frac{\bar{\varepsilon}_z^p}{\bar{\varepsilon}_\theta^p} + 1}}. \quad (11)$$

Связь между величинами $\bar{\varepsilon}_z^p/\bar{\varepsilon}_\theta^p$ и $\sigma_z/\sigma_\theta = q$ установим, распространяя форму записи обобщенного закона Гука на пластическую область и полагая коэффициент поперечной деформации равным 0,5. Тогда получим

$$\frac{\bar{\varepsilon}_z^p}{\bar{\varepsilon}_\theta^p} = \frac{2q - 1}{2 - q}, \quad (12)$$

откуда

$$q = \frac{2\bar{\varepsilon}_z^p + \bar{\varepsilon}_\theta^p}{\bar{\varepsilon}_z^p + 2\bar{\varepsilon}_\theta^p}. \quad (13)$$

Отсюда на основании (11) с учетом (12) следует

$$\bar{\varepsilon}_z^p = \frac{(2q - 1)\bar{\varepsilon}_\theta^p}{2\sqrt{q^2 - q + 1}}; \quad d\bar{\varepsilon}_z^p = \frac{(2q - 1)d\bar{\varepsilon}_\theta^p}{2\sqrt{q^2 - q + 1}}. \quad (14)$$

Подставляя в (10) значение $d\bar{\varepsilon}_z^p$ из (14), а также σ_θ , найденное из (5), а также соответствующее значение $d\sigma_\theta$, находим:

$$\frac{d\sigma_\theta}{d\bar{\varepsilon}_\theta^p} = \frac{2q - 1}{2\sqrt{q^2 - q + 1}}. \quad (15)$$

Чтобы избежать неопределенности при $q \rightarrow \infty$, введем обозначение $q = 1/m$. Тогда на основании (15) получим

$$\frac{d\sigma_\theta}{d\bar{\varepsilon}_\theta^p} = \frac{(2 - m)\sigma_\theta}{2\sqrt{m^2 - m + 1}}. \quad (16)$$

Условию $dp = 0$ соответствует уравнение

$$\frac{dh}{h} + \frac{d\sigma_\theta}{\sigma_\theta} - \frac{dD}{D} = 0. \quad (17)$$

Согласно принятым обозначениям и условию несжимаемости, получим

$$d\varepsilon_z^p + 2d\varepsilon_\theta^p = \frac{d\sigma_\theta}{\sigma_\theta}. \quad (18)$$

Подставляя сюда значения $d\bar{\varepsilon}_z^p$, $d\bar{\varepsilon}_\theta^p$, $d\sigma_\theta$ и σ_θ , после преобразований получаем

$$\frac{d\sigma_\theta}{d\bar{\varepsilon}_\theta^p} = \frac{3\sigma_\theta}{2\sqrt{q^2 - q + 1}}. \quad (19)$$

Область применимости равенств (16) и (19) установим из их совместного решения, откуда следует, что их общей точкой является $q = 2$.

Как видно, нарушение устойчивости процесса деформирования происходит при уровнях напряжений, соответствующих различным значениям касательного модуля. Полагая, что

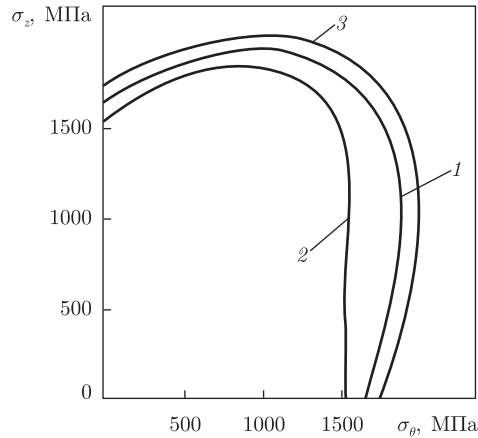


Рис. 1. Нижние границы предельных напряжений в оболочке при разных уровнях пластичности материала

упрочнение материала описывается степенным законом, выражения (16) и (19) представим в конечном виде [3]:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_\theta^p &= \frac{2}{3} \sqrt{q^2 - q + 1} \bar{\varepsilon}^p & \left(q = \frac{\sigma_z}{\sigma_\theta} = 0, \dots, 2 \right); \\ \bar{\varepsilon}_z^p &= \frac{2\sqrt{m^2 - m + 1}}{2 - m} \bar{\varepsilon}^p & \left(m = \frac{1}{q}; q = 2, \dots, \infty \right), \end{aligned} \quad (20)$$

где $\bar{\varepsilon}^p$ — равномерная составляющая остаточного удлинения при одноосном растяжении.

Используя полученные соотношения, определим в качестве примера нижнюю границу интервала рассеяния предельных напряжений применительно к рассмотренной выше оболочке, изготовленной из высокопрочной стали 28ХЗСНМВФА мартенситного класса, в области $\sigma_z > 0, \sigma_\theta > 0$. Эта сталь имеет следующие характеристики [3]: $\sigma_B = 1740$ МПа, $D_{\sigma_{вз}, \bar{\varepsilon}^p=0,03} = 29$ МПа, $a = 0,27; b = 22,6$. Построенные при $K = 3$ описанным выше способом нижние границы интервала рассеяния предельных напряжений, соответствующие различным уровням пластичности $\bar{\varepsilon}^p$, приведены на рис. 1, где 1, 2 — нижние границы соответственно при $\bar{\varepsilon}^p = 3$ и 0,5%, 3 — граница, построенная по условию (4), (σ_B — среднее значение предела прочности). Как видно, при снижении пластичности нижняя граница указанного интервала сокращается, причем в разных направлениях неодинаково. Наиболее интенсивное ее сокращение наблюдается при соотношении напряжений $\sigma_z/\sigma_\theta = 0,5$, которое соответствует минимальной пластичности. Отмеченная закономерность согласуется с экспериментальными данными, приведенными в работах [3, 4].

Таким образом, на основании проведенного исследования можно отметить, что рассмотренный подход позволяет определять расчетным путем в вероятностной постановке нижнюю границу интервала рассеяния разрушающих напряжений в элементах оболочечных конструкций в зависимости от уровня пластичности материала, из которого они изготовлены.

1. Лебедев А. А., Музыка Н. Р., Волчек Н. Л. Определение поврежденности конструкционных материалов по параметрам рассеяния характеристик твердости // Пробл. прочности. — 2002. — № 4. — С. 5–12.
2. Бастун В. Н. О влиянии геометрической формы конструкции на ее несущую способность // Прикл. механика. — 1973. — 9, № 8. — С. 57–63.

3. Каминский А. А., Бастун В. Н. Деформационное упрочнение и разрушение металлов при переменных процессах нагружения. – Киев: Наук. думка, 1985. – 165 с.
4. Lebedev A. A., Kovalchuk B. I., Giginyak F. F., Lamashevsky V. P. Handbook of mechanical properties of structural materials at a complex stress state. – New York: Begell, 2001. – 500 p.
5. Шалаев А. Н. Действие ионизирующих излучений на металлы и сплавы. – Москва: Атомиздат, 1967. – 210 с.
6. Бабич Д. В. О напряженно-деформированном состоянии тонкостенных конструкций при радиационных воздействиях // Прикл. механика. – 2003. – **39**, № 8. – С. 95–103.
7. Болотин В. В. Статистические методы в строительной механике. – Москва: Госстройиздат, 1961. – 201 с.
8. Румицкий Л. Э. Математическая обработка результатов эксперимента. – Москва: Наука, 1971. – 265 с.

Институт механики им. С. П. Тимошенко
НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 15.02.2012

В. М. Бастун

До оцінки нижньої межі інтервалу розсіяння граничних напружень в елементах оболонкових конструкцій

Запропоновано підхід до оцінки нижньої межі інтервалу розсіяння граничних напружень в елементах оболонкових конструкцій у ймовірнісній постановці на основі кореляційного зв'язку параметрів розкиду межі міцності з характеристиками пластичності матеріалу. Як приклад розглянуто тонкостінну кругову циліндричну оболонку, виготовлену з високоміцної сталі мартенситного класу та навантажену осьовою розтягальною силою і внутрішнім тиском.

V. N. Bastun

On the estimation of the lower boundary of a dispersion interval of limiting stresses in shell structure elements

An approach to the estimation in the probabilistic statement of the lower boundary of a dispersion interval of limiting stresses in elements of shell structures is proposed. The approach is based on a correlation of the dispersion parameters of an ultimate strength with plasticity characteristics of a material. As an example, a thin-walled circular cylindrical shell is considered. The shell, which is made of a high-strength martensitic steel, is acted upon by the axial tensile force and the internal pressure.

В. И. Гололобов

Осесимметричные резонансные колебания гибкой шарнирно опертой вязкоупругой пластины с пьезослоями

(Представлено академиком НАН Украины Ю. Н. Шевченко)

С применением метода Бубнова–Галеркина рассмотрена задача о вынужденных резонансных колебаниях круглой гибкой вязкоупругой пластины при электромеханическом нагружении. Приведены результаты расчета резонансных характеристик пластины с двумя пьезопреобразователями с учетом геометрической нелинейности.

Для уменьшения интенсивности вибраций конструктивных элементов широко применяются демпфирующие материалы. Наряду с этим, нанесение пьезослоев на поверхности пластин и использование их в качестве электромеханических преобразователей дает возможность оказывать дополнительное воздействие с целью частичной компенсации вибронрузок и таким образом осуществлять управление интенсивностью колебаний электрическим путем.

В работе рассматривается задача о колебаниях тонкой пластинки под поперечной нагрузкой, синусоидально изменяющейся во времени в области частот, близких к резонансной. Трехслойная пластина радиусом a с вязкоупругим внутренним слоем толщиной h имеет два наружных пьезокерамических слоя толщиной δ . Эти слои поляризованы в осевом направлении и на их поверхности нанесены круговые электроды, к которым приложено компенсационное электрическое напряжение, синусоидально изменяющееся во времени и совпадающее по частоте с основной нагрузкой.

Отнесем сечение пластины к осям r и γ , где ось γ направлена параллельно оси вращения, совместив начало координат с точкой пересечения оси вращения со срединной плоскостью основного слоя. Электрическое напряжение амплитуды V приложено к пьезослоям таким образом, что возникающие в заземленном элементе пластины механические напряжения эквивалентны моменту M_e . Нагрузки представим в виде

$$p(r, t) = p_1(t)p_0(r), \quad M_e(r, t) = m_1(t)[H(r) - H(r - r_2)],$$

где $H(r)$ — единичная ступенчатая функция; при $r_2 = a$ выражение для M_e представляет равномерно распределенную по площади пластины электрическую нагрузку.

Обозначим через $u(r)$ и $w(r)$ амплитуды перемещений точек срединной поверхности основного слоя в направлении осей r и γ .

При вибрационном возбуждении колебаний пластинки в околорезонансной области поперечные перемещения не будут малыми по сравнению с толщиной и для описания динамического процесса используется геометрически нелинейная теория изгиба пластин. При этом влияние пьезоэлектрических слоев учитывается на основе предположения о независимости электрической индукции от толщинной координаты. Вследствие этого для вычисления жесткостных характеристик элемента пластинки в случае растяжения используется

жесткостная характеристика пьезоматериала для плоского напряженного состояния c_{11}^E , а в случае изгиба — приведенная жесткость материала [1]

$$c = c_{11}^E + \frac{e^2}{\varepsilon} \left(1 - \frac{3}{4} \frac{h^2 + 2h\delta + \delta^2}{\frac{3}{4}h^2 + \frac{3}{2}h\delta + \delta^2} \right),$$

где величины c_{11}^E , e и ε определяются по стандартным характеристикам пьезоматериала [2]

$$c_{11}^E = \frac{s_{11}^E}{(s_{11}^E)^2 - (s_{12}^E)^2}, \quad e = \frac{d_{31}}{s_{11}^E + s_{12}^E}, \quad \varepsilon = \varepsilon_{33}^T - 2d_{31}e.$$

Представим свойства материала вязкоупругого слоя в виде [3]

$$\sigma(t) = E_0\varepsilon(t) + \int_0^t \varepsilon(\tau) \frac{dE(t-\tau)}{d(t-\tau)} d\tau = E_0\bar{E} * \varepsilon(t),$$

где E_0 — мгновенный модуль; $E(t)$ — релаксационный модуль.

Считая, что коэффициент ν принимает одинаковые значения для всех слоев, определяющие соотношения для элемента пластины можно записать в виде

$$\begin{aligned} N_r &= (D_N'' + D_N' \bar{E}^*)(\varepsilon_r + \nu\varepsilon_\theta), & M_r &= (D_M'' + D_M' \bar{E}^*)(\kappa_r + \nu\kappa_\theta) + M_e, \\ N_\theta &= (D_N'' + D_N' \bar{E}^*)(\nu\varepsilon_r + \varepsilon_\theta), & M_\theta &= (D_M'' + D_M' \bar{E}^*)(\nu\kappa_r + \kappa_\theta) + M_e, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} D_N' &= \frac{E_0 h}{1 - \nu^2}, & D_M' &= \frac{E_0 h^3}{12(1 - \nu^2)}, & D_N'' &= 2c_{11}^E \delta, \\ D_M'' &= \frac{2}{3} c \left[\left(\frac{h}{2} + \delta \right)^3 - \left(\frac{h}{2} \right)^3 \right], & \nu &= -\frac{s_{12}^E}{s_{11}^E}, & M_e &= e(\delta + h)V. \end{aligned}$$

Остальные уравнения геометрически нелинейной теории колебаний пластинки [4] имеют вид:

геометрические

$$\varepsilon_r = \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial r} \right)^2, \quad \varepsilon_\theta = \frac{u}{r}, \quad \kappa_r = -\frac{\partial^2 w}{\partial r^2}, \quad \kappa_\theta = -\frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r}, \quad \vartheta = -\frac{\partial w}{\partial r},$$

уравнений движения

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r M_r) &= \frac{1}{r} M_\theta + Q, \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \left(Q + N_r \frac{\partial w}{\partial r} \right) \right] &= \bar{\rho} h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - p, \\ \frac{\partial}{\partial r} (r N_r) &= N_\theta, \end{aligned}$$

где $\bar{\rho} h = \rho_1 h + 2\rho_2 \delta$ — удельная масса элемента пластинки. Здесь не учитывается составляющая сил инерции, действующая в плоскости пластинки.

Введем безразмерные величины

$$r = a\rho, \quad h = a\hat{h}, \quad w = a\hat{w}, \quad \sigma = E_0\hat{\sigma}, \quad p = E_0q, \quad \kappa_r = \frac{1}{a}\hat{\kappa}_\rho, \quad \kappa_\theta = \frac{1}{a}\hat{\kappa}_\theta,$$

$$E = E_0\hat{E}, \quad \tau = \sqrt{\frac{E_0}{\rho ha}}t, \quad \omega t = \hat{\omega}\tau, \quad Q = E_0a\hat{Q}, \quad N_r = E_0a\hat{N}_\rho, \quad N_\theta = E_0a\hat{N}_\theta,$$

$$M_r = E_0a^2\hat{M}_\rho, \quad M_\theta = E_0a^2\hat{M}_\theta, \quad M_e = E_0a^2\hat{M}_e, \quad D'_N = E_0a\hat{D}'_N, \quad D'_M = E_0a^3\hat{D}'_M.$$

Исключив Q из уравнений движения, преобразуем полученное уравнение

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\partial(rM_r)}{\partial r} - M_\theta \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(rN_r) \frac{\partial w}{\partial r} \right] - \bar{\rho} h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + p(r, t) = 0$$

и остальные исходные уравнения к виду

$$\left(\hat{D}''_M + \hat{D}'_M \bar{E}^* \right) \Delta \Delta \hat{w} - \left(\hat{N}_\theta \frac{1}{\rho} \frac{\partial \hat{w}}{\partial \rho} + \hat{N}_\rho \frac{\partial^2 \hat{w}}{\partial \rho^2} \right) - \Delta \hat{M}_e + \frac{\partial^2 \hat{w}}{\partial \tau^2} - \hat{q}(\rho, \tau) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \hat{N}_\theta \right) = \hat{N}_\rho - \frac{1 - \nu^2}{2} \left(\hat{D}''_N + \hat{D}'_N \bar{E}^* \right) \left(\frac{\partial \hat{w}}{\partial \rho} \right)^2,$$

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \hat{N}_\rho \right) = \hat{N}_\theta,$$

где Δ — оператор $\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}$.

Граничные условия для шарнирного опирания наружного контура имеют вид

$$\text{при } r = 0 \quad Q = \vartheta = 0, \quad N_\theta = N_r,$$

$$\text{при } r = a \quad w = M_r = 0, \quad N_r = 0 \quad (N_\theta - \nu N_r = u = 0).$$

В [5] для получения приближенного решения такой системы интегро-дифференциальных уравнений в области частот, близких к резонансной частоте, используется подход, основанный на последовательном применении метода Бубнова–Галеркина и метода гармонического баланса. На первом этапе на основе приближенного представления резонансной формы колебаний в виде трехчленной полиномиальной функции методом Бубнова–Галеркина задача приводится к нелинейному интегро-дифференциальному уравнению относительно амплитуды.

Следуя в общем этой методике, представим прогиб пластинки в околорезонансной области в виде

$$\hat{w} \approx \eta(\tau) \hat{w}_1(\rho),$$

взяв за основу первую резонансную форму изгибных колебаний $\hat{w}_1(\rho)$ для соответствующей однородной электроупругой задачи

$$(\hat{E}_1 \hat{D}'_M + \hat{D}''_M) \Delta \Delta \hat{w} + \hat{\omega}^2 \hat{w} = 0$$

при тех же граничных условиях. Здесь $\widehat{E}_1(\omega)$ — действительная часть комплексного модуля. Определение $\widehat{w}_1(\rho)$ проводится численно и в таком виде используется в дальнейшем. Принято, что $\widehat{w}_1(0) = 1$.

Из уравнений плоской задачи видно, что усилия при этом будут иметь вид

$$\widehat{N}_\theta = N'_\theta(\rho) \left(\frac{D''_N}{D'_N} + \overline{E}^* \right) \eta^2(\tau), \quad \widehat{N}_\rho = N'_\rho(\rho) \left(\frac{D''_N}{D'_N} + \overline{E}^* \right) \eta^2(\tau),$$

где N'_ρ и N'_θ являются численным решением краевой задачи

$$\frac{\partial}{\partial \rho}(\rho N'_\theta) = N'_\rho - \frac{1 - \nu^2}{2} \widehat{D}'_N \left(\frac{\partial \widehat{w}_1(\rho)}{\partial \rho} \right)^2, \quad \frac{\partial}{\partial \rho}(\rho N'_\rho) = N'_\theta,$$

$$N'_\theta - N'_\rho = 0 \quad \text{при} \quad \rho = 0 \quad \text{и} \quad N'_\theta - \nu N'_\rho = 0 \quad \text{или} \quad N'_\rho = 0 \quad \text{при} \quad \rho = 1.$$

С учетом этого представления прогиба и усилий проинтегрируем по площади уравнение изгиба, предварительно умноженное на $\widehat{w}_1(\rho)$.

Полученное уравнение нелинейного осциллятора описывает вынужденные колебания системы вблизи резонансной частоты

$$u_2 \ddot{\eta} + \frac{\widehat{\omega}_1^2}{(\widehat{D}''_M + \widehat{D}'_M \overline{E}_1)} u_2 (\widehat{D}''_M + \widehat{D}'_M \overline{E}^*) \eta - u_3 \eta \left(\frac{D''_N}{D'_N} + \overline{E}^* \right) \eta^2 = \overline{Q},$$

где

$$u_1 = \int_0^1 \widehat{w}_1 \rho d\rho, \quad u_2 = \int_0^1 \widehat{w}_1 \widehat{w}_1 \rho d\rho, \quad u_3 = \int_0^1 \left(\widehat{N}_\theta \frac{1}{\rho} \frac{\partial \widehat{w}_1}{\partial \rho} + \widehat{N}_\rho \frac{\partial^2 \widehat{w}_1}{\partial \rho^2} \right) \widehat{w}_1 \rho d\rho,$$

$$\overline{Q} = q_1(\tau) u_q + m_1(\tau) u_E, \quad u_q = \int_0^1 q_0(\rho) \widehat{w}_1 \rho d\rho,$$

$$u_E = \frac{1}{m_1(\tau)} \int_0^1 \Delta \widehat{M}_e(\rho) \widehat{w}_1 \rho d\rho = \frac{1}{m_1(\tau)} \lim_{\rho_1 \rightarrow 1} \int_0^{\rho_1} \Delta \widehat{M}_e(\rho) \widehat{w}_1 \rho d\rho = -\widehat{\vartheta}_1(1).$$

Пусть $q_1(\tau) = (q' \cos \widehat{\omega} \tau - q'' \sin \widehat{\omega} \tau)$, $m_1(\tau) = (M' \cos \widehat{\omega} \tau - M'' \sin \widehat{\omega} \tau)$. Тогда уровень общей электромеханической нагрузки на осциллятор будет

$$\overline{Q} = \overline{q}' \cos \widehat{\omega} \tau - \overline{q}'' \sin \widehat{\omega} \tau,$$

где $\overline{q}' = (q' u_q + M' u_E)$, $\overline{q}'' = (q'' u_q + M'' u_E)$.

Отсюда видно, что при известной механической нагрузке уровнем возбуждения можно управлять электрическим способом путем выбора параметров M' и M'' или амплитуды электрического напряжения.

В соответствии с методом гармонической линеаризации для слабонелинейных задач используется представление амплитуды прогиба в виде гармонической функции времени, соответствующей закону изменения внешней нагрузки

$$\eta(\tau) = \eta' \cos \widehat{\omega} \tau - \eta'' \sin \widehat{\omega} \tau.$$

На таких историях деформации определяющие соотношения между деформациями и напряжениями формулируются с помощью комплексных модулей, и интегральные операторы принимают вид

$$\begin{aligned}\bar{E} * (\cos \hat{\omega}\tau) &= \hat{E}_1 \cos \hat{\omega}\tau - \hat{E}_2 \sin \hat{\omega}\tau, \\ \bar{E} * (\sin \hat{\omega}\tau) &= \hat{E}_2 \cos \hat{\omega}\tau + \hat{E}_1 \sin \hat{\omega}\tau, \quad \bar{E} * (1) = \hat{E}_\infty, \\ \bar{E} * (\cos^2 \hat{\omega}\tau) &= \frac{1}{2}\hat{E}_\infty + \frac{1}{2}\hat{E}_{11} \cos 2\hat{\omega}\tau - \frac{1}{2}\hat{E}_{22} \sin 2\hat{\omega}\tau, \\ \bar{E} * (\sin^2 \hat{\omega}\tau) &= \frac{1}{2}\hat{E}_\infty - \frac{1}{2}\hat{E}_{11} \cos 2\hat{\omega}\tau + \frac{1}{2}\hat{E}_{22} \sin 2\hat{\omega}\tau.\end{aligned}$$

Здесь E_∞ — длительный модуль вязкоупругого материала; E_1 и E_2 — компоненты комплексного модуля при частоте колебаний $\hat{\omega}$, а E_{11} и E_{22} — компоненты комплексного модуля при частоте колебаний $2\hat{\omega}$.

Представив нелинейный член в уравнении осциллятора двумя элементами из его разложения в ряд Фурье, а именно членами с $\sin \hat{\omega}\tau$ и $\cos \hat{\omega}\tau$, получим систему двух уравнений

$$\begin{aligned}(\hat{\omega}_c^2 - \hat{\omega}^2)\eta' + \left(-\frac{\hat{E}_2}{\hat{E}_1 + D_M''/D_M'}\hat{\omega}_1^2 - \frac{u_3}{u_2}\hat{E}_{22}\frac{|\eta|^2}{4}\right)\eta'' &= \frac{\bar{q}'}{u_2}, \\ \left(-\frac{\hat{E}_2}{\hat{E}_1 + D_M''/D_M'}\hat{\omega}_1^2 - \frac{u_3}{u_2}\hat{E}_{22}\frac{|\eta|^2}{4}\right)\eta' - (\hat{\omega}_c^2 - \hat{\omega}^2)\eta'' &= \frac{\bar{q}''}{u_2},\end{aligned}$$

где

$$\hat{\omega}_c^2 = \hat{\omega}_1^2 + \xi|\eta|^2, \quad \xi = \frac{u_3}{2u_2} \left(E_\infty + \frac{D_N''}{D_N'} + \frac{1}{2} \left(E_{11} + \frac{D_N''}{D_N'} \right) \right) -$$

уравнение скелетной кривой, представляющей зависимость квадрата собственной частоты колебаний консервативной системы от амплитуды.

Возводя эти уравнения в квадрат и складывая, получаем

$$\left[(\hat{\omega}_c^2 - \hat{\omega}^2)^2 + \left(-\frac{\hat{E}_2}{\hat{E}_1 + D_M''/D_M'}\hat{\omega}_1^2 - \frac{u_3}{u_2}\hat{E}_{22}\frac{|\eta|^2}{4} \right)^2 \right] |\eta|^2 = \frac{(\bar{q}')^2 + (\bar{q}'')^2}{u_2^2}$$

или

$$\hat{\omega}^2 = \hat{\omega}_1^2 + \xi|\eta|^2 \pm \sqrt{\frac{(\bar{q}')^2 + (\bar{q}'')^2}{u_2^2|\eta|^2} - \left(\frac{\hat{E}_2}{\hat{E}_1 + D_M''/D_M'}\hat{\omega}_1^2 + \frac{u_3}{u_2}\hat{E}_{22}\frac{|\eta|^2}{4} \right)^2}.$$

Приняв в околорезонансной области значения компонентов комплексных модулей не зависящими от частоты и для E_1 , E_2 отнесенными к частоте ω_1 , а E_{11} , E_{22} — к частоте $2\omega_1$, последнее выражение можем рассматривать как зависимость квадрата частоты от амплитуды.

В качестве примера применения изложенной методики рассмотрим установившиеся осесимметричные колебания шарнирно опертой трехслойной пластинки при следующих значениях параметров: $a = 0,1$ м, $h = 0,0025$ м, $\delta = 0$, $\rho_2 = 2500$ кг/м³. Материал пьезослоев

$PZT - 4$, а свойства вязкоупругого материала основного слоя определяются стандартной моделью вязкоупругого тела и характеризуются значениями модулей $E_0 = 1,1 \cdot 10^{11}$ Па, $E_\infty = 10^{11}$ Па и постоянной времени в релаксационном процессе $p_1 = 10^{-6}$ с. Решение краевых задач и определение коэффициентов уравнения, описывающего колебания осциллятора, проводилось численными методами. Первая собственная частота электроупругой пластинки с короткозамкнутыми электродами $\bar{\omega}_1 = 0,00587$. Колебания возбуждаются равномерно распределенной по площади пластины электромеханической нагрузкой с амплитудой, эквивалентной 140 Па механической нагрузки. При этом относительный прогиб пластинки w/h равен 0,94, резонансная кривая имеет характерный для жесткой нелинейности вид и область неоднозначности при $\bar{\omega}/\bar{\omega}_1 = 1,003$.

1. Гололобов В. И. Соотношения упругости для многослойных пьезокерамических пластин // Докл АН УССР. Сер. А. – 1983. – № 11. – С. 38–40.
2. Гринченко В. Т., Улитко А. Ф., Шульга Н. А. Механика связанных полей в элементах конструкций. Т. 5. Электроупругость. – Киев: Наук. думка, 1989. – 280 с.
3. Кристенсен Р. Введение в теорию вязкоупругости. – Москва: Мир, 1974. – 338 с.
4. Григоренко Я. М., Мукоед А. П. Решение нелинейных задач теории оболочек на ЭВМ. – Киев: Вища шк., 1983. – 286 с.
5. Карнаузов В. Г., Карнаухова Т. В., Зражевская В. Ф. Активное демпфирование резонансных изгибных колебаний гибкой шарнирно опертой вязкоупругой пластины при помощи пьезоактуаторов // Теорет. и прикл. механика. – 2009. – Вып. 45. – С. 114–123.

Институт механики им. С. П. Тимошенко
НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 20.01.2012

В. І. Гололобов

Осесиметричні резонансні коливання гнучкої шарнірно опертої в'язкопружної пластини з п'єзощарами

Из застосуванням методу Бубнова–Гальоркіна розглянуто задачу про вимушені резонансні коливання круглої гнучкої в'язкопружної пластини при електромеханічному навантаженні. Наведено результати розрахунку резонансних характеристик пластини з двома п'єзоперетворювачами з урахуванням геометричної нелінійності.

V. I. Gololobov

Axisymmetric resonance vibrations of a flexible hinged viscoelastic laminated piezoelectric plate

By the Bubnov–Galerkin method, the problem of forced resonance vibrations of a flexible circular viscoelastic plate under an electromechanical load is considered. The results of calculations of the resonance characteristics of a plate with two piezoelectric transducers with regard for a geometric nonlinearity are presented.

Н. В. Никитина

О бифуркациях и аналитическом решении в модели Рикитаки

(Представлено академиком НАН Украины А. А. Мартынюком)

В рамках качественного анализа установлено существование плоского аттрактора и бифуркации траектории модели Рикитаки. В координатах, связанных с плоскостью, получено аналитическое решение. Определена сигнатура спектра характеристических показателей Ляпунова в случае неустойчивой орбиты движения.

Методы качественной теории в нелинейной механике берут свое начало в работах Пуанкаре, Андронова и получили развитие в современных работах [1, 2]. Данная работа связана с проблемой классификации физических объектов, порождающих многомерные аттракторы, а также с анализом простых и сложных движений многомерных систем, которые вызываются бифуркационным процессом и неустойчивостью орбит [3]. В работе качественный анализ связан с симметрией аттракторов и уравнением в вариациях. Прикладная задача, которая рассмотрена в работе, относится к базовым моделям в теории земного динамо [4].

Предварительные сведения. Палеомагнитные исследования показали, что магнитное поле Земли претерпевает изменение направления (полярности) на обратное. В течение последних сотен миллионов лет смена направления происходит нерегулярным образом. Помимо подробной магнитогидродинамической модели построены простые модели. Базовой моделью в теории земного динамо является модель Рикитаки, предложенная в 1955 году [4]. Эта модель описывает систему из двух дисков динамо, соединенных, как показано на рис. 1. Диски этой модели могут рассматриваться как имитация двух больших вихрей в ядре Земли. Рассмотрим возбуждения полей в двух дисках. Ток I_1 вызывает магнитное поле, в котором второй диск индуцирует ток I_2 . Этот ток в свою очередь вызывает поле,

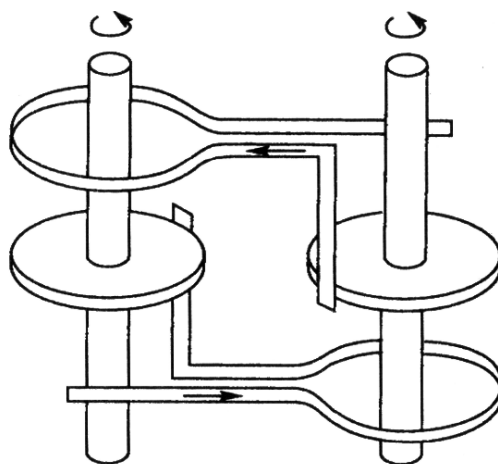


Рис. 1

в котором первый диск индуцирует ток I_1 . Нелинейность возникает при учете обратной реакции момента электромагнитной силы на движение, т. е. на угловые скорости Ω_1 и Ω_2 .

Согласно законам механики и электродинамики, система уравнений имеет вид

$$L \frac{dI_1}{d\tau} + RI_1 = MI_2\Omega_1, \quad L \frac{dI_2}{d\tau} + RI_2 = MI_1\Omega_2. \quad (1)$$

Здесь L — индуктивность дисков; R — сопротивление контуров; M — взаимная индуктивность между контуром и диском. Система (1) есть уравнения динамо. Система

$$J \frac{d\Omega_1}{d\tau} = G - MI_1I_2, \quad J \frac{d\Omega_2}{d\tau} = G - MI_1I_2, \quad (2)$$

где J — момент инерции дисков; G — момент внешних сил, описывает обратную реакцию электромагнитных сил на движение. Введем безразмерные переменные, следуя Рикитакки [4], x_1, x_2, x_3, x_4, t

$$I_1 = x_1 \sqrt{\frac{G}{M}}, \quad I_2 = x_2 \sqrt{\frac{G}{M}}, \quad \Omega_1 = x_3 \sqrt{\frac{GL}{JM}}, \quad \Omega_2 = x_4 \sqrt{\frac{GL}{JM}}, \quad \tau = t \sqrt{\frac{JL}{MG}}.$$

Система (1), (2) в безразмерном виде запишется так:

$$\frac{dx_1}{dt} = -\mu x_1 + x_2 x_3, \quad \frac{dx_2}{dt} = -\mu x_2 + x_1 x_4, \quad \frac{dx_3}{dt} = 1 - x_1 x_2, \quad \frac{dx_4}{dt} = 1 - x_1 x_2. \quad (3)$$

Здесь $\mu = R\sqrt{J/(GLM)}$ — коэффициент омической диссипации. Из системы (3) вытекает, что разность угловых скоростей есть величина постоянная $x_3 - x_4 = a$, где $a = \text{const}$. Предположим, что $a = 0$, тогда $x_3 = x_4$. Найдены особые точки системы (3): точка A ($x_1 = 1, x_2 = 1, x_3 = \mu$); точка B ($x_1 = -1, x_2 = -1, x_3 = \mu$).

Условия существования замкнутой траектории. Введем новые переменные $x = x_1 - 1, y = x_2 - 1, z = x_3 - \mu$ и составим уравнения движения относительно особой точки A

$$\frac{dx}{dt} = -\mu(x - y) + z + yz, \quad \frac{dy}{dt} = -\mu(y - x) + z + xz, \quad \frac{dz}{dt} = -(x + y) - xy. \quad (4)$$

Представим систему (4) в виде

$$\frac{dx}{dt} = F_x, \quad \frac{dy}{dt} = F_y, \quad \frac{dz}{dt} = F_z. \quad (5)$$

Проанализируем выполнение в трехмерной системе (5) условий замыкания траекторий в плоскостях Axz, Ayz, Axy . Для этого привлечем принцип симметрии и кососимметрии [5, 6].

На плоскости Axz выполняются условие четности функции $F_z(x, z)$ относительно z и нечетности функции $F_x(x, z)$ относительно z $F_x(x, -z) = -F_x(x, z), F_z(x, -z) = F_z(x, z)$. Тогда в системе (5) на плоскости Axz существует замкнутая кривая и ось Ax является осью симметрии.

На плоскости Ayz выполняются условие четности функции $F_z(y, z)$ относительно z и нечетности функции $F_y(y, z)$ относительно z $F_y(y, -z) = -F_y(y, z), F_z(y, -z) = F_z(y, z)$. Тогда

в системе (5) на плоскости Ayz существует замкнутая кривая и ось Ay является осью симметрии.

На плоскости Axy выполняются условия кососимметрии функций $F_x(x, y)$ и $F_y(x, y)$ $F_x(-x, y) = -F_x(x, -y)$, $F_y(-x, y) = -F_y(x, -y)$. Проанализируем поведение траектории уравнений (3), приведенных к особой точке B . Также выполняются условия симметрии в плоскостях Bxz , Byz и условие кососимметрии в плоскости Bxy . В системе (5) на плоскости Axy замкнутая кривая может иметь оси кососимметрии Ax , Ay . Можно предположить, что траектория проецируется на плоскость Axy в виде отрезка прямой вдоль линии AB . Если это предположение будет доказано, то имеет место существование плоского аттрактора.

Введем малые отклонения δx , δy , δz в системе (4) от частных решений $\bar{x}(t)$, $\bar{y}(t)$, $\bar{z}(t)$ и составим уравнения в вариациях $\delta x = x - \bar{x}$, $\delta y = y - \bar{y}$, $\delta z = z - \bar{z}$

$$\begin{aligned} \frac{d\delta x}{dt} &= -\mu\delta x + (\mu + \bar{z})\delta y + (1 + \bar{y})\delta z, & \frac{d\delta y}{dt} &= (\mu + \bar{z})\delta x - \mu\delta y + (1 + \bar{x})\delta z, \\ \frac{d\delta z}{dt} &= -(1 + \bar{y})\delta x - (1 + \bar{x})\delta y. \end{aligned} \quad (6)$$

Характеристическое уравнение системы в вариациях (6) имеет вид

$$\begin{aligned} \lambda^3 + 2\mu\lambda^2 + \lambda(\mu^2 + (1 + \bar{x})^2 + (1 + \bar{y})^2 - (\mu + \bar{z})^2) + 2(\mu + \bar{z})(1 + \bar{x})(1 + \bar{y}) + \\ + \mu((1 + \bar{x})^2 + (1 + \bar{y})^2) = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Положим значение параметра $\mu = 1$. Исследование с помощью уравнения (7) показало, что точка A ($\bar{x} = 0, \bar{y} = 0, \bar{z} = 0$) и также точка B ($\bar{x} = -2, \bar{y} = -2, \bar{z} = 0$) — устойчивые узел-центры, для которых λ_1, λ_2 — мнимые величины, $\lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{2}$, $\lambda_3 = -2$. Точка C ($\bar{x} = -1, \bar{y} = -1, \bar{z} = 0$) лежит на разделе областей существования двух видов семейств замкнутых траекторий системы (4). В точке C уравнение (7) имеет корни $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = -2\mu$. Система (4) *несамовозбуждаемая*.

Переход к новым переменным. Качественный анализ. Перейдем к координатам, которые более удобны тем, что фазовый рисунок может проецироваться на фазовую плоскость в натуральную величину. Введем новые оси Au , Av поворотом старых Ax , Ay на угол $\alpha = \pi/4$. Новые координаты связаны со старыми следующим образом:

$$u = x \cos \alpha + y \sin \alpha, \quad v = -x \sin \alpha + y \cos \alpha.$$

В новой системе координат $Auvz$ уравнения (4) примут вид

$$\frac{du}{dt} = \sqrt{2}z + uz, \quad \frac{dv}{dt} = -2\mu v - vz, \quad \frac{dz}{dt} = -\sqrt{2}u - \frac{u^2}{2} + \frac{v^2}{2}. \quad (8)$$

Возвратимся к вопросу о замыкании траектории. Первое уравнение системы (8) не содержит в правой части переменную v , второе уравнение не содержит переменную u . Второе и третье уравнения системы (8) связаны лишь нелинейными составляющими. При такой характеристике правых частей системы (8) *замкнутые траектории системы (8) располагаются в плоскости Auz* . Таким образом, *замкнутая траектория в трехмерном пространстве проецируется на плоскость Axy в виде отрезка прямой под углом $\pi/4$ к оси Ax* .

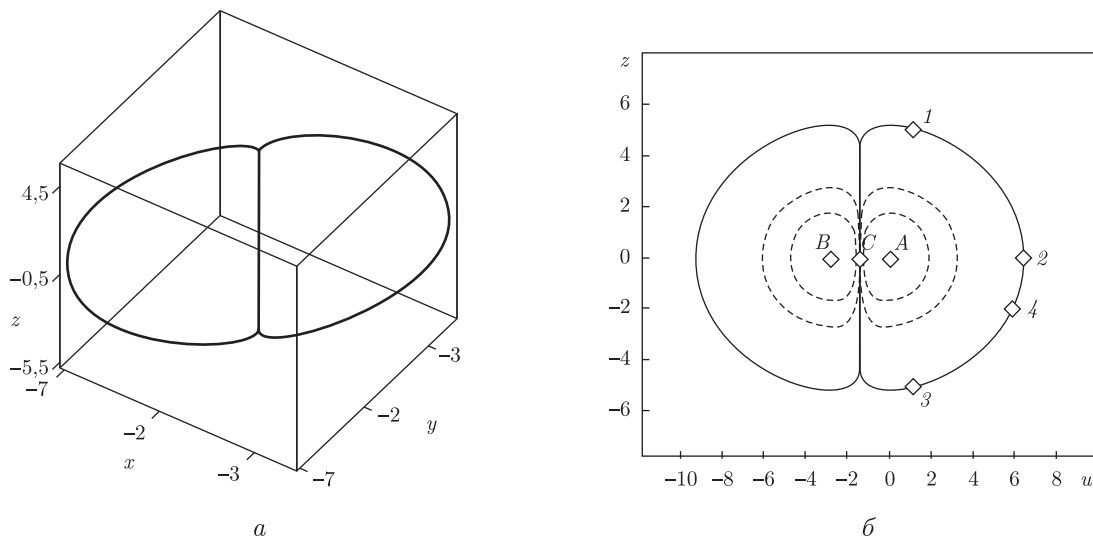


Рис. 2

Введем малые отклонения δu , δv , δz в системе (8) от частных решений $\bar{u}(t)$, $\bar{v}(t)$, $\bar{z}(t)$ и составим уравнения в вариациях

$$\frac{d\delta u}{dt} = \bar{z}\delta u + (\sqrt{2} + \bar{u})\delta z, \quad \frac{d\delta v}{dt} = -(2\mu + \bar{z})\delta v - \bar{v}\delta z, \quad \frac{d\delta z}{dt} = -(\sqrt{2} + \bar{u})\delta u + \bar{v}\delta v. \quad (9)$$

Так как траектория располагается в плоскости Auz , то $\bar{v} = 0$. Характеристическое уравнение системы в вариациях (9) имеет вид

$$\lambda^3 + 2\mu\lambda^2 + \lambda((\bar{u} + \sqrt{2})^2 - 2\mu\bar{z} - \bar{z}^2) + (2\mu + \bar{z})(\bar{u} + \sqrt{2})^2 = 0. \quad (10)$$

Здесь учтено, что $\bar{v} = 0$.

Приведем анализ качества точек замкнутой кривой, построенной численным способом. В системе координат $Oxyz$, Auz замкнутые кривые не содержат точку C . Наиболее отдаленные от узел-центра замкнутые кривые (рис. 2, a , b — сплошная линия) определяют две области устойчивых траекторий. Между двумя замкнутыми кривыми проходит одна ось Cz . На уровне физических представлений: *точка C не может принадлежать двум замкнутым траекториям.*

С помощью уравнения (10) находим точки, в которых изменяется качество корней. На кривой от точки, близкой к C , до точки 1 (не включая точек на концах отрезка) по ходу часовой стрелки имеют место действительные корни (рис. 2, a , b) $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 > 0$, $\lambda_3 < 0$. В точке 1 происходит исчезновение двух кратных действительных корней и рождение двух комплексных ($\text{Re } \lambda_{1,2} > 0$). Внутри траектории от точки 1 до точки 2 имеют место пара комплексных корней с положительной действительной частью и действительный корень $\lambda_3 < 0$. В точке 2 происходит смена знака действительной части с плюса на минус. Далее внутри отрезка кривой 2–3 комплексные корни имеют отрицательный знак действительной части. В точке 3 происходит исчезновение комплексных корней и рождение двух действительных. В точке 4 наблюдается исчезновение корня $\lambda_3 < 0$ и рождение корня $\lambda_3 > 0$.

Для всего многообразия замкнутых траекторий (на рис. 2, b замкнутые траектории изображены также штриховой линией) существует подобная симметрия, с помощью которой

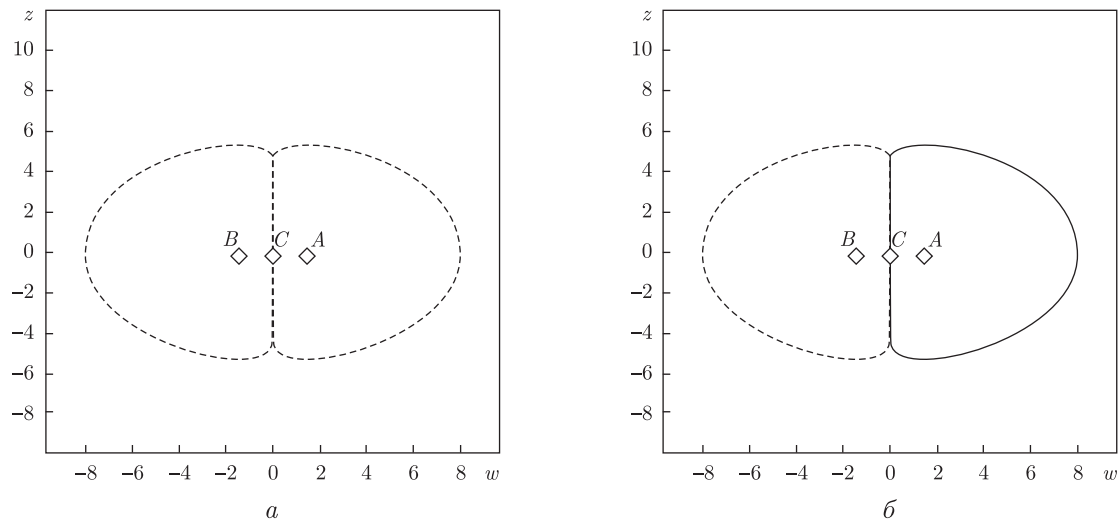


Рис. 3

доказывается замыкание траекторий. При такой симметрии сигнатура двух характеристических показателей Ляпунова (ХПЛ) имеет вид двух нулей. Распространение симметрии на корни уравнения (10) формирует ХПЛ. Геометрическая симметрия фазовых траекторий системы (8) такая, что каждой точки области сверху (относительно оси Au) соответствует точка внизу области. При сложении корней уравнения (10) на круговой траектории имеем следующую картину. Корни λ_1, λ_2 определяют в сигнатуре спектра ХПЛ два первых знака $(0, 0,)$, что соответствует *эллиптической составляющей движения*. Корень λ_3 определит притягивающий характер траекторий и связан преимущественно с координатой v . Сигнатура спектра ХПЛ замкнутых кривых имеет вид $(0, 0, -)$. Таким образом, геометрическая симметрия траекторий, симметрия распределения корней позволили установить орбитальную устойчивость и притягивающий характер замкнутых траекторий. Линейная система, соответствующая системе (8), распадается, так что первое и третье уравнения определяют точку A как центр $du/dt = \sqrt{2}z, dz/dt = -\sqrt{2}u$. Второе уравнение $dv/dt = -2\mu v$ определяет притягивающий характер точки A , делая ее узел-центром.

Аналитическое решение. Введем координату $w = u + \sqrt{2}$ и запишем систему (8) в системе координат $Cwvz$

$$\frac{dw}{dt} = wz, \quad \frac{dv}{dt} = -2\mu v - vz, \quad \frac{dz}{dt} = 1 - \frac{w^2}{2} + \frac{v^2}{2}. \quad (11)$$

Изобразим на рис. 3, *a* штриховой линией замкнутые кривые, построенные численно, которым в начальный момент времени соответствуют следующие значения координат: $w(0) = 0,000001; v(0) = 0; z(0) = 0$ и $w(0) = -0,000001; v(0) = 0; z(0) = 0$. В общем случае не известно аналитическое решение уравнений (3). Единственная ситуация $\mu = 0, a = 0$, в которой известно точное решение [4].

Так как доказано, что траектория лежит в плоскости Auz , также в плоскости Cwz и $\bar{v} = 0$, то аттрактору могут соответствовать два уравнения

$$\frac{dw}{dt} = wz, \quad \frac{dz}{dt} = 1 - \frac{w^2}{2}. \quad (12)$$

Исключив время, разделим переменные в системе (12)

$$z^2 = 2 \ln |w| - \frac{w^2}{2} + D. \quad (13)$$

Здесь D — постоянная интегрирования. Предположим, что движение начинается с точки C . Определим D из следующих условий:

$$w(0) = 0; \quad z(0) = 0. \quad (14)$$

Полученный результат — $D = \infty$ подтверждает физическое представление: точка C не может принадлежать двум замкнутым траекториям. В данном случае система (12) показывает границу аттрактора

$$z = \pm \sqrt{2 \ln |w| - \frac{w^2}{2} + D}. \quad (15)$$

Здесь $D = -2 \ln |w(0)| + w(0)^2/2$, для начальных условий $0 < w(0) \leq w_k$; $z(0) = 0$, где w_k — конечное значение. Решение (15) можно назвать точным, однако при начальных условиях (14) имеем $z^2 \rightarrow \infty$, а не $z \rightarrow \infty$. Последнее показывает численное решение. Причина кроется в том, что система (12) является упрощенной и игнорирование уравнения относительно v в системе (12) не позволяет найти все интегралы системы (11). На рис. 3, *a* показано численное решение с начальными условиями (14). На численное решение (рис. 3, *a*) наложено аналитическое решение (15), которое при $t = 0$ имеет следующие значения координат: $w(0) = 0,000001$; $z(0) = 0$. Все это изображено на рис. 3, *б*.

При переходе к упрощенной системе (12) получено аналитическое решение (15), несмотря на диссипацию. Произошло разделение характеристических показателей: два показателя связаны с границей аттрактора и порождают сигнатуру спектра $(0, 0, \dots)$; третий — с диссипацией и определяет притяжение к плоскости аттрактора. Кроме замкнутых траекторий, существует решение, уходящее на бесконечность. Упрощенная система показывает тенденцию ухода на бесконечность, но не показывает знак бесконечности.

Подставим в характеристическое уравнение (10) $w = u + \sqrt{2}$ и примем $w = 0$, тогда на оси Cz характеристические показатели вычисляются так:

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_{2,3} = -\mu \pm \sqrt{\mu^2 + \bar{z}(2\mu + \bar{z})}. \quad (16)$$

Один характеристический показатель ($\lambda_3 < 0$), согласно (16), на всей оси Cz показывает притяжение траектории. Начальные условия (14) порождают решение, которое, попадая на ось Cz в точку C , уходит на ∞ , так как для $z > 0$ имеет место $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 > 0$, $\lambda_3 < 0$, причем геометрически λ_3 соответствует притяжению к оси Cz , которое направлено вдоль оси Cv .

Неустойчивость орбиты аттрактора. На рис. 3, *б* замкнутые траектории относительно особых точек A и B ограничивают области многообразий замкнутых траекторий. Эти области разделяются осью Cz . Если начальное положение траектории находится не в точке C и вне областей многообразий правой и левой полуплоскости, то траектория обладает избытком энергии. Изображающая точка при избытке энергии стремится, преодолевая ось Cz , совершить переход из одной области устойчивых движений в другую. В двух точках на оси Cz (с координатами $z = -2$, $z = 0$) характеристические показатели, согласно (16), имеют вид:

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = 0, \quad \lambda_3 = -2. \quad (17)$$

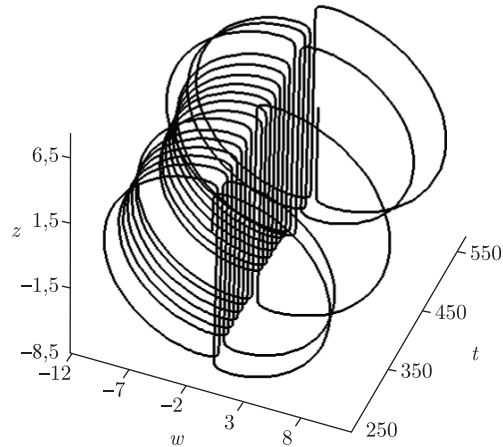


Рис. 4

Возможно, что через две точки (17) на Cz траектория переходит из одной полуплоскости в другую, если система обладает избыточной энергией. Стохастика движения при этом возникает из-за того, что существует не один путь перехода из области в область. Если бы путь перехода был один, то через некоторый отрезок времени (переходный период) траектория замкнулась относительно двух узлов-центров A и B , образуя устойчивую орбиту движения.

На рис. 4 приведен фрагмент орбитально неустойчивой траектории системы (11) (начальные возмущения $w(0) = 8,8$; $v(0) = 0$; $z(0) = 0$). В сигнатуре спектра ХПЛ появляется знак плюс $(+, 0, -)$.

Таким образом, в работе приведены достаточные условия существования двух многообразий замкнутых траекторий в трехмерном пространстве на основе принципа симметрии и кососимметрии. Доказано, что аттрактор плоский. При переходе к координатам, связанным с плоскостью движения, появляется возможность исключить время и разделить переменные.

В рассмотренной задаче при равных между собой угловых скоростях дисков (условие $a = 0$), которые имитируют вихри в ядре Земли, вызывается стохастическое изменение направления вектора угловой скорости. Это связано с избыточной начальной энергией, которая вызывает орбитальную неустойчивость.

1. Шильников Л. П., Шильников А. Л., Тураев Д. В., Чуа Л. Методы качественной теории в нелинейной динамике. Ч. 1. – Москва: Изд. Ин-та компьют. исследований, 2004. – 416 с.
2. Шильников Л. П., Шильников А. Л., Тураев Д. В., Чуа Л. Методы качественной теории в нелинейной динамике. Ч. 2. – Москва: Изд. Ин-та компьют. исследований, 2009. – 546 с.
3. Nikitina N. V. Estimating the chaos boundaries of a double pendulum // Int. Appl. Mech. – 2011. – **47**, No 5. – P. 590–599.
4. Кук А., Робертс П. Система двухдискового динамо Рикитаци // Странные аттракторы. – Москва: Мир, 1981. – С. 164–292.
5. Немыцкий В. В., Степанов В. В. Качественная теория дифференциальных уравнений. – Москва; Ленинград: Гостехтеориздат, 1949. – 550 с.
6. Никитина Н. В. О принципе кососимметрии // Доп. НАН України. – 2008. – № 2. – С. 69–72.

Н. В. Нікітіна

Про біфуркації та аналітичний розв'язок в моделі Рікітакі

У рамках якісного аналізу встановлено існування плоского атратора та біфуркації траєкторії в моделі Рікітакі. В координатах, зв'язаних з площиною, наведено аналітичний розв'язок. Знайдено сигнатуру спектра характеристичних показників Ляпунова у випадку нестійкої орбіти руху.

N. V. Nikitina

About bifurcations and an analytical solution in the Rikitaki model

Within the framework of a qualitative analysis, the existence of a flat attractor and the bifurcation of a trajectory in the Rikitaki model is established. An analytical solution in the coordinates on a plane is found. The signature of the spectrum of characteristic Lyapunov indices is found for an unsteady orbit of motion.



УДК 621.315.592.3

© 2012

П. І. Баранський, Г. П. Гайдар

Визначення параметра анізотропії термоерс захоплення в багатодолинних напівпровідниках

(Представлено членом-кореспондентом НАН України П. М. Томчуком)

Розглянуто один із способів визначення параметра анізотропії термоерс захоплення електронів фононами $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ у багатодолинних кристалах n -Ge і n -Si. Встановлено зв'язок термоерс у недеформованому (α_0) і в сильно деформованому (α_{∞}) кристалі (при механічному навантаженні $X \rightarrow \infty$) з поперечною фононною компонентою (α_{\perp}^{ϕ}) і з параметром анізотропії термоерс захоплення електронів фононами M , а також зв'язок термоерс захоплення у недеформованому кристалі з параметром анізотропії рухливості електронів у рамках окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$. Наведено формули для розрахунку концентраційних залежностей параметра анізотропії рухливості $K = K(n_e, N_d, N_a)$ у випадку невиродженого електронного газу в кристалах.

Внаслідок кубічної симетрії кристалів Ge і Si у природному (тобто, механічно не напруженому) стані вони характеризуються ізотропністю всіх кінетичних коефіцієнтів. Отже, всі кінетичні явища в цих кристалах (у тому числі й термоерс) описуються при названих умовах за допомогою скалярних величин. Зокрема на макрорівні (тобто на рівні кристала) скаляром є і коефіцієнт термоерс. В одновісно пружно-деформованих кристалах Ge і Si ситуація змінюється і коефіцієнт термоерс стає тензорною величиною.

На прикладі багатодолинного напівпровідника n -Ge розглянемо задачу визначення параметра анізотропії термоерс в області захоплення електронів фононами

$$M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}, \quad (1)$$

де $\alpha_{\parallel}^{\phi}$, α_{\perp}^{ϕ} — поздовжня і поперечна (відносно довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда) компоненти термоерс, обумовленої захопленням електронів, які належать одному еліпсоїду, довгохвильовими фононами. Параметр M є фундаментальним параметром теорії анізотропного розсіяння, узагальненої на випадок захоплення електронів фононами. З'ясуємо методику визначення параметра M за результатами вимірювань діагональних компонентів тензора термоерс.

Оскільки у загальному випадку експериментально вимірювані значення коефіцієнта диференційної термоерс α складаються з суми двох компонент

$$\alpha = \alpha^e + \alpha^\phi, \quad (2)$$

де α^e і α^ϕ — електронна і фононна складові термоерс відповідно, а також зважаючи на те, що в пружно-деформованому вздовж кристалографічного напрямку $[111]$ n -Ge термоерс може бути наведена у вигляді тензора другого рангу $\hat{\alpha}$ у лабораторній системі координат (пов'язаній з осями ізоенергетичного еліпсоїда, розміщеного на осі деформації) [1]

$$\hat{\alpha} = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} \end{vmatrix}, \quad (3)$$

де $\alpha_{11} = \alpha_{22}$ і α_{33} — діагональні члени тензора термоерс, то $\alpha_{11} = \alpha_{11}^e + \alpha_{11}^\phi$ і $\alpha_{33} = \alpha_{33}^e + \alpha_{33}^\phi$. Зауважимо, що при одновісній пружній деформації n -Ge в напрямку $[111]$ мінімум енергії, орієнтований в цьому напрямку, зміщується вниз по шкалі енергій, тоді як три останні мінімуми зміщуються вгору. Позначимо через N_1 концентрацію носіїв струму в мінімумі, який опускається, а через N_2 — концентрацію носіїв струму в будь-якому з трьох мінімумів, які піднімаються.

Можна показати [2], що при довільному за величиною механічному навантаженні X на кристалі (n -Ge) за умови $X//J//\langle 111 \rangle$ (де J — струм)

$$\alpha_{33} - \alpha_{33}^e = \alpha_{\perp}^{\phi} \frac{M + \gamma \frac{8K + M}{3}}{1 + \gamma \frac{8K + 1}{3}}. \quad (4)$$

Тут $\gamma = N_2/N_1 = e^{-\frac{4}{9} \frac{\Xi_u S_{44}}{kT} X} = e^{-0,120 \frac{X}{T}}$ — відношення концентрацій носіїв в еліпсоїдах для довільних значень X і T ; Ξ_u — константа деформаційного потенціалу зсуву; S_{44} — коефіцієнт податливості (для n -Ge $S_{44} = 1,46 \cdot 10^{-11}$ Па $^{-1}$); K — параметр анізотропії рухливості електронів у рамках окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда. Параметр K задається виразом

$$K = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{3}{2} \frac{\rho_{\infty}}{\rho_0} - \frac{1}{2}, \quad (5)$$

де μ_{\parallel} , μ_{\perp} — рухливості носіїв заряду вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно; $\rho_0(X = 0)$ і $\rho_{\infty} = \lim_{X \rightarrow \infty} \rho(X)$ — питомий опір недеформованого (при $X = 0$) зразка і при $X \rightarrow \infty$ (тобто, $\rho = \rho(X)$ в області насичення).

З (2) видно, що фононні складові термоерс без тиску ($X = 0$) і в насиченні ($X \rightarrow \infty$), тобто α_0^{ϕ} і α_{∞}^{ϕ} , дорівнюють експериментально вимірюваним даним (α_0 і α_{∞}) без електронної складової (α_4^e і α_1^e — у випадку недеформованого і сильно деформованого кристала відповідно):

$$\begin{aligned} \alpha_0^{\phi} &= \alpha_0 - \alpha_4^e, \\ \alpha_{\infty}^{\phi} &= \alpha_{\infty} - \alpha_1^e \equiv \alpha_{\parallel}^{\phi}. \end{aligned} \quad (6)$$

Електронну (дифузійну) складову термоерс α_N^e можна визначити за формулою Писаренка [3]:

$$\alpha_N^e = \frac{k}{e} \left[2 + \ln \frac{2(2\pi m^* kT)^{3/2}}{n_0 h^3} \right], \quad (7)$$

де n_0 — концентрація носіїв заряду; e — заряд електрона; k — стала Больцмана; T — температура; h — стала Планка; $m^* = N^{2/3} \sqrt[3]{m_{\parallel} m_{\perp}^2}$ — ефективна маса густини станів; N — число ізоенергетичних еліпсоїдів, зокрема для n -Ge $N = \begin{cases} 4 & \text{при } X = 0, \\ 1 & \text{при } X = 0,6 \text{ ГПа і } T = 77 \text{ К.} \end{cases}$

За безпосередньо виміряними значеннями α_{∞} можна знайти, згідно з (6), значення $\alpha_{\parallel}^{\phi} = \alpha_{\infty} - \alpha_1^e$. А за допомогою формули (1) знаходимо поперечну фононну компоненту:

$$\alpha_{\perp}^{\phi} = \alpha_{\parallel}^{\phi} / M. \quad (8)$$

З рівнянь (6) і (8) одержимо

$$\alpha_{\infty} - \alpha^e = \alpha_{\parallel}^{\phi} = \alpha_{\perp}^{\phi} M. \quad (9)$$

При відсутності на досліджуваному зразку одновісного механічного навантаження ($X = 0$) зі співвідношення (4), опустивши індекси 33, одержимо таке рівняння:

$$\alpha_0^{\phi} = \alpha_0 - \alpha^e = \alpha_{\perp}^{\phi} \frac{2K + M}{2K + 1}. \quad (10)$$

Рівняння (10) пов'язує (через параметри анізотропії K і M) фононну термоерс усього кристала (при $X = 0$) з однією із складових фононної термоерс в окремо взятому ізоенергетичному еліпсоїді α_{\perp}^{ϕ} .

Таким чином, маємо систему двох рівнянь (9) і (10) з двома невідомими величинами (α_{\perp}^{ϕ} і M). Щоб розв'язати цю систему і визначити параметр анізотропії термоерс захоплення M , потрібно спочатку знайти величину параметра анізотропії рухливості K . Це можна зробити кількома методами. По-перше, за експериментально виміряною величиною п'єзоопору в області насичення (ρ_{∞}) і величиною цього опору без механічного навантаження (ρ_0) обчислити величину параметра анізотропії рухливості K , скориставшись формулою (5). Інший можливий метод знаходження параметра K — використання формули

$$K = \frac{m_{\parallel} \langle \tau_{\perp} \rangle}{m_{\perp} \langle \tau_{\parallel} \rangle} = \frac{K_m}{K_{\tau}}, \quad (11)$$

оскільки значення параметра анізотропії ефективної маси $K_m = m_{\parallel} / m_{\perp}$ відомі з даних щодо циклотронного резонансу, а концентраційну залежність параметра анізотропії розсіяння $K_{\tau} = K_{\tau}(n_e)$ можна знайти в опублікованій літературі (див., наприклад, [2] — для n -Ge, а [3] — для n -Si). І, нарешті, незалежно від названих літературних джерел, значення K (для довільної концентрації, що не призводить ще до виродження електронного газу при температурі рідкого азоту) можна розрахувати (причому як для n -Ge, так і для n -Si) за формулами теорії анізотропного розсіяння [4]:

$$K = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{m_{\parallel} a_{\perp} I_2}{m_{\perp} a_{\parallel} I_1}, \quad (12)$$

де m_{\parallel} і m_{\perp} — циклотронні ефективні маси для окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда вздовж великої осі і перпендикулярно до неї відповідно;

$$\left. \begin{array}{l} m_{\parallel} = 1,580m_0 \\ m_{\perp} = 0,082m_0 \end{array} \right\} \text{ для } n\text{-Ge} \quad \text{і} \quad \left. \begin{array}{l} m_{\parallel} = 0,910m_0 \\ m_{\perp} = 0,191m_0 \end{array} \right\} \text{ для } n\text{-Si};$$

m_0 — маса вільного електрона; a_{\parallel} і a_{\perp} — числові коефіцієнти, різні для кристалів n -Ge і n -Si [2].

Інтеграли I_1 та I_2 у випадку невідродженого електронного газу для n -Ge і n -Si задаються формулами [2]:

$$I_1 = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x} x^3 dx}{x^2 + b_0}; \quad I_2 = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x} x^3 dx}{x^2 + b_1};$$

$$b_0 = \begin{cases} 2,65 \cdot 10^5 \frac{a_{\parallel} N}{T^3} \left(32,0 + \ln \frac{T^2 x}{n'} + 1,26 \cdot 10^{-14} \frac{n'}{T^2 x} \right) & \text{для } n\text{-Ge,} \\ 9,68 \cdot 10^5 \frac{a_{\parallel} N}{T^3} \left(32,0 + \ln \frac{T^2 x}{n'} + 10^{-14} \frac{n'}{T^2 x} \right) & \text{для } n\text{-Si,} \end{cases}$$

$$b_1 = \begin{cases} 3,23 \cdot 10^6 \frac{a_{\perp} N}{T^3} \left(31,0 + \ln \frac{T^2 x}{n'} + 2,8 \cdot 10^{-14} \frac{n'}{T^2 x} \right) & \text{для } n\text{-Ge,} \\ 3,47 \cdot 10^6 \frac{a_{\perp} N}{T^3} \left(31,4 + \ln \frac{T^2 x}{n'} + 1,46 \cdot 10^{-14} \frac{n'}{T^2 x} \right) & \text{для } n\text{-Si,} \end{cases}$$

де $N = N_d + N_a$ — загальна концентрація домішок у кристалі; n_e — концентрація електронів у зоні провідності; N_d і N_a — концентрація донорних і акцепторних домішок у кристалі. Величина $n' = n_e + (n_e + N_a)(1 - (n_e + N_a)/N_d)$ враховує вплив компенсуючої домішки на екранування. Так, при відсутності компенсуючих домішок $N_a = 0$ і $n' = n_e = N$. Видно, що b_0 і b_1 залежать від температури, загальної концентрації домішок у кристалі, ступеня їх компенсації та є різними для n -Ge і n -Si.

При зміні питомого опору $\rho_{300\text{K}}$ у зразках n -Si в діапазоні від 250 до 0,05 Ом·см параметр анізотропії термоерс захоплення електронів фононами M зменшується трохи більше, ніж у два рази (приблизно від 6,5 до 3,2, як показали проведені нами виміри при температурі ~ 85 К, а також літературні дані).

Оскільки термоерс захоплення пропорційна довжині вільного пробігу довгохвильових фононів (l^{ϕ}) [3], одержане експериментально зниження параметра $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ (пов'язане з більш ефективним зменшенням $\alpha_{\parallel}^{\phi}$, ніж α_{\perp}^{ϕ} з ростом $n_e \equiv N_d$) є наслідком зменшення l^{ϕ} зростаючою ефективністю розсіяння фононів на домішкових атомах. Концентраційна залежність параметра анізотропії термоерс захоплення електронів фононами $M = M(n_e \equiv N_d)$ в n -Si була досліджена авторами [5] в діапазоні $1,9 \cdot 10^{13} \leq n_e \equiv N_d \leq 2,6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а зміна термоерс в L_1 - Δ_1 моделі Ge при сильних гідростатичних тисках теоретично досліджена в роботі [6]. Дані щодо концентраційної залежності параметра анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel} = K(n_e)$ для широкого діапазону $3 \cdot 10^{12} \leq n_e \equiv N_d \leq 8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ в n -Si можна знайти в [7], а для n -Ge — в роботах [8, 9].

Використання системи двох рівнянь (9) і (10) при переході до вивчення n -Si (замість n -Ge) пов'язано з деформуванням цього кристала в напрямку [100] (за умов $X//J//\langle 100 \rangle$) замість умов експериментів $X//J//\langle 111 \rangle$, що використовуються при дослідженні n -Ge.

Загальний вираз для визначення коефіцієнта диференційної термоерс, пов'язаної з дифузією електронів α^e (що входить до рівнянь (9) і (10)) залежно від концентрації n_e знаходять, при потребі, у роботі [10]. Відповідно до кінетичної теорії

$$\alpha^e = \frac{\int_0^{\infty} x^{3/2} \tau(x) \frac{\partial n}{\partial x} \alpha(x) dx}{\int_0^{\infty} x^{3/2} \frac{\partial n}{\partial x} \tau(x) dx}, \quad (13)$$

де $\alpha(x) \equiv \frac{k}{e} \left(\frac{E - \zeta_0}{kT} \right)$ — коефіцієнт термоерс групи електронів (дірок) з енергією E ; $\tau(x)$ — загальний час релаксації носіїв струму; ζ_0 — хімічний потенціал.

На закінчення можна зробити такі висновки.

1. У роботі розглянуто фононну та електронну компоненти тензора термоерс і їхні зв'язки з параметром анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$ та з параметром анізотропії термоерс захоплення електронів фононами $M = \alpha_{\parallel}^{\phi}/\alpha_{\perp}^{\phi}$.

2. Встановлено зв'язок термоерс у недеформованому (α_0) і в сильно деформованому (α_{∞}) кристалі з поперечною фононною компонентою (α_{\perp}^{ϕ}) і з параметром анізотропії термоерс захоплення M , а також зв'язок термоерс захоплення у недеформованому кристалі (α_0) з параметром анізотропії рухливості K .

3. Наведено формули для розрахунку концентраційних залежностей параметра анізотропії рухливості $K = K(n_e, N_d, N_a)$, а також аналітичний вираз для обчислення електронної (дифузійної) складової термоерс $\alpha^e = \alpha^e(n_e)$.

1. Баранский П. И., Буда И. С., Даховский И. В. Теория термоэлектрических и термомагнитных явлений в анизотропных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1987. — 272 с.
2. Баранский П. И., Буда И. С., Даховский И. В., Колмоец В. В. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1977. — 270 с.
3. Стильбанс Л. С. Физика полупроводников. — Москва: Сов. радио, 1967. — 452 с.
4. Самойлович А. Г., Буда И. С., Даховский И. В. Теория анизотропного рассеяния // Физика и техника полупроводников. — 1973. — 7, № 4. — С. 859.
5. Баранский П. И., Савяк В. В., Щербина Л. А. Определение параметров анизотропии термоэдс увлечения в n -кремнии // Там же. — 1979. — 13, № 6. — С. 1219–1221.
6. Черныш В. В., Куамба Б. Ш. Термоэдс в $L_1 - \Delta_1$ модели германия при сильном гидростатическом давлении // Термоэлектричество. — 2009. — № 1. — С. 31–41.
7. Баранский П. И., Бабич В. М., Доценко Ю. П. и др. Влияние термообработки на электрофизические свойства обычных и нейтронно-легированных кристаллов кремния // Физика и техника полупроводников. — 1980. — 14, № 8. — С. 1546–1549.
8. Varanskii P. I., Buda I. S., Kolomoets V. V., Suss B. A. Piezothermoelectromotive force of elastically deformed n -Ge in [111] direction considering the phonon-drag effect // Phys. Stat. Sol. — 1975. — 27. — P. K103-K108.
9. Баранський П. І., Федосов А. В., Гайдар Г. П. Неоднорідності напівпровідників і актуальні задачі між-дефектної взаємодії в радіаційній фізиці і нанотехнології. — Київ; Луцьк: Ред.-вид. відділ Луцького держ. техн. ун-ту, 2007. — 316 с.
10. Баранский П. И., Буда И. С., Савяк В. В. Термоэлектрические и термомагнитные явления в многодолинных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1992. — 268 с.

Інститут фізики напівпровідників
ім. В. Є. Лашкарьова НАН України, Київ
Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ

Надійшло до редакції 30.01.2012

П. И. Баранский, Г. П. Гайдар

Определение параметра анизотропии термоэдс увлечения в многодолинных полупроводниках

Рассмотрен один из способов определения параметра анизотропии термоэдс увлечения электронов фононами $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ в многодолинных кристаллах n-Ge и n-Si. Установлена связь термоэдс в недеформированном (α_0) и сильно деформированном (α_{∞}) кристалле (при механической нагрузке $X \rightarrow \infty$) с поперечной фононной компонентой (α_{\perp}^{ϕ}) и с параметром анизотропии термоэдс увлечения электронов фононами M , а также связь термоэдс увлечения в недеформированном кристалле с параметром анизотропии подвижности электронов в рамках отдельно взятого изоэнергетического эллипсоида $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$. Представлены формулы для расчета концентрационных зависимостей параметра анизотропии подвижности $K = K(n_e, N_d, N_a)$ в случае невырожденного электронного газа в кристаллах.

P. I. Baranskii, G. P. Gaidar

Determination of the anisotropy parameter of thermoelectromotive-drag in multivalley semiconductors

One of the ways of determining the anisotropy parameter of thermoelectromotive electron-phonon drag $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ in the multivalley crystals of n-Ge and n-Si is considered. The relationship of the thermoelectromotive forces in unstrained (α_0) and strongly deformed (α_{∞}) crystals (under a mechanical stress $X \rightarrow \infty$) with the transverse phonon component (α_{\perp}^{ϕ}) and with the anisotropy parameter of thermoelectromotive electron-phonon drag M and the relationship of the thermoelectromotive-drag in an unstrained crystal with the anisotropy parameter of electron mobility $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$ in the framework of a single isoenergetic ellipsoid are established. The formulas for calculating the concentration dependences of the anisotropy parameter of mobility $K = K(n_e, N_d, N_a)$ in the case of a non-degenerate electron gas in crystals are presented.

М. М. Дяченко, член-кореспондент НАН України В. І. Мирошніченко,
Р. І. Холодов

Електрична сприйнятливість замагніченої електронної плазми з урахуванням анізотропії температури в рамках квантової теорії поля

Методами квантової теорії поля досліджується електрична сприйнятливість анізотропної електронної плазми в однорідному магнітному полі. Знайдено електричну сприйнятливість замагніченої електронної плазми з урахуванням анізотропії температури в лінійному наближенні та квантові поправки до неї. Проводиться перевірка одержаних формул з відповідними виразами фізики плазми та оцінка квантових поправок.

1. На сучасному етапі розвитку фізики високих енергій при дослідженнях взаємодії швидких важких іонів переходять до експериментів із зустрічними пучками. В цьому випадку вся енергія початкового руху може перейти в енергію народжених нових частинок з великими масами, але така постановка експериментів потребує створення пучків заряджених частинок з малими емітансами. Найвідомішим і ефективно вживаним методом охолодження є електронне охолодження. Воно знаходить застосування у сучасних колайдерах важких та легких частинок. Це в свою чергу робить актуальними задачі з теорії проходження заряджених частинок через замагнічену електронну плазму.

Одним з найбільших науково-дослідницьких проєктів сучасної фізики є FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research). В рамках цього проєкту планується широкий спектр наукових досліджень, серед яких проблеми протон-антипротонних взаємодій. Їх планують вивчати на накопичувачі заряджених частинок HESR (High Energy Storage Ring) з довжиною близько 400 м, енергією антипротонів 10 ГеВ. Електронний охолоджувач є важливим елементом кільця, який буде забезпечувати отримання якісних пучків антипротонів з розкидом за імпульсами $\Delta p/p \sim 10^{-5}$.

Тривалий час для теоретичного опису електронного охолодження застосовувався метод парних зіткнень, який успішно описував основні процеси, що виникають при охолодженні заряджених частинок. Альтернативними теоріями є методи квантової теорії поля [1, 2] та кінетичного рівняння Власова (діелектрична модель) [3, 4], які враховують далекі зіткнення частинки з електронною плазмою. Однією з головних теоретичних задач електронного охолодження є знаходження втрат енергії зарядженої частинки. В теорії парних зіткнень та методах фізики плазми при розрахунку сили тертя виникають розбіжності на межах інтегрування, які ліквідують, вводячи певні феноменологічні параметри, і результати мають лише логарифмічну точність. Методи ж квантової теорії поля дають можливість отримати точні результати без введення таких параметрів, що є головною перевагою цього методу.

Слід підкреслити, що в електронному охолодженні електронний пучок має істотну анізотропію розподілу за швидкостями, що пов'язано з прискоренням пучка електронів [5, 6].

У даній роботі методами квантової теорії поля (метод функції Гріна та діаграмна техніка) [1, 2] знайдений зручний вигляд електричної сприйнятливості замагніченої електронної

плазми з урахуванням анізотропії температури в лінійному наближенні для подальшого розрахунку втрат енергії зарядженої частинки при електронному охолодженні та квантові поправки до неї.

2. Методи квантової теорії поля вперше були застосовані до дослідження взаємодії зарядженої частинки з плазмою без магнітного поля в роботі Ларкіна [1]. Далі вони були використані Ахієзером [2] для знаходження втрат енергії в магнітоактивній електронній плазмі та діелектричної проникності плазми, але в цих роботах не була врахована температура електронів.

За методом квантової теорії поля сприйнятливість плазми визначається так:

$$\chi(\vec{k}, \omega) = -\frac{P(\vec{k}, i\omega)}{k^2}, \quad (1)$$

де $P(\vec{k}, i\omega)$ — поляризаційний оператор, для розрахунку якого використовується діаграмна техніка і в однопетльовому наближенні має такий вигляд:

$$P(\vec{r} - \vec{r}', ik_0) = \frac{2e^2}{\beta} \sum_{p_0} G(\vec{r}, \vec{r}', p_0) G(\vec{r}', \vec{r}, p_0 - k_0). \quad (2)$$

Тут $ip_0 = ((2n + 1)/\beta)\pi$, $n = 0, \pm 1, \dots$; $G(\vec{r}, \vec{r}', p_0)$ — функція Гріна електрона в магнітному полі і вона має вигляд

$$G(\vec{r}, \vec{r}', p_0) = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\vec{r}) \frac{1}{\varepsilon_{\alpha} - p_0} \Psi_{\alpha}^*(\vec{r}'), \quad (3)$$

де

$$\varepsilon_{\alpha} \equiv \varepsilon_{\nu, p_z} = \hbar\omega_B \left(\nu + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}; \quad (4)$$

$\omega_B = eH/(mc)$ — циклотронна частота; ν — номер рівня Ландау; p_z — поздовжня проекція імпульсу; $\Psi_{\alpha}(\vec{r})$ — хвильова функція електрона в магнітному полі.

За результатами роботи Ахієзера [2] електрична сприйнятливість магнітоактивної плазми визначається:

$$\chi(\vec{k}, \omega) = -\frac{2e^2 m \omega_B}{(2\pi\hbar)^2 k^2} \sum_{\nu, \nu'} \Lambda_{\nu\nu'} \left(\frac{k_{\perp} \hbar}{\sqrt{2m\omega_B \hbar}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \frac{n_{\nu, p_z} - n_{\nu', p_z - \hbar k_z}}{\varepsilon_{\nu, p_z} - \varepsilon_{\nu', p_z - \hbar k_z} - \hbar\omega}, \quad (5)$$

де $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. У формулі (5) функція $\Lambda_{\nu\nu'}$ має такий вигляд:

$$\Lambda_{\nu\nu'}(a) = \int_0^{\infty} ds J_0(2\sqrt{as}) L_{\nu}(s) L_{\nu'}(s) e^{-s}, \quad (6)$$

де $a \equiv (\hbar k_{\perp})^2 / (2m\hbar\omega_B)$ — відношення поперечної енергії $(\hbar k_{\perp})^2 / (2m)$ до відстані між сусідніми рівнями Ландау $\hbar\omega_B$; $J_0(2\sqrt{as})$ — функція Бесселя нульового порядку; $L_{\nu}(s)$ — поліном Лагера. За параметром a можна виділити два граничних випадки: $a \gg 1$ — слабе магнітне поле, $a \ll 1$ — сильне магнітне поле.

У даній роботі розглядається електронний газ з анізотропним за температурою розподілом, який знаходиться в зовнішньому постійному однорідному магнітному полі ($\vec{B} \parallel Oz$). Для проведення необхідних оцінок використовуються параметри, характерні для електронного пучка, яким охолоджують пучки заряджених частинок, зокрема, для HESR ($N = 3 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$, $\omega_B = 3,5 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$, $\omega_p = 3 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$, $T_{\perp} = 1 \text{ еВ}$, $T_{\parallel} = 0,01 \text{ еВ}$).

Перехід до анізотропного розподілу за температурою здійснюється за таким правилом:

$$\frac{\varepsilon}{T} \rightarrow \frac{\varepsilon_{\parallel}}{T_{\parallel}} + \frac{\varepsilon_{\perp}}{T_{\perp}},$$

ε — енергія електрона; $\varepsilon_{\parallel, \perp}$ — поздовжня та поперечна енергії електрона відносно напрямку силових ліній магнітного поля. Тоді розподіл електронів за швидкостями з урахуванням (4) може бути записаний у вигляді

$$n_{\nu, p_z} = e^{-\frac{\hbar\omega_B}{T_{\perp}}(\nu + \frac{1}{2})} e^{-\frac{p_z^2}{2mT_{\parallel}}}, \quad n_{\nu', p_z - \hbar k_z} = e^{-\frac{\hbar\omega_B}{T_{\perp}}(\nu' + \frac{1}{2})} e^{-\frac{(p_z - \hbar k_z)^2}{2mT_{\parallel}}}.$$

Інтеграл по імпульсу в формулі (5) визначається так:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_z \frac{n_{\nu, p_z} - n_{\nu', p_z - \hbar k_z}}{\varepsilon_{\nu, p_z} - \varepsilon_{\nu', p_z - \hbar k_z} - \hbar\omega} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega_B}{T_{\perp}}(\nu' + \frac{1}{2})}}{\hbar[\omega_B(\nu - \nu') - \omega]} \sqrt{2\pi m T_{\parallel}} \left(I_1 - e^{\frac{\hbar\omega_B}{T_{\perp}}(\nu - \nu')} I_2 \right), \quad (7)$$

де

$$I_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi m T_{\parallel}}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \frac{e^{-\frac{p_z^2}{2mT_{\parallel}}}}{1 - \zeta_{1,2}(p_z)}, \quad \zeta_{1,2} \equiv \frac{2k_z p_z \mp \hbar k_z^2}{2m[\omega - \omega_B(\nu - \nu')]}.$$

У випадку сильного магнітного поля ($a \ll 1$) виконуються співвідношення $\zeta_{1,2} \ll 1$. Проводячи розвинення в ряд підінтегральні вирази в $I_{1,2}$ по ζ з точністю до ζ^3 , що дає можливість врахувати температуру в лінійному наближенні, маємо:

$$I_{1,2} \approx 1 \mp \frac{\hbar k_z^2}{2m[\omega + \omega_B(\nu' - \nu)]} + \frac{4mk_z^2 T_{\parallel} + \hbar^2 k_z^4}{4m^2[\omega + \omega_B(\nu' - \nu)]^2} \mp \frac{12m\hbar k_z^4 T_{\parallel} + \hbar^3 k_z^6}{8m^3[\omega + \omega_B(\nu' - \nu)]^3}. \quad (8)$$

З урахуванням співвідношень (6)–(8) електрична сприйнятливність має вигляд:

$$\chi(\omega, \vec{k}) = -\frac{2e^2 m \omega_B}{(2\pi\hbar)^2 k^2} \sqrt{2\pi m T_{\parallel}} \sum_{\nu, \nu'} \Lambda_{\nu\nu'}(a) e^{-\delta(2\nu+1)} \frac{I_1 - e^{\frac{\hbar\omega_B}{T_{\perp}}(\nu-\nu')} I_2}{\hbar[\omega + \omega_B(\nu' - \nu)]}, \quad (9)$$

де $\delta \equiv \hbar\omega_B/(2T_{\perp})$ — відношення відстані між сусідніми рівнями Ландау $\hbar\omega_B$ до енергії поперечного теплового руху.

Оскільки вираз $\frac{I_1 - e^{\frac{\hbar\omega_B}{T_{\perp}}(\nu-\nu')} I_2}{\hbar[\omega + \omega_B(\nu' - \nu)]}$ в (9) залежить лише від різниці $(\nu' - \nu)$, його можна винести за знак суми по ν . Далі знайдемо суму

$$\sum_{\nu} e^{-\delta(2\nu+1)} \Lambda_{\nu\nu'}(a). \quad (10)$$

У сильному магнітному полі a — мала величина. Знайдемо асимптоту функції $\Lambda_{\nu\nu'}(a)$ при $a \ll 1$. Для цього розвинемо функцію Бесселя $J_0(2\sqrt{as})$ в ряд Тейлора по a :

$$J_0(2\sqrt{as}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k!)^2} a^k s^k. \quad (11)$$

Тоді, підставляючи (11) в (6), можна отримати

$$\Lambda_{\nu\nu'}(a) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k!)^2} a^k \int_0^{\infty} ds s^k L_{\nu}(s) L_{\nu'}(s) e^{-s} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k!)^2} a^k \lambda_{\nu\nu'}^{(k)}, \quad (12)$$

де $\lambda_{\nu\nu'}^{(k)} = \int_0^{\infty} ds s^k L_{\nu}(s) L_{\nu'}(s) e^{-s}$. Для врахування температури електронів у лінійному наближенні розвинемо $\Lambda_{\nu\nu'}(a)$ з точністю до a^2 , тоді

$$\Lambda_{\nu\nu'}(a) \approx \lambda_{\nu\nu'}^{(0)} - a \lambda_{\nu\nu'}^{(1)} + \frac{a^2}{4} \lambda_{\nu\nu'}^{(2)}. \quad (13)$$

У роботі [2] не враховували температуру електронів, тому функція (6) була розвинута лише з точністю до a

$$\Lambda_{\nu\nu'}(a) \approx \lambda_{\nu\nu'}^{(0)} - a \lambda_{\nu\nu'}^{(1)}. \quad (14)$$

Для обчислення інтегралів $\lambda_{\nu\nu'}^{(0)}$, $\lambda_{\nu\nu'}^{(1)}$, $\lambda_{\nu\nu'}^{(2)}$ в (13) скористаємося рекурентними співвідношеннями між поліномами Лагера:

$$\begin{aligned} sL_{\nu}(s) &= -(\nu+1)L_{\nu+1}(s) + (2\nu+1)L_{\nu}(s) - \nu L_{\nu-1}(s), \\ s^2L_{\nu}(s) &= (\nu+1)(\nu+2)L_{\nu+2}(s) - 4(\nu+1)^2L_{\nu+1}(s) + 2(3\nu^2+3\nu+1)L_{\nu}(s) - \\ &\quad - 4\nu^2L_{\nu-1}(s) + \nu(\nu-1)L_{\nu-2}(s). \end{aligned} \quad (15)$$

Остаточно маємо

$$\begin{aligned} \lambda_{\nu\nu'}^{(0)} &= \int_0^{\infty} ds e^{-s} L_{\nu}(s) L_{\nu'}(s) = \delta_{\nu\nu'}, \quad \lambda_{\nu\nu'}^{(1)} = -(\nu+1)\delta_{\nu+1,\nu'} + (2\nu+1)\delta_{\nu,\nu'} - \nu\delta_{\nu-1,\nu'}, \\ \lambda_{\nu\nu'}^{(2)} &= (\nu+1)(\nu+2)\delta_{\nu+2,\nu'} - 4(\nu+1)^2\delta_{\nu+1,\nu'} + 2(3\nu^2+3\nu+1)\delta_{\nu,\nu'} - 4\nu^2\delta_{\nu-1,\nu'} + \\ &\quad + \nu(\nu-1)\delta_{\nu-2,\nu'}. \end{aligned}$$

У випадку $a \gg 1$ (слабке магнітне поле) [2]

$$\Lambda_{\nu\nu'}(a) \approx \frac{m\hbar\omega_B}{\pi\Delta},$$

де Δ — площа трикутника, який побудований з відрізків $\hbar k_{\perp}$, p_{\perp} , p'_{\perp} , $p_{\perp}^2 = 2m\hbar\omega_B(\nu+1/2)$, $p'^2_{\perp} = 2m\hbar\omega_B(\nu'+1/2)$.

Функція $\Lambda_{\nu\nu'}(a)$ та її наближення ($a \ll 1, a \gg 1$) зображені на рис. 1.

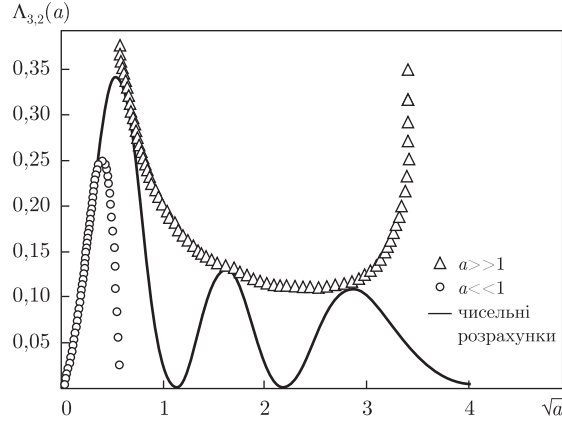


Рис. 1. Функція $\Lambda_{\nu\nu'}(a)$, її асимптота при $a \ll 1$ та наближення при $a \gg 1$ [2] для номерів рівнів Ландау $\nu = 3$ та $\nu' = 2$

Підставляючи (15) в суму (10) та проводячи певні математичні перетворення, матимемо (10) у вигляді

$$\begin{aligned} \sum_{\nu} e^{-\delta(2\nu+1)} \Lambda_{\nu\nu'}(a) = & \frac{1}{2sh\delta} \left(\delta_{\nu\nu'} + \frac{a^2}{2sh\delta} [e^{\delta} \delta_{\nu+1,\nu'} - 2\delta_{\nu,\nu'} ch\delta + e^{-\delta} \delta_{\nu-1,\nu'}] + \right. \\ & + \frac{a^4}{4sh^2\delta} \left[\frac{e^{2\delta}}{2} \delta_{\nu+2,\nu'} - 2e^{\delta} \delta_{\nu+1,\nu'} ch\delta + (3e^{-\delta} ch\delta + 3sh\delta e^{-\delta} + 2sh^2\delta) \delta_{\nu,\nu'} - \right. \\ & \left. \left. - 2e^{-\delta} \delta_{\nu-1,\nu'} ch\delta + \frac{e^{-2\delta}}{2} \delta_{\nu-2,\nu'} \right] \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Знаходячи суму за ν' в (9) та провівши послідовні математичні перетворення з урахуванням того, що для характерних параметрів електронного охолодження $\delta \equiv \hbar\omega_B/(2T_{\perp}) \sim 10^{-5}$, маємо (9) в остаточному вигляді:

$$\chi(\omega, \vec{k}, T) = \chi(\omega, \vec{k}, 0) + AT_{\parallel} + BT_{\perp} + C, \quad (17)$$

де

$$\begin{aligned} \chi(\omega, \vec{k}, 0) = & -\frac{\omega_{pe}^2}{k^2} \left(\frac{k_z^2}{\omega^2} + \frac{k_{\perp}^2}{\omega^2 - \omega_B^2} \right), \quad A = -\frac{\omega_{pe}^2}{k^2} \frac{k_z^2}{m} \left(\frac{3k_z^2}{\omega^4} + k_{\perp}^2 \frac{3\omega^2 + \omega_B^2}{(\omega^2 - \omega_B^2)^3} \right), \\ B = & -\frac{\omega_{pe}^2}{k^2} \frac{k_{\perp}^2}{m} \left(\frac{3k_{\perp}^2}{(\omega^2 - 4\omega_B^2)(\omega^2 - \omega_B^2)} + \frac{k_z^2}{\omega^2} \frac{3\omega^2 - \omega_B^2}{(\omega^2 - \omega_B^2)^2} \right), \\ C = & -\frac{\omega_{pe}^2}{k^2} \left(\frac{3\hbar k_{\perp}^4 k_z^2 T_{\perp}}{8m^2 \omega^2 \omega_B^3} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^4 k_z^2}{8m^2 \omega^2 \omega_B^2} + \frac{\hbar^2 k_z^6}{4m^2 \omega^4} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2 k_z^4}{4m^2} \frac{3\omega^2 + \omega_B^2}{(\omega^2 - \omega_B^2)^3} \right). \end{aligned}$$

3. Для перевірки одержаного виразу (17) розглянемо квазікласичний випадок ($\hbar \rightarrow 0$) ізотропної електронної плазми ($T_{\parallel} = T_{\perp} = T$), яка знаходиться в постійному однорідному магнітному полі. Тоді сприйнятливість з (17) визначається так:

$$\chi(\omega, \vec{k}) = -\frac{\omega_{pe}^2}{k^2} \left(\frac{k_z^2}{\omega^2} + \frac{k_{\perp}^2}{\omega^2 - \omega_B^2} + \right.$$

$$+ \frac{T}{m} \left[\frac{3k_z^4}{\omega^4} + k_{\perp}^2 k_z^2 \frac{6\omega^4 - 3\omega^2 \omega_B^2 + \omega_B^4}{\omega^2 (\omega^2 - \omega_B^2)^3} + \frac{3k_{\perp}^4}{(\omega^2 - 4\omega_B^2)(\omega^2 - \omega_B^2)} \right]. \quad (18)$$

Порівняємо (18) з формулами класичної електродинаміки плазми [7, 8]. З фізики плазми добре відома формула для визначення електричної сприйнятливості магнітоактивної електронної плазми

$$\chi(\omega, \vec{k}) = \frac{\omega_{pe}^2}{k^2 v_{Te}^2} \left(1 - \sum_n \frac{\omega}{\omega - n\omega_B} A_n(z) F(\beta_n) \right), \quad (19)$$

де $A_n(z) = e^{-z} I_n(z)$; $z = k_{\perp}^2 v_{Te}^2 / \omega_B^2$; $\beta_n = (\omega - n\omega_B) / (\sqrt{2} k_z v_{Te})$; ω_{pe} — плазмова частота електронів; v_{Te} — теплова швидкість електронів; $I_n(z)$ — функція Бесселя від уявного аргумента; $F(\beta_n)$ — дисперсійна функція плазми [11, 12].

У випадку холодної плазми виконуються співвідношення [8, 9]:

$$\frac{k_{\perp} v_{Te}}{\omega_B} \ll 1, \quad \frac{\omega - n\omega_B}{\sqrt{2} k_z v_{Te}} \gg 1.$$

Проводячи розвинення в ряд Тейлора (19) та залишаючи доданки, які враховують температуру в лінійному наближенні, можна одержати формулу (18).

При $\hbar \rightarrow 0$ та холодної електронної плазми ($T = 0$) в однорідному магнітному полі з (17) можна отримати

$$\chi(\omega, \vec{k}) = -\frac{\omega_{pe}^2}{k^2} \left(\frac{k_z^2}{\omega^2} + \frac{k_{\perp}^2}{\omega^2 - \omega_B^2} \right). \quad (20)$$

Формула (20) є відоме гідродинамічне наближення [7–9].

У квазікласичному випадку ($\hbar \rightarrow 0$) анізотропної електронної плазми без магнітного поля ($\omega_B = 0$) сприйнятливість з (17) визначається так:

$$\chi(\omega, \vec{k}) = -\frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{3T^* k^2}{m \omega^2} \right), \quad (21)$$

де $T^* = T_{\parallel} \cos \theta + T_{\perp} \sin \theta$; θ — кут між \vec{k} та віссю Oz. Формула (21) відома з електродинаміки плазми [7, 8].

Проведемо оцінку квантових поправок у формулі (17). При цьому будемо враховувати, що $k \sim \omega_{pe}/V$, $V \sim 10^4$ м/с, тоді $C \sim 10^{-7}$, тому квантові поправки несуттєві, однак слід звернути увагу на квантовий параметр $\delta \equiv \hbar \omega_B / (2T_{\perp})$, який для електронного охолодження $\delta \sim 10^{-5}$, але якщо збільшити магнітне поле до 20 Тл (експериментально досягне в надпровідних магнітах) та зменшити поперечну температуру до 0,01 еВ (охолодження катода), то відношення відстані між рівнями Ландау та поперечної теплової енергії електронів буде порядку одиниці і квантові ефекти даватимуть істотний внесок.

1. Ларкин А. И. Прохождение частиц через плазму // Журн. эксперим. и теорет. физики. — 1959. — **37**, № 1. — С. 264–272.
2. Аглизер И. А. К теории взаимодействия заряженной частицы с плазмой в магнитном поле // Там же. — 1961. — **40**, № 3. — С. 954–962.
3. Балакирев В. А., Мирошниченко В. И., Сториженко В. Е., Толстолужский А. П. Потери энергии заряженных частиц в магнітоактивній плазмі // Вопр. атомной науки и техники. — 2010. — № 2. — С. 181–185.

4. *Мирошниченко В. И., Сотников Г. В., Сторижко В. Е.* Сравнительный анализ потерь энергии заряженных частиц в магнитоактивном плазменном цилиндре // Там же. – 2010. – № 2. – С. 81–85.
5. *Буджер Г. И., Скринский А. Н.* Электронное охлаждение. Основные возможности в физике элементарных частиц // Усп. физ. наук. – 1978. – **124**, № 4. – С. 561–595.
6. *Мешков И. Н.* Электронное охлаждение: статус и перспективы // Физика элементарных частиц и атомного ядра. – 1994. – **25**, № 6. – С. 1487–1560.
7. *Ахиезер А. И., Ахиезер И. А., Половин Р. В.* Электродинамика плазмы. – Москва: Наука, 1974. – 719 с.
8. *Александров А. Ф., Богданкевич Л. С., Рухадзе А. А.* Основы электродинамики плазмы. – Москва: Высш. школа, 1978. – 407 с.
9. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. – Москва: Наука, 1979. – 528 с.
10. *Fedotov A. V., Galnander B.* Experimental studies of the magnetized friction force // Phys. Rev. E. – 2006. – **73**. – P. 1–9.
11. *Nersisyan H. B.* Stopping power of ions in a magnetized two-temperature plasma // Ibid. – 2000. – **61**, No 6. – P. 7022–7033.
12. *Nersisyan H. B.* Energy loss of ions in a magnetized plasma // Ibid. – 2003. – **67**. – P. 1–11.

Институт прикладной физики НАН Украины, Суми

Надійшло до редакції 14.05.2012

М. М. Дяченко, член-корреспондент НАН Украины **В. И. Мирошниченко**,
Р. И. Холодов

Электрическая восприимчивость замагниченной электронной плазмы с учетом анизотропии температуры в рамках квантовой теории поля

Методами квантовой теории поля исследуется электрическая восприимчивость анизотропной электронной плазмы в однородном магнитном поле. Найдена электрическая восприимчивость замагниченной электронной плазмы с учетом анизотропии температуры в линейном приближении и квантовые поправки к ней. Проводится проверка полученных формул с соответствующими выражениями физики плазмы и оценка квантовых поправок.

M. M. Diachenko,
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **V. I. Miroshnichenko**, **R. I. Kholodov**

Electric susceptibility of magnetized electron plasma with regard for the temperature anisotropy in the frame of quantum field theory

The electric susceptibility of an anisotropic electron plasma in a uniform magnetic field is studied by quantum field theory methods. The electric susceptibility of a magnetized electron plasma with regard for the temperature anisotropy in the linear approximation has been found, as well as its quantum corrections. The obtained formulas have been compared with the corresponding expressions of plasma physics, and the estimation of quantum corrections has been done.

В. В. Черепанов, А. І. Сененко, Ю. І. Прилуцький,
член-кореспондент НАН України **О. А. Марченко,**
академік НАН України **А. Г. Наумовець**

Структура плівок немодифікованих фулеренів C_{60} , адсорбованих з фізіологічних розчинів на поверхні слюди і золота

За допомогою атомно-силової і сканувальної тунельної мікроскопії досліджено структуру плівок немодифікованих фулеренів C_{60} , адсорбованих з фізіологічних розчинів 0,9% NaCl та Рінгера на поверхні слюди і золота, що є важливим для з'ясування механізмів їх специфічної біологічної дії та подальшого застосування у нанобіотехнологіях. Показано, що фулерени C_{60} утворюють щільноупаковані острівці товщиною в один моношар, а присутність молекул C_{60} у розчинах істотно впливає на процеси росту кристалів солі на заданих поверхнях.

Актуальною проблемою розвитку сучасних нанобіотехнологій є цілеспрямоване застосування біосумісних низькотоксичних об'єктів нанометрового розміру для лікування найпоширеніших хвороб. Так, в онкології, завдяки об'єднаним зусиллям дослідників у галузях фізики, хімії, біології, матеріалознавства, інформаційних технологій і медицини сформувався новий науковий напрям, спрямований на розроблення методів молекулярної діагностики і терапії онкологічних захворювань з використанням наночастинок. Передбачається, що за допомогою нанотехнологій можуть бути вирішені проблеми ранньої діагностики і визначення локалізації злоякісних новоутворень, реалізована адресна доставка лікарських препаратів у пухлину, а також розроблені нові методи селективної терапії. Серед можливих ефективних протипухлинних агентів значна увага приділяється новітнім вуглецевим наноструктурам [1, 2], зокрема фулеренам C_{60} [3], які викликають підвищений інтерес у біомедичних дослідженнях завдяки їхній високій хімічній стабільності та притаманним їм унікальним фотофізичним властивостям [4, 5].

За хімічними властивостями фулерени C_{60} є гідрофобними, тобто нерозчинними у полярних розчинниках, що обмежує їх біодоступність [6]. З метою підвищення гідрофільності фулеренів C_{60} їх піддають хімічній функціоналізації [7]. Врешті-решт, для отримання водного розчину немодифікованих фулеренів C_{60} була запропонована методика, що базується на переведенні молекул C_{60} з толуолу у воду під дією ультразвуку [8]. Виявилося, що цей розчин є типовою колоїдною системою, яка при температурі зберігання 4 °С залишається стабільною протягом 18 місяців. Теоретичні розрахунки засвідчили [9], що водний розчин немодифікованих фулеренів C_{60} містить як поодинокі гідратовані молекули C_{60} , так і сферичні гідратовані кластери діаметром до 3 нм. Було знайдено також [8], що найбільш енергетично вигідною структурою в такому водному розчині є клатрат $C_{60}(H_2O)_{60}$.

Таким чином, запропоновані методи переведення фулеренів C_{60} у біодоступну водорозчинну форму відкривають перспективу цілеспрямованого застосування цих молекул у медичних нанотехнологіях. Однак подальше вивчення біоактивності водорозчинних немодифікованих фулеренів C_{60} загалом, і зокрема їх протипухлинної активності *in vivo* [10, 11],

потребує точного визначення дози введення, а це у свою чергу вимагає попереднього переведення фулеренів C_{60} у різні фізіологічні розчини. Дуже важливим є дослідження стану фулеренів C_{60} у таких розчинниках, оскільки ця інформація є необхідною для з'ясування механізмів специфічної біологічної дії (мембранотропної, радіопротекторної, імуномодуючої і т. ін.) наночастинок.

Метою цієї роботи було дослідити структуру плівок немодифікованих фулеренів C_{60} , адсорбованих з фізіологічних розчинів 0,9% NaCl та Рінгера на поверхні слюди і золота за допомогою атомно-силової (АСМ) і сканувальної тунельної (СТМ) мікроскопії.

Матеріали і методи. Водний колоїдний розчин немодифікованих фулеренів C_{60} (чистота 99,95%) з максимальною концентрацією 1 мг/мл був приготовлений за методикою [8]. Однорідність консистенції препарату “фулерени C_{60} у фізрозчині” була забезпечена шляхом змішування в однакових об'ємах водного колоїдного розчину немодифікованих фулеренів C_{60} та відповідного фізіологічного розчину з подальшим застосуванням ультразвукової бані (ВК-9050, ФРН; потужність — 50 Вт, частота — 40 кГц, час перемішування — 3 год).

В експериментах був використаний звичайний фізіологічний розчин (0,9% NaCl) та розчин Рінгера (у 1 л розчину міститься: натрію хлориду 8,60 г, кальцію хлориду 0,33 г, калію хлориду 0,30 г. Допоміжні речовини — гідроксид натрію, хлористоводнева кислота, що відповідає: Na^+ — 147,00, K^+ — 4,00 ммоль, Ca^{2+} — 2,25, Cl^- — 155,60 ммоль).

Для оцінки структурного стану фулеренів C_{60} у фізіологічних розчинах було проведено дослідження структури адсорбованих плівок фулеренів на поверхнях слюди і золота методами СТМ і АСМ. Для цього краплю розчину наносили на атомно-гладку поверхню підкладки. Вимірювання проводили на сухих шарах після повного випаровування розчинників. У СТМ дослідженнях підкладкою слугувала поверхня Au (111) (вакуумно напорошена плівка Au на слюді, виробництво SPI Supplies), відпалена в полум'ї газового пальника (пропан). Після відпалювання підкладка виявляла лінії реконструкції на повітрі. Режим, який забезпечує отримання реконструйованих поверхонь, підбирався експериментально. Для виготовлення вістер використовували платиново-іридієвий дріт (Pt-Ir, 80% : 20%, діаметр 250 мкм). Типові значення тунельного струму і напруги знаходилися у межах 0,01–0,1 нА та 0,1–0,8 В, відповідно. В АСМ дослідженнях використовували свіжосколоту поверхню слюди (V-1 Grade, SPI Supplies). АСМ візуалізація зразків відбувалась у напівконтактному режимі з використанням АСМ зондів типу NSG10 (NT-MDT). Вимірювання проводили на комерційних системах “Solver Pro” і “Solver Pro M” виробництва NT-MDT, Росія.

Результати та їх обговорення. Процеси випаровування води з крапель фізіологічного розчину (0,9% NaCl) за присутності та відсутності в ньому фулеренів C_{60} були досліджені з використанням оптичного мікроскопу. В обох випадках спостерігали утворення кристалів солі на поверхні слюди. Для проведення АСМ і СТМ досліджень обиралися відносно гладкі ділянки поверхні, що не були покриті видимими кристалами солі. На цих ділянках методом АСМ виявлено острівці з характерним латеральним розміром ~ 1 мкм (сірі ділянки на рис. 1). Висота всіх острівців однакова і становить $0,8 \pm 0,2$ нм, що добре узгоджується з діаметром молекули C_{60} . Це свідчить, що фулерени C_{60} групуються на поверхні слюди у щільнопаковані моношарові кластери. Якісно подібні результати отримані і при дослідженні розчину Рінгера (зображення кластерів фулеренів див. на рис. 2). Окрім острівців фулеренів виявлено голкоподібні кристали висотою ~ 10 нм і довжиною до 1 мкм, що формуються із залишків солі після випаровування фізрозчинів (білі структури на рис. 1).

З метою встановлення конформаційного впливу іонів солі на молекули C_{60} спочатку були проведені АСМ дослідження структури шарів фулеренів C_{60} , осаджених з водного розчину.

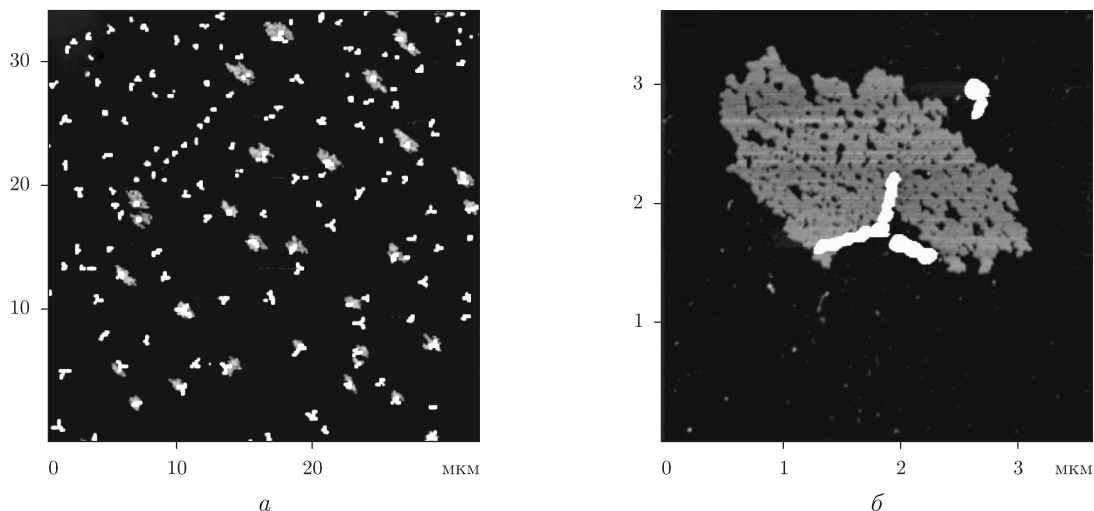


Рис. 1. АСМ зображення моношарових кластерів фулеренів C_{60} (сірі острівці) і кристалів $NaCl$ (білі структури), що утворюються на поверхні слюди при нанесенні фізіологічного розчину (0,9% $NaCl$) з немодифікованими фулеренами C_{60} у концентрації 0,5 мг/мл (а); деталізоване зображення кластера фулеренів і кристала солі (б)

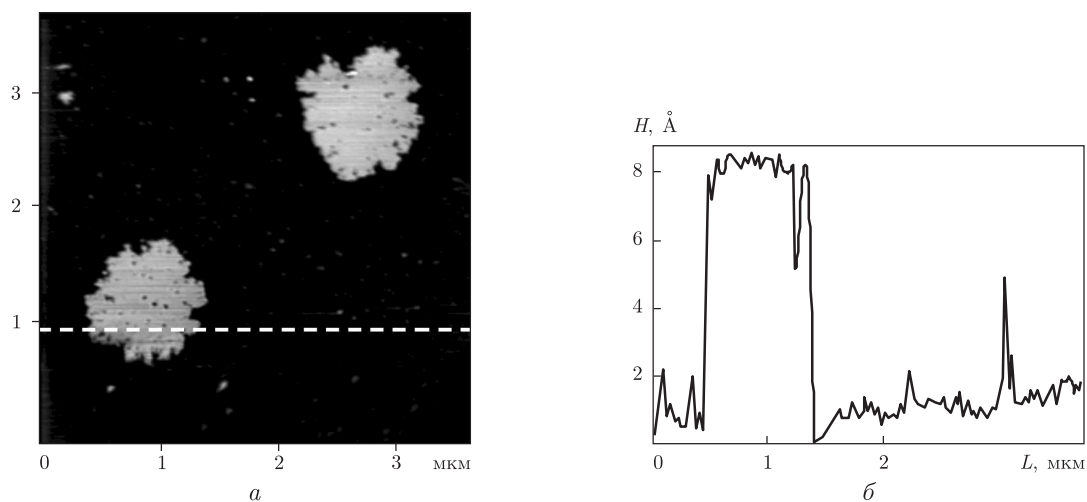


Рис. 2. АСМ зображення моношарових кластерів фулеренів C_{60} , що утворюються на поверхні слюди при нанесенні розчину Рінгера з немодифікованими фулеренами C_{60} у концентрації 0,5 мг/мл (а); Z-переріз зображення уздовж лінії, позначеної на рис. 2, а (б)

Як видно (рис. 3, а), на поверхні слюди присутні хаотично розташовані окремі молекули фулерену C_{60} та їх об'ємні кластери висотою 1,5–10 нм. Аналогічні результати отримані і в СТМ дослідженнях при нанесенні молекул C_{60} з водного розчину на поверхню $Au(111)$ (рис. 3, б). Важливо, що при дослідженні водних розчинів немодифікованих фулеренів C_{60} утворення моношарових острівців жодного разу не виявлено. Отже, можна припустити, що формування щільноупакованих острівців фулеренів C_{60} , показаних на рис. 1 і 2, зумовлено саме присутністю у розчинах іонів $NaCl$.

У літературі досліджено процеси агрегації фулеренів C_{60} в електролітах. Так, у роботі [12] методом спектроскопії поглинання в УФ та видимому діапазонах виявлено зміщення

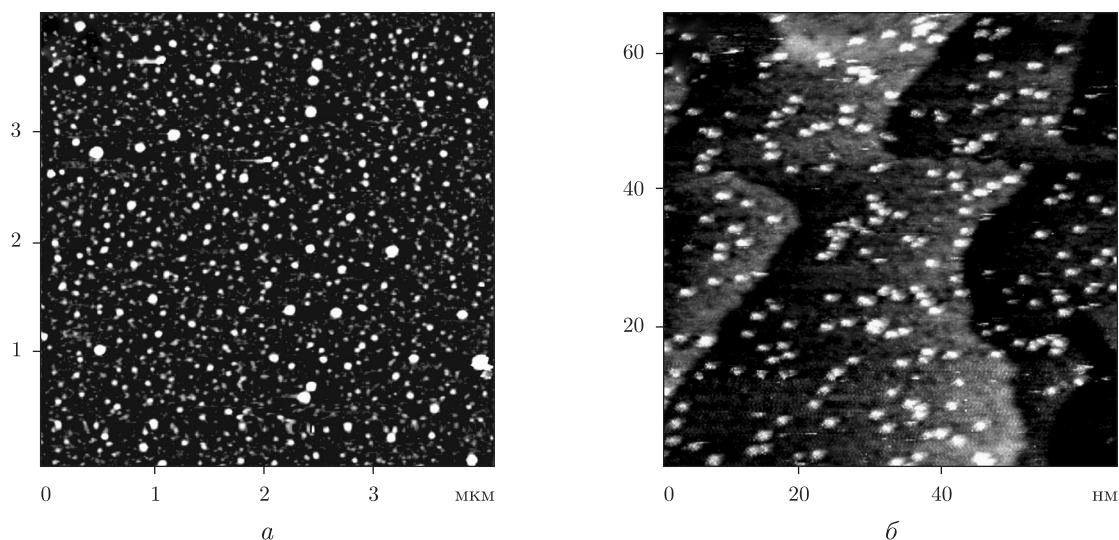


Рис. 3. АСМ зображення фулеренів C_{60} на поверхні слюди (а); СТМ зображення фулеренів C_{60} на поверхні Au (111), які осаджували з водного розчину концентрацією 1 мг/мл (б)

піку поглинання фулеренів C_{60} у червоний діапазон при додаванні хлориду натрію. Цей процес супроводжувався утворенням жовтуватого осаду, що свідчило про коагуляцію молекул C_{60} між собою, у той час як їх водний розчин демонстрував відносну стабільність. Крім того, методом електрофоретичного розсіювання світла встановлено, що у водному розчині кластери фулеренів C_{60} є негативно зарядженими (ζ -потенціал дорівнює -30 мВ). Завдяки цьому між молекулами C_{60} виникають сили електростатичного відштовхування, які сприяють стабільності дисперсійної системи загалом. З іншого боку, слабкі розчини електролітів (0,001 М) призводять до дестабілізації суспензій фулеренів C_{60} внаслідок ослаблення сил електростатичного відштовхування між ними або їх кластерами [13].

Об'єднання фулеренів C_{60} в острівці за присутності іонів солі можливе внаслідок зменшення сил електростатичного відштовхування. У цьому випадку Ван-дер-Ваальсівські сили притягання стають домінуючими, що призводить до утворення моношарів фулеренів C_{60} завдяки міграції молекул по поверхні під час випаровування розчинника.

Для дослідження структурної організації фулеренів C_{60} у моношарах на поверхні Au (111) були проведені їх СТМ дослідження. Однак після випаровування води з вихідного фізіологічного розчину 0,9% NaCl концентрація залишків солі була досить високою, що заважало тунелюванню електронів між вістрям та підкладкою. Стійке тунелювання стало можливим лише після розведення розчину у п'ять разів шляхом додавання бідистильованої води. У цьому випадку вдалося візуалізувати окремі молекули C_{60} . На деяких СТМ зображеннях спостерігалися також об'єкти висотою 3,5–4 нм, які можуть бути агрегатами (кластерами) з декількох молекул C_{60} , що добре узгоджується з теоретичними розрахунками [9]. З СТМ зображень випливає (рис. 4), що на поверхні присутні також хаотично розташовані об'єкти висотою 0,6–1 нм, що наймовірніше відповідають окремим молекулам C_{60} . Це узгоджується з результатами АСМ досліджень. Темні плями на СТМ зображеннях відповідають заглибленням з перепадом висоти $\approx 0,25$ нм відносно решти поверхні. Це можуть бути кластери вакансій (двовимірні пори) у першому (поверхневому) атомному шарі підкладки Au (111). Видимі дефекти на СТМ зображеннях спричинені механічним контак-

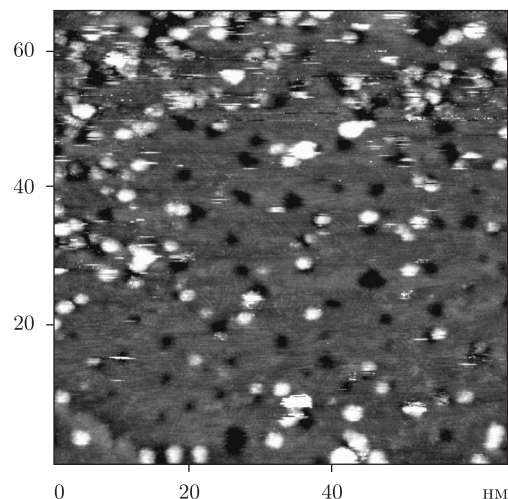


Рис. 4. СТМ зображення фулеренів C_{60} на поверхні Au (111), осаджених з фізрозчину 0,9% NaCl, розведеного бідистильованою водою у п'ять разів

том вістря із соляними залишками. Зі зниженням концентрації іонів електроліту утворення моношарових острівців фулеренів C_{60} не спостерігали.

Молекули C_{60} , у свою чергу, впливають на ріст кристалів солі. Так, на окремих ділянках поверхні замість голкоподібної форми спостерігали іншу форму кристалів NaCl, а саме трипроменевої “зірки” (рис. 1). Висота кристалів становила 8–30 нм, довжина променів ~ 1 мкм. Утворення подібних кристалів, очевидно, пов'язано зі зміною поверхневої вільної енергії кристалів NaCl у розчині під впливом оточення фулеренів C_{60} .

Таким чином, за допомогою методів сканувальної зондової мікроскопії в роботі досліджено структуру плівок фулеренів C_{60} , отриманих осадженням з фізіологічних розчинів (0,9% NaCl та розчину Рінгера) на поверхні слюди і грані (111) золота. Це стало можливим завдяки просторово роздільному формуванню агрегатів молекул C_{60} та кристалів солі. Фулерени C_{60} утворюють щільнопаковані кластери товщиною в один моношар. Ця структура істотно відрізняється від структури плівок молекул C_{60} , осаджених з водного розчину. Відмінність може бути зумовлена екрануванням або зменшенням величини негативного заряду на поверхні фулеренів C_{60} під впливом іонів солі. Присутність молекул C_{60} у розчині, у свою чергу, впливає на процеси росту кристалів солі, зокрема уможлиблює утворення кристалів NaCl голко- та зіркоподібної форми. Розведення вихідних фізіологічних розчинів водою дає змогу отримати СТМ зображення окремих молекул C_{60} .

1. *Medicinal Chemistry and Pharmacological Potential of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. Ser. Carbon Materials: Chemistry and Physics. Cataldo F., Da Ros T. (Eds.), Vol. 1. – Berlin: Springer, 2008.
2. Прилуцька С. В., Ременяк О. В., Бурлака А. П., Прилуцький Ю. І. Перспективи використання вуглецевих нанотрубок у протираковій терапії // *Онкологія*. – 2010. – **12**. – С. 5–9.
3. Прилуцька С. В., Кічмаренко Ю. М., Богуцька К. І., Прилуцький Ю. І. Фулерен C_{60} та його похідні як протипухлинні агенти: перспективи і проблеми // *Біотехнологія*. – 2012. – **5**, № 3. – С. 9–17.
4. Arbogast J. W., Foote Ch. S. Photophysical properties of C_{60} // *J. Am. Chem. Soc.* – 1991. – **113**. – P. 8886–8889.
5. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. – New York: Academic Press, 1996. – P. 23–89.
6. Ruoff R. S., Tse D. S., Malhotra M., Lorents D. C. Solubility of fullerene C_{60} in a variety of solvents // *J. Phys. Chem.* – 1993. – **97**. – P. 3379–3383.

7. Hirsch A., Brettreich M. Fullerenes – Chemistry and Reactions. – New York: Wiley, 2005. – 437 p.
8. Scharff P., Risch K., Carta-Abelmann L. et al. Structure of C₆₀ fullerene in water: spectroscopic data. Carbon. – 2004. – **42**. – P. 1203–1206.
9. Bulavin L., Adamenko I., Prylutskyy Yu. et al. Structure of fullerene C₆₀ in aqueous solution // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2000. – **2**. – P. 1627–1629.
10. Prylutska S. V., Burlaka A. P., Prylutskyy Yu. I. et al. Pristine C₆₀ fullerenes inhibit the rate of tumor growth and metastasis // Exp. Oncol. – 2011. – **33**. – P. 162–164.
11. Prylutska S. V., Burlaka A. P., Klymenko P. P. et al. Using water-soluble C₆₀ fullerenes in anticancer therapy // Cancer Nanotechnol. – 2011. – **2**. – P. 105–110.
12. Deguchi S., Alargova R. G., Tsujii K. Stable dispersions of fullerenes, C₆₀ and C₇₀ in water. Preparation and characterization // Langmuir. – 2001. – **17**. – P. 6013–6017.
13. Brant J., Lecoanet H., Wiesner M. R. Aggregation and deposition characteristics of fullerene nanoparticles in aqueous systems // J. Nanopart. Res. – 2005. – **7**. – P. 545–553.

Інститут фізики НАН України, Київ
 Київський національний університет
 ім. Тараса Шевченка
 ННЦ “Інститут біології”, Київ

Надійшло до редакції 29.05.2012

В. В. Черепанов, А. І. Сененко, Ю. І. Прилуцький,
 член-корреспондент НАН України **А. А. Марченко,**
 академик НАН України **А. Г. Наумовец**

**Структура пленок немодифіцированих фуллеренов C₆₀,
 адсорбированих из физиологических растворов на поверхности
 слюды и золота**

С помощью атомно-силовой и сканирующей туннельной микроскопии исследована структура пленок немодифицированных фуллеренов C₆₀, адсорбированных из физиологических растворов 0,9% NaCl и Рингера на поверхности слюды и золота, что является важным для выяснения механизмов их специфического биологического действия и дальнейшего применения в нанобиотехнологиях. Показано, что фуллерены C₆₀ образуют плотноупакованные островки толщиной в один монослой, а присутствие молекул C₆₀ в растворах существенно влияет на процессы роста кристаллов соли на упомянутых поверхностях.

V. V. Cherepanov, A. I. Senenko, Yu. I. Prylutskyy,
 Corresponding Member of the NAS of Ukraine **A. A. Marchenko,**
 Academician of the NAS of Ukraine **A. G. Naumovets**

**Film structure of unmodified C₆₀ fullerenes adsorbed from physiological
 solutions on the surface of mica and gold**

With the help of atomic force and scanning tunneling microscopies, the film structure of unmodified C₆₀ fullerenes adsorbed from 0.9% NaCl and Ringer physiological solutions on the surface of mica and gold is studied. It is of importance for the clarification of the mechanisms of their specific biological activities and future applications in nanobiotechnology. It is shown that C₆₀ fullerenes form close-packed islands in the thickness of a monolayer, and the presence of C₆₀ molecules in solutions significantly affects the processes of growth of salt crystals on the surfaces mentioned.



УДК 621.762

© 2012

Член-корреспондент НАН України **О. Н. Григорьев, Б. А. Галанов, А. В. Коротеев, В. А. Котенко, Л. М. Мелак**

Структура и сопротивление внедрению гетерофазной керамики $V_4C-SaV_6-TiV_2$

Исследованы закономерности фазо- и структурообразования, а также прочностные характеристики гетерофазной керамики систем V_4C-SaV_6 и $V_4C-SaV_6-TiV_2$. Показано, что при применении технологии реакционного горячего прессования присутствие свободного углерода в шихте обеспечивает восстановление оксидных примесей и активизирует процесс спекания. При этом прочность при изгибе полученных композитов V_4C-SaV_6 в интервале концентраций SaV_6 0–10% (об.) составляет 420–425 МПа и увеличивается до 500 МПа при введении в керамику 20% (об.) TiV_2 . В рамках аналитической модели квазистатического проникновения ударников в хрупкие тела установлено, что гетерофазная керамика V_4C-SaV_6 , состоящая из “прочного” (карбид бора) и “слабого” (борид кальция) компонент имеет более высокий уровень механических свойств, чем соответствующая монофазная керамика.

Оптимизация составов и структурного состояния керамических материалов, используемых в условиях сосредоточенного нагружения (броневые пластины, детали размольного оборудования), зависит от многочисленных требований, среди которых первоочередными являются характеристики сопротивления керамики контактному разрушению, технологичность материала, доступность сырья и невысокая стоимость производства. Поэтому всегда остается актуальным поиск таких составов керамики, при которых имеет место переход к композитам с керамической матрицей с существенно улучшенными прочностными характеристиками.

Ранее нами была показана перспективность использования керамических композитов, сочетающих компоненты с высокими и низкими уровнями деформаций разрушения [1]. В рамках такого подхода перспективной является керамика системы V_4C-SaV_6 .

Вследствие близости физических и тепловых свойств компонент композита V_4C-SaV_6 максимизации его прочностных свойств, в соответствии с [2], можно ожидать при высоком, близком к эквиобъемному, содержании второй фазы. При этом данная керамика может быть получена в режиме реакционного спекания (реакционного горячего прессования) с использованием дешевого природного сырья — кальцита $CaCO_3$. В этих условиях

имеет место активация спекания с переходом к пониженным температурам спекания (ниже 2000°C).

В данной работе выполнены исследования возможностей получения керамики системы V_4C-SaB_6 и произведена оценка некоторых физических и механических свойств. Исследовали также влияние свободного углерода в керамике на формирование ее свойств.

В качестве исходных материалов использовались порошки V_4C и SaB_6 отечественного производства. Карбид бора содержит свободный углерод (до 4–5% (об.)). Присутствие свободного углерода обеспечивает восстановление оксидных примесей в шихте, активирует процесс спекания и влияет на механические свойства керамики. Последнее обсуждается в данной работе.

Шихта готовилась путем размолла в планетарной мельнице. Использовались шары из композиционной керамики (V_4C-TiB_2), намола которых приводил к появлению в шихте и, в дальнейшем, в составе керамики небольших количеств диборида титана (до 1–2%). Горячее прессование выполняли на установке СПД-120 в графитовых пресс-формах при температурах ~ 2150 °C и давлении 30 МПа. Упругие свойства (модули Юнга, сдвига, объемный и коэффициент Пуассона η) полученных образцов рассчитывались по результатам измерений плотности и скорости распространения продольных и поперечных ультразвуковых колебаний. Для измерений продольной (v_l) и поперечной (v_t) скоростей УЗ применялась аппаратура и методики, описанные в работах [3, 4]. Плотность при этом измерялась с погрешностью 10^{-4} отн. ед. при массе образцов 10 г.

Составы и некоторые характеристики образцов представлены в табл. 1.

Керамика системы V_4C-SaB_6 вне зависимости от состава, за исключением образцов ВС2, имеет примерно одинаковый уровень плотности — 2,52–2,54 г/см³, что, с учетом присутствия 1–2% TiB_2 , соответствует ее беспористому состоянию, а также примерно одинаковую прочность при изгибе 420–425 МПа. Это обусловлено практически одинаковой плотностью компонентов при близости значений их упругих характеристик.

По результатам первичной аттестации полученных образцов керамика ВС4 была принята в качестве базовой и в дальнейшем к шихтам этого состава добавляли дополнительные количества (10 и 20% (об.)) диборида титана. В керамике, дополнительно содержащей диборид титана (20% (об.) в образцах ВСТ2), отмечается ожидаемое увеличение прочности практически до уровня 500 МПа, что соответствует многочисленным литературным данным.

Типичная структура керамики V_4C-SaB_6 приведена на рис. 1. Размер зерен до 20–25 мкм в керамике ВС1, не содержащей гексаборид кальция, и ~ 10 мкм — в гетерофазной керамике V_4C-SaB_6 . Меньший размер зерен обусловлен затруднением рекристаллизации

Таблица 1. Состав исходной шихты, плотность и прочность при изгибе образцов керамики $V_4C-SaB_6-TiB_2$

Маркировка образцов	Состав, % (об.)			Плотность, г/см ³	Прочность, МПа
	V_4C	SaB_6	TiB_2		
BC1	100	—	—	2,54	420
BC2	90	10	—	2,57	380
BC3	80	20	—	2,52	425
BC4	70	30	—	2,54	420
BC5	60	40	—	2,52	425
BC11	70	30	10	2,73	425
BC12	70	30	20	2,92	496

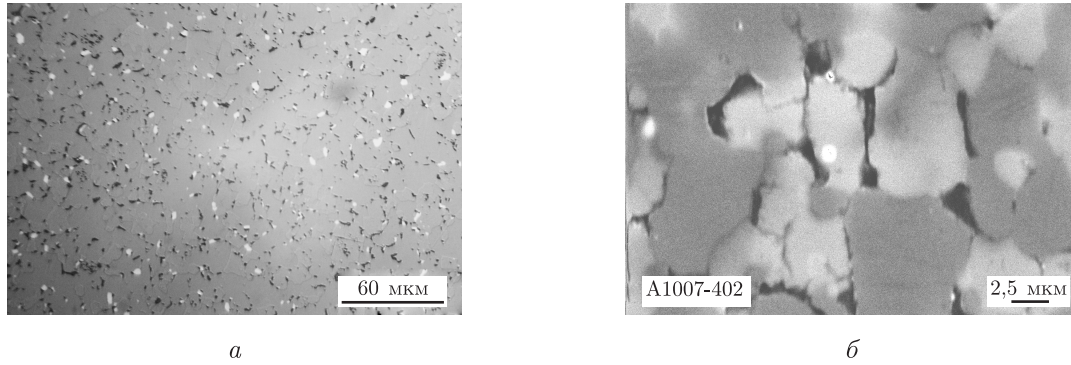


Рис. 1. Типичная структура керамики B_4C-CaB_6 различных составов: *a* — 70% B_4C — 30% CaB_6 ; *б* — 80% B_4C — 20% CaB_6

карбида бора при спекании в присутствии боридов. Черные области на снимках соответствуют участкам свободного углерода (рис. 1, *б*), а в некоторых случаях — участкам поверхностной наведенной пористости (с размерами пор $\sim 0,5-5$ мкм), вызванной выкрашиванием при алмазной обработке. Эти области локализованы, преимущественно, по границам зерен основных фаз.

Рентгенографический анализ полученных материалов показал наличие в образцах карбида бора, бориды кальция, свободного углерода (до 4% (об.)) и бориды титана (2–3% (об.)).

Значения упругих характеристик образцов представлены в табл. 2. Керамика из карбида бора, получаемая по используемой технологии, при отсутствии свободного углерода имеет модуль Юнга, равный 450 ГПа, в то время как керамика $BC1$ обладает модулем Юнга всего 400 ГПа. Снижение модуля Юнга связано с присутствием свободного углерода и его локализацией по границам зерен основных компонентов (рис. 1, *б*). Введение гексаборида кальция сопровождается дальнейшим падением модуля Юнга, что может быть обусловлено увеличением дефектности (повреждаемости) керамики. Дополнительное введение диборида титана, вследствие его более высоких упругих характеристик, приводит к ожидаемому росту модуля Юнга, который, тем не менее, оказывается меньшим, чем расчетный для композитов $B_4C-CaB_6-TiB_2$. Таким образом, полученные материалы характеризуются меньшей жесткостью, чем керамика из монофазного карбида бора.

Измерения твердости керамики по Виккерсу проводились при нагрузках на инденторе от 2 до 300 Н. Во всех случаях наблюдалось образование радиальных и боковых лепестковых (lateral) трещин. При высоких нагрузках их пересечение приводило к образованию больших сколов материала. В керамике на основе монофазного карбида бора, не содержащей свободного углерода, такие сколы делают невозможным измерение твердости при нагрузках более 50Н. В керамике, содержащей свободный углерод, интенсивность образования сколов

Таблица 2. Упругие характеристики керамики $B_4C-CaB_6-TiB_2$

Маркировка образцов	Упругие характеристики						
	ρ , г/см ³	ν_l , м/с	ν_t , м/с	E , ГПа	G , ГПа	B , ГПа	η
BC-1	2,540	12936,9	8210,1	399,62	171,83	197,54	0,163
BC-4	2,536	12808,1	7822,3	373,26	155,19	209,15	0,203
BCT-1	2,725	12633,5	7819,4	396,42	166,63	212,79	0,189
BCT-2	2,922	12618,4	7964,7	433,32	185,36	218,10	0,169

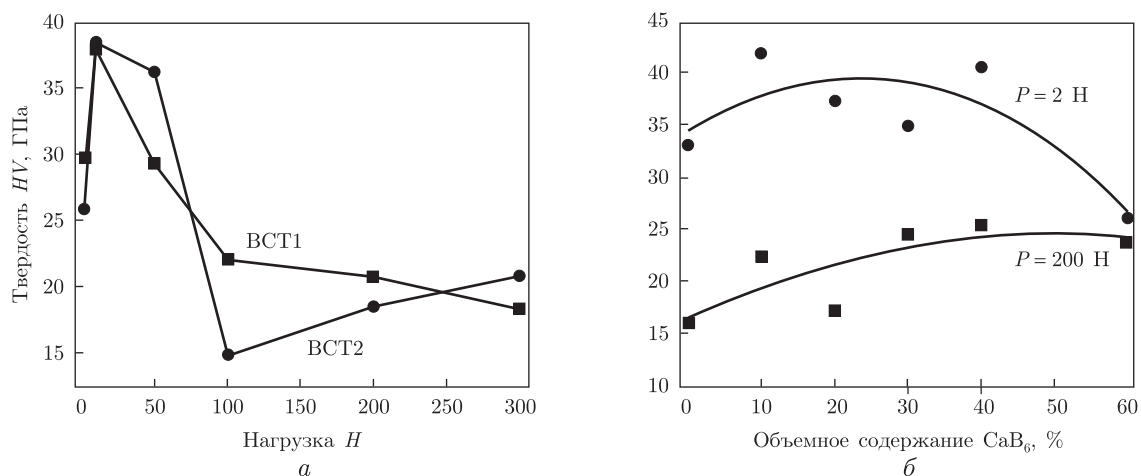


Рис. 2. Твердость керамики в зависимости от нагрузки (а) и от количества CaB_6 (б)

резко снижена из-за процессов микрорастрескивания, что позволяет выполнять измерения твердости при нагрузках 200–300Н. В соответствии с развиваемым нами подходом, сопротивление керамики внедрению при ударе тем выше, чем больше интервал нагрузок, в котором возможны измерения твердости, и чем выше твердость при максимально возможной нагрузке. Поэтому керамика на основе карбида бора в присутствии свободного углерода более перспективна для использования в качестве броневой по сравнению с монофазной.

Анализ зависимости твердости гетерофазной керамики от нагрузки показывает, что эта зависимость характеризуется максимумом при нагрузках 10–50 Н с уменьшением твердости не только при высоких нагрузках, но и с резким ее уменьшением при снижении нагрузки до 2Н (рис. 2, а). Такое поведение является типичным для гетерофазных керамических материалов, в которых при внедрении индентора имеют место процессы микрорастрескивания [5, 6].

Керамика системы $\text{V}_4\text{C}-\text{CaB}_6$ при высоких нагрузках имеет существенно более высокие значения твердости (рис. 2, б), чем керамика V_4C и $\text{V}_4\text{C}-\text{CaB}_6-\text{TiB}_2$. Более высокую твердость таких материалов мы связываем с увеличением работы по уплотнению порошкового фрагментированного материала в ядре разрушения под областью контакта.

В табл. 3 приведены значения твердости по Мейеру и контактная прочность керамики на растяжение (σ_f) и сжатие (Y). Расчет величин контактной прочности выполнен в соответствии с методикой [2].

Таблица 3. Твердость по Мейеру, контактная прочность на растяжение (CST) и сжатие (Y) керамики $\text{V}_4\text{C}-\text{CaB}_6$ и $\text{V}_4\text{C}-\text{CaB}_6-\text{TiB}_2$

Маркировка образцов	Состав, % (об.)			Упругие и прочностные характеристики					
	V_4C	TiB_2	CaB_6	Нагрузка, Н	E , ГПа	η	HM , ГПа	σ_f , ГПа	Y , ГПа
BC-4	60	0	40	200	373,26	0,203	27,48	0,58	6,91
				300	373,26	0,203	26,03	0,60	6,24
BC-1	63	10	27	200	396,42	0,189	22,50	0,6	4,58
				300	396,42	0,189	20,69	0,55	3,97
BC-2	56	20	24	200	433,32	0,169	20,53	0,55	3,66
				300	433,32	0,169	23,09	0,51	4,54

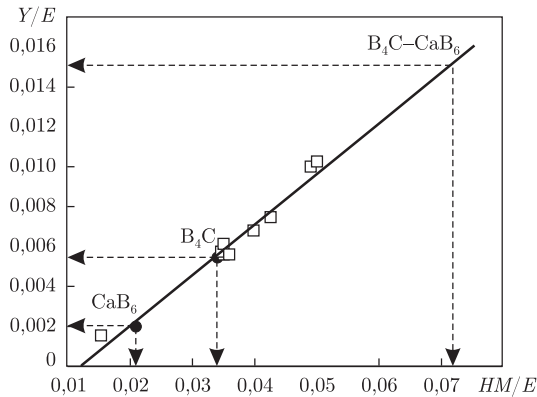


Рис. 3. Соотношение между твердостью и прочностью при одноосном сжатии для исходных компонентов и композита B_4C-CaB_6

Оба образца жесткой керамики (ВСТ1 и ВСТ2) имеют более низкие значения макротвердости, характеризующей сопротивление керамики разрушению при внедрении, по сравнению с керамикой B_4C-CaB_6 . Последняя керамика имеет более высокие значения контактной прочности на растяжение и сжатие. Эти величины являются параметрами материала, определяющими его сопротивление внедрению ударников.

Преимущества нового композиционного материала хорошо видны на рис. 3 в координатах $HM/E-Y/E$ (см. [1]), на котором точками представлены экспериментальные данные для типичных керамических материалов. Композиционная керамика B_4C-CaB_6 , состоящая из “прочного” (карбид бора) и “слабого” (борид кальция) компонентов в результате “включения” новых механизмов диссипации энергии ударника при внедрении обладает уровнем механических свойств, значительно превышающем таковые для исходных тугоплавких соединений. Так, контактная прочность на сжатие композита B_4C-CaB_6 оказывается равной 6,25 ГПа, тогда как ее величина оказывается порядка 0,9 ГПа у “слабой” компоненты CaB_6 и 2,2 ГПа — у “прочной” компоненты B_4C .

Полученный экспериментальный результат находится в полном соответствии с выводами аналитической модели квазистатического внедрения индентеров в хрупкие тела [1], учитывающей затраты энергии внедрения на уплотнение фрагментированного порошкового материала, образующегося в “ядре” разрушения под областью контакта.

Таким образом, результаты исследований горячепрессованной керамики из карбида бора, а также керамики систем B_4C-CaB_6 и $B_4C-CaB_6-TiB_2$ показали:

присутствие свободного углерода в количестве до 4% (об.) приводит к уменьшению жесткости материала и падению модуля Юнга до 400 ГПа и 370 ГПа в керамике B_4C и B_4C-CaB_6 соответственно. Введение дополнительных количеств диборида титана увеличивает модуль Юнга до 430 ГПа, но его величина оказывается существенно ниже расчетной;

прочность при изгибе образцов керамики B_4C-CaB_6 оказалась практически постоянной (420–425 МПа) при одновременно высоких значениях макротвердости ($HV_{P=200\text{H}} \sim \sim 25$ ГПа). В случае перехода к композиционной керамике с 20% TiB_2 прочность увеличивалась до уровня 500 МПа при более низких значениях макротвердости ($HV_{P=200\text{H}} \sim \sim 20$ ГПа);

расчет характеристик контактной прочности показал их наивысшие значения для двухфазной системы B_4C-CaB_6 (6,25 ГПа) и перспективность этой керамики в качестве материалов с высоким сопротивлением внедрению при ударе.

1. Галанов Б. А., Григорьев О. Н. Аналитическая модель индентирования хрупких материалов. Электронная микроскопия и прочность материалов. – Киев: Изд-во ИПМ НАНУ. – 2006. – Вып. 13. – С. 4–42.
2. Galanov B. A., Grigoriev O. N., Milman Yu. V., Trefilov V. I. Structural materials: theoretical fundamentals // Ceramic and Carbon-matrix Composites / Ed. by V. I. Trefilov. – New York: Chapman and Hall. – 1995. – P. 1–29.
3. Bochko A. V., Zaporozhets O. I. Elastic Constants and Elasticity Moduli of Cubic and Wurtzitic Boron Nitride // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. – 1996. – No 7–8. – P. 417–423.
4. Zaporozhets O. I., Lichko A. V., Nemoshkalenko V. V. et al. A technology for non-destructive testing of metalworks // Met. Phys. Adv. Tech. – 1999. – 17. – P. 961–971.
5. Григорьев О. Н. Исследование пластических и прочностных свойств сверхтвердых материалов методами микровдавливания // Порошк. металлургия. – 1982. – № 1. – С. 74–83.
6. Григорьев О. Н., Трефилов В. И., Шатохин А. М. Влияние температуры на разрушение хрупких материалов при сосредоточенном нагружении // Там же. – 1983. – № 12. – С. 75–82.

Институт проблем материаловедения
им. И. Н. Францевича НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 23.03.2012

Член-корреспондент НАН України **О. М. Григорьев, Б. О. Галанов, О. В. Коротеєв, В. А. Котенко, Л. М. Мелак**

Структура та опір проникненню гетерофазної кераміки $B_4C-CaB_6-TiB_2$

Досліджено закономірності фазо- та структуроутворення, а також міцнісні характеристики гетерофазної кераміки систем B_4C-CaB_6 і $B_4C-CaB_6-TiB_2$. Показано, що при застосуванні технології реакційного гарячого пресування присутність вільного вуглецю в шихті забезпечує відновлення оксидних домішок та активує процес спікання. При цьому міцність при згині отриманих композитів B_4C-CaB_6 в інтервалі концентрацій CaB_6 0–30% (об.) становить 420–425 МПа та збільшується до 500 МПа при введенні у кераміку 20% (об.) TiB_2 . В рамках аналітичної моделі квазістатичного проникнення ударників у крихкі тіла встановлено, що гетерофазна кераміка B_4C-CaB_6 , яка складається з “міцної” (карбід бора) і “слабкої” (борид кальцію) компонент, має значно вищий рівень механічних властивостей, ніж відповідна монофазна кераміка.

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **O. N. Grigoriev, B. A. Galanov, A. V. Koroteev, V. A. Kotenko, L. M. Melakh**

Structure and resistance of the heterophase ceramic $B_4C-CaB_6-TiB_2$ to penetration

Regularities of the phase and structure formation and strength characteristics of ceramic heterophase systems B_4C and $B_4C-CaB_6-CaB_6-TiB_2$ are investigated. It is shown that, under the application of technologies of the reaction hot pressing, the presence of free carbon in the charge ensures the recovery of oxide impurities and activates the sintering. In this case, the flexural strength of the composites B_4C-CaB_6 in the concentration interval 0–10 vol.% CaB_6 is 420–425 MPa and increases up to 500 MPa with the introduction of about 20 vol.% TiB_2 in the ceramic. Within the analytical model of quasistatic penetration of indenters in brittle solids, it is established that heterophase ceramics B_4C-CaB_6 composed of “strong” (boron carbide) and “weak” (calcium boride) components has higher mechanical properties than the corresponding monophasic ceramics.



УДК 551.465(262.5)

© 2012

Д. В. Алексеев

Численное моделирование влияния гидротехнических сооружений на характеристики ветрового волнения в Севастопольской бухте

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Л. В. Черкесовым)

С использованием спектральной численной модели SWAN исследована эффективность ослабления штормового волнения защитными молами в Севастопольской бухте. Проанализированы параметры волн, генерируемых ветрами четырех основных румбов. Установлено, что волны из северо-западной части Черного моря интенсивно проникают в Севастопольскую бухту при западном ветре и значительно меньше — при северном и южном ветрах. Защитный эффект молв проявляется только в западной части бухты, причем уменьшение волнения у южного берега значительно сильнее, чем у северного. Полностью защищенным от штормовых волн оказывается участок южного побережья непосредственно за южным молем, а с удалением от мола опасность воздействия интенсивного волнения на берег сохраняется.

Севастопольская бухта — небольшая часть моря, обособленная от открытых вод частями суши. Местные условия определяют гидрологический режим бухты, несколько отличающийся от режима прилегающих к ней вод. Расположена на юго-западной оконечности Крымского полуострова, вытянута в зональном направлении с запада на восток на 7,5 км [1]. Наибольшая ширина бухты близка к 1 км, а ее глубина постепенно уменьшается от 20 м на западе до 4–5 м на востоке (рис. 1). Бухта находится в границах г. Севастополь, служит удобным местом для стоянки судов. Через нее налажено пассажирское сообщение между северной и южной сторонами города.

Проникновение в Севастопольскую бухту штормовых волн, сформировавшихся в северо-западной части Черного моря, может приводить к разрушению береговых построек и набережной, нарушению пассажирского сообщения, авариям морских судов [2]. Для защиты акватории бухты от интенсивного волнения и предотвращения частых закрытий внутреннего рейда в 70-х годах прошлого столетия у ее входа были построены южный и северный защитные молы [3], расстояние между которыми составляет 550 м [2]. Однако до настоящего времени оценки защитного эффекта молв, полученные с использованием современных достижений в области математического моделирования, отсутствуют.

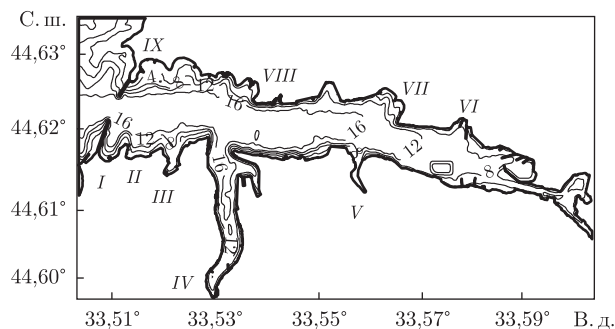


Рис. 1. Батиметрия Севастопольской бухты (в м) при наличии защитных молов. Римскими цифрами обозначены: I — Мартынова бухта; II — Александровская бухта; III — Артиллерийская бухта; IV — Южная бухта; V — Килен бухта; VI — Сухарная бухта; VII — бухта Голландия; VIII — Северная бухта; IX — Константиновская бухта

В данном сообщении представлены результаты моделирования волновых полей в Севастопольской бухте при наличии и отсутствии молов для ветров четырех основных румбов и выполнен их сравнительный анализ.

1. Математическая постановка задачи и метод решения. Для расчета параметров ветрового волнения будем использовать спектральную модель SWAN (Simulating Waves Near Shore) [4], которая базируется на уравнении баланса волновой энергии

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial(c_{gx}N)}{\partial x} + \frac{\partial(c_{gy}N)}{\partial y} + \frac{\partial(c_{\omega}N)}{\partial \omega} + \frac{\partial(c_{\varphi}N)}{\partial \varphi} = \frac{S}{\omega}, \quad (1)$$

где $N = E(t, x, y, \omega, \varphi)/\omega$ — плотность волнового действия ($E(t, x, y, \omega, \varphi)$ — частотно-угловой спектр волнения, t — время, x и y — горизонтальные координаты, отсчитываемые на восток и север соответственно, $\omega = \sqrt{gk \operatorname{th}(kD)}$ — частота волн, φ — направление распространения волн); $\{c_{gx}, c_{gy}\} = c_g \{k_x/k, k_y/k\}$; $c_g = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{g}{k} \operatorname{th}(kD)} \left(1 + \frac{2kD}{\operatorname{sh}(2kD)}\right)$; $\{k_x, k_y\}$ — компоненты волнового вектора; $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$; $D(x, y)$ — глубина моря; g — ускорение свободного падения; $c_{\omega} = \frac{\partial \omega}{\partial D} \frac{\partial D}{\partial t}$; $c_{\varphi} = -\frac{1}{k} \frac{\partial \omega}{\partial D} \frac{\partial D}{\partial m}$ (m — координата, отсчитываемая по нормали к направлению распространения волн φ); $S = S_{in} + S_{nl} + S_{wc} + S_{bf} + S_{dib}$ — функция источника (S_{in} — источник энергоснабжения волн ветром [5], S_{nl} — энергия нелинейных взаимодействий спектральных гармоник, складывающаяся из энергий трех- и четырехволновых взаимодействий [6, 7], S_{wc} — диссипация энергии вследствие обрушения волновых гребней [5], S_{bf} — диссипация энергии вследствие донного трения [8], S_{dib} — энергия обрушения волн на критических глубинах [9]).

При решении уравнения (1) на твердых боковых границах полагается $E = 0$. По угловой переменной используется условие периодичности $E(\varphi = 0) = E(\varphi = 2\pi)$, по частотной переменной для минимальной ω_{\min} и максимальной ω_{\max} частот — условие $E(\omega_{\min}) = E(\omega_{\max}) = 0$.

Зная плотность волнового действия $N(\omega, \varphi)$, а значит, и частотно-угловой спектр $E(\omega, \varphi)$, получаем оценки ряда спектральных характеристик волнения [4]:

высоту значительных волн (далее — высота волн)

$$H_s = 4 \sqrt{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} E(\omega, \varphi) d\omega d\varphi}, \quad (2)$$

среднеквадратичное значение придонной орбитальной скорости

$$U_{bot} = \sqrt{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{\omega^2}{g^2 \operatorname{sh}^2(kD)} E(\omega, \varphi) d\omega d\varphi} \quad (3)$$

и среднее направление распространения волн

$$\varphi = \arctg \left[\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \sin \varphi E(\omega, \varphi) d\omega d\varphi / \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \cos \varphi E(\omega, \varphi) d\omega d\varphi \right]. \quad (4)$$

Параллельный вариант модели SWAN был инсталлирован на вычислительном кластере Морского гидрофизического института НАН Украины. Для повышения пространственного разрешения расчеты волновых полей проводились на четырех вложенных сетках, покрывавших Азово-Черноморский бассейн, западное побережье Крыма, юго-западное побережье Крыма и Севастопольскую бухту с разрешением $4,6 \times 4,5$ км, 211×197 м, 49×48 м и 10×11 м соответственно. На последнем этапе расчетов в SWAN учитывался эффект дифракции. Угловое разрешение модели составляло 10° . По частотной координате использовалась сетка с 32 узлами в диапазоне частот от 0,04 до 2,00 Гц.

2. Анализ результатов численных экспериментов. Согласно анализу наблюдений за направлением ветра на морской гидрометеорологической станции “Севастополь” [2], над Севастопольской бухтой в течение года наибольшую повторяемость имеют ветры основных румбов: северного, южного, восточного и западного, а также северо-восточного. При этом скорости восточных ветров минимальны. Среди сильных ветров наибольшую повторяемость имеют ветры южных направлений [2]. Сильные западные и юго-западные ветры достаточно редки, однако во время штормов они могут достигать ураганной силы.

Оценим защитный эффект молов для волн, генерируемых штормовыми ветрами (20 м/с) четырех основных румбов: северного, южного, западного и восточного. Интенсивность ветрового волнения, помимо силы ветра, определяется величиной разгона волн и географическими особенностями акватории.

При западном ветре разгон волн происходит во всей акватории северо-западной части Черного моря. Далее волны свободно проникают в Севастопольскую бухту вдоль ее оси, уменьшаясь по высоте с запада на восток от 4 до 1 м (рис. 2, а, б) как при наличии, так и при отсутствии молов. Наличие защитных молов оказывает заметное влияние на характеристики волнового поля только от западной части Севастопольской бухты до бухты Голландия (расположение бухт здесь и далее см. на рис. 1). Особенно существенно это влияние у южного побережья за молотом. Действительно, при отсутствии молов волны высотой 2–3 м проникают в Мартынову бухту, высотой 1–2 м — в Александровскую и Артиллерийскую бухты, а на участок побережья между Артиллерийской и Южной бухтами воздействуют волны высотой 2–2,5 м (см. а на рис. 2). Наличие молов приводит к уменьшению

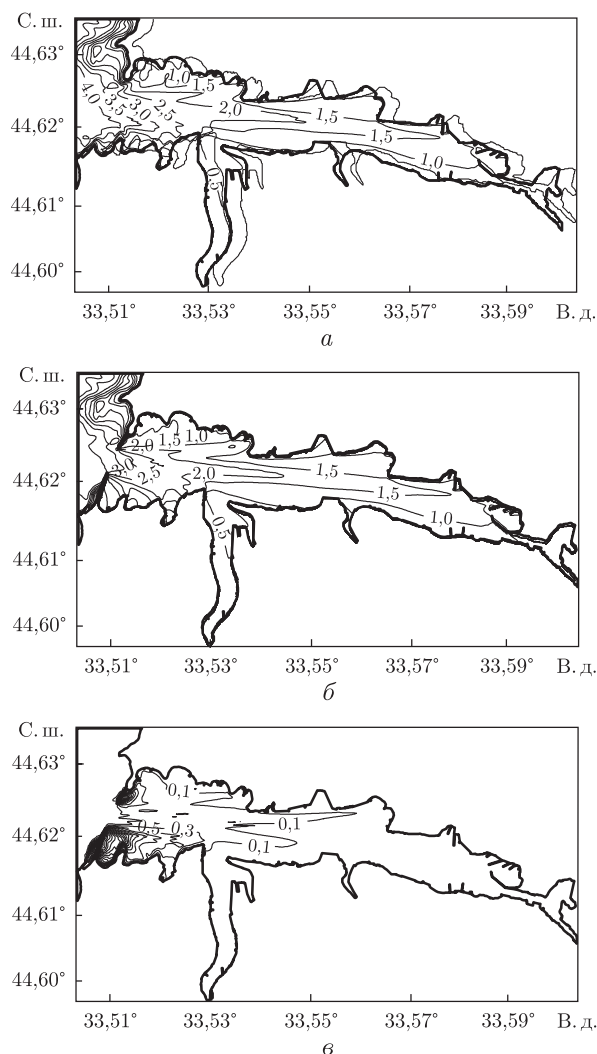


Рис. 2. Поле высот волн (в м) в Севастопольской бухте в случае стационарного западного ветра скоростью 20 м/с при отсутствии (а) и наличии (б) защитных молов, а также разность данных высот волн (в)

высот волн в Мартыновой бухте более чем на 1,5 м, в Александровской бухте — на 0,5–1 м, в Артиллерийской бухте — на 0,1–0,4 м, а у побережья между Артиллерийской и Южной бухтами — на 0,3–0,5 м (см. б, в на рис. 2). Северное побережье защищено естественным образом Константиновским мысом, к которому примыкает северный мол, и отмелью, расположенной западнее него. Поэтому при отсутствии молов высоты волн в бухтах северного побережья не превышают 1 м и только в Северной бухте они достигают 1,5 м. Ослабление волнения за счет наличия молов здесь оказывается менее существенным и составляет 0,1 м. Непосредственно в Северной бухте интенсивность волнения практически не изменяется.

В случае отсутствия молов направление распространения волн при западном ветре вблизи оси Севастопольской бухты совпадает с направлением ветра, а у берегов отклоняется в сторону меньших глубин, т.е. к северу — у северного побережья и к югу — у южного (рис. 3, а). Наличие молов приводит к увеличению данного отклонения в западной части акватории (за исключением Александровской, Артиллерийской и Южной бухт). В Мар-

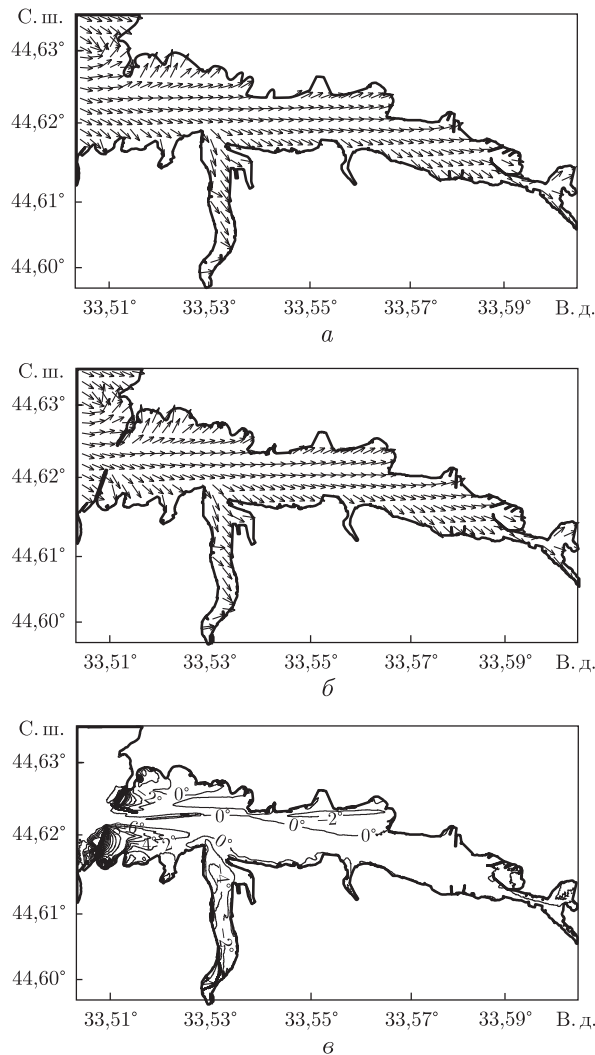


Рис. 3. Направления волн (срелки на схемах) в Севастопольской бухте в случае стационарного западного ветра скоростью 20 м/с при отсутствии (а) и наличии (б) защитных молов, а также разность данных направлений волн (в град), отсчитываемых от направления на восток против часовой стрелки (в)

тыновой бухте изменение направления волн составляет более 10° , а в остальной части акватории оно значительно меньше и не превышает $1-2^\circ$ (см. б, в на рис. 3).

При северном и южном ветрах в северо-западной части Черного моря генерируются волны соответствующих направлений. В прибрежной зоне направление волн отклоняется от направления ветра в сторону меньших глубин, поэтому в Севастопольскую бухту проникают волны, распространяющиеся на юго-восток в случае северного ветра и на северо-восток в случае южного. При отсутствии молов высоты волн на входе в бухту составляют 2,5 и 1,2 м при северном и южном ветрах соответственно. Такая разница значений обусловлена экранирующим эффектом юго-западной оконечности Крымского полуострова для волн, генерируемых южным ветром. При северном ветре волны наиболее интенсивно воздействуют на участок южного побережья западнее Южной бухты, тогда как при южном ветре интенсивность волнения у южного и северного берегов западной части Севастопольской бухты

практически одинакова. Наличие молов приводит к тому, что при северном ветре волны высотой более 2 м не проникают в Севастопольскую бухту. В Мартыновой бухте уменьшение высот волн составляет более 1 м, в Александровской и Константиновской бухтах — около 0,2 м, на участке побережья между Артиллерийской и Южной бухтами — 0,1 м. В Северной бухте ослабления волнения не происходит. При южном ветре уменьшение высот волн прослеживается только у южного побережья и составляет 0,1–0,8 м. В восточной части Севастопольской бухты в случаях северного и южного ветров преобладают волны высотой 0,4–0,6 м вне зависимости от наличия молов.

При отсутствии молов проникновение волн из северо-западной части Черного моря и влияние особенностей береговой линии и дна приводят к тому, что в случае северного ветра направление волн в Севастопольской бухте существенно отклоняется к востоку от направления ветра практически во всей акватории, а в случае южного ветра — в области, западнее Килен бухты. В последнем случае на входе в Севастопольскую бухту волны распространяются в направлении, близком к зональному. Наличие молов приводит к меньшему проникновению волн из северо-западной части моря и, как следствие, к меньшему отклонению их направления к востоку от направления ветра. При южном ветре уменьшение указанного отклонения достигает 20° , а при северном — 10° в области между Южной и Килен бухтами.

При восточном ветре волны из северо-западной части Черного моря не проникают в Севастопольскую бухту. Интенсивность волнения, образующегося в самой бухте, определяется длиной разгона, которая ограничена размерами акватории. В этом случае высоты волн оказываются наименьшими и составляют 0,2 м на востоке бухты и 0,8 м на западе. При данном направлении ветра молы не оказывают заметного влияния на характеристики волнового поля к востоку от них. Направление распространения волн вблизи оси бухты соответствует направлению ветра, а около северного и южного берегов отклоняется к северу и югу соответственно.

Таким образом, наиболее интенсивное волнение проникает в Севастопольскую бухту из северо-западной части Черного моря при западном ветре. При южном и северном ветрах волны меньшей интенсивности проникают в бухту вследствие отклонения их направления от направления ветра при рефракции на мелководье. При восточном ветре волнение в Севастопольской бухте достаточно слабое, так как развивается только в пределах ее акватории. В случае отсутствия молов при западном, северном и южном ветрах наибольшее воздействие волны оказывают на южное побережье Севастопольской бухты к западу от Южной бухты. Северное побережье в значительной степени защищено естественными особенностями береговой линии и дна. Существенному воздействию волнения здесь подвергается только Северная бухта при западном и южном ветрах. При западном ветре штормовой силы защитный эффект молов оказывается максимальным в Мартыновой и Александровской бухтах, расположенных непосредственно за южным молом. Уменьшение интенсивности волнения в Артиллерийской бухте и на участке побережья от Артиллерийской до Южной бухт происходит в меньшей степени. На характеристики волнения в Северной бухте наличие молов практически не оказывает влияния. При северном и южном ветрах защитный эффект молов менее существенен, а при восточном ветре он отсутствует.

1. Овсянный Е. И., Кемп Р. Б., Репетин Л. Н., Романов А. С. Гидролого-гидрохимический режим Севастопольской бухты в условиях антропогенного воздействия (по наблюдениям 1998–1999 гг.) // Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа: Сб. науч. тр. – Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2000. – С. 79–103.

2. Репетин Л. Н., Белокопытов В. Н., Липченко М. М. Ветры и волнение в прибрежной зоне юго-западной части Крыма // Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа: Сб. науч. тр. – Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2003. – Вып. 9. – С. 13–28.
3. Соловьева О. В. Эффективность гидротехнических сооружений в процессах самоочищения прибрежных вод // Экология моря. – 2008. – Вып. 76. – С. 90–95.
4. <http://www.swan.tudelft.nl>.
5. Komen G. J., Hasselmann S., Hasselmann K. On the existence of a fully developed wind-sea spectrum // J. Phys. Oceanogr. – 1984. – **14**. – P. 1271–1285.
6. Hasselmann S., Hasselmann K., Allender J. H., Barnett T. P. Computations and parameterizations of the nonlinear energy transfer in a gravity wave spectrum. Part II: Parameterizations of the nonlinear transfer for application in wave models // Ibid. – 1985. – **15**. – P. 1378–1391.
7. Eldeberky Y. Nonlinear transformation of wave spectra in the nearshore zone: Ph. D. thesis. – Delft: Delft Univ. Technol., 1996.
8. Madsen O. S., Poon Y.-K., Graber H. C. Spectral wave attenuation by bottom friction: Theory: Proc. of the 21th Intern. conf. Coastal Engineering, 20–25 June, 1988. – Spain, Costa del Sol-Malaga. – New York: ASCE, 1988. – P. 492–504.
9. Battjes J. A., Janssen J. P. F. M. Energy loss and set-up due to breaking of random waves: Proc. of the 16th Intern. conf. Coastal Engineering, 27 Aug. – 03 Sep., 1978. – Hamburg. – New York: ASCE, 1978. – P. 569–587.

Морской гидрофизический институт
НАН Украины, Севастополь

Поступило в редакцию 09.04.2012

Д. В. Алексеєв

Чисельне моделювання впливу гідротехнічних споруд на характеристики вітрового хвилювання в Севастопольській бухті

З використанням спектральної чисельної моделі SWAN досліджено ефективність послаблення штормового хвилювання захисними молами в Севастопольській бухті. Проаналізовано параметри хвиль, що генеруються вітрами чотирьох основних румбів. Встановлено, що хвилі з північно-західної частини Чорного моря інтенсивно проникають у Севастопольську бухту при західному вітрі та значно меншою мірою – при північному й південному вітрах. Захисний ефект молів проявляється тільки в західній частині бухти, причому зменшення хвилювання біля південного берега значно сильніше, ніж біля північного. Повністю захищеною від штормових хвиль виявляється ділянка південного узбережжя безпосередньо за південним молем, а з віддаленням від молу небезпека впливу інтенсивного хвилювання на берег зберігається.

D. V. Alekseev

Numerical simulation of the effect of hydrotechnical structures on wind wave parameters in the Sevastopol Bay

Effectiveness of the storm wave attenuation by the protective piers in the Sevastopol Bay is studied by using the SWAN spectral numerical model. Parameters of waves generated by winds of four main points are analyzed. It is obtained that the waves from the north-west part of the Black Sea intensively penetrate into the Sevastopol Bay in the case of west winds and to a lesser degree in the case of north and south winds. The protective effect of the piers occurs only in the west part of the bay, and the wave attenuation near the south coast is more significant than that near the north one. The area of the south coast directly behind the south pier is completely protected from the storm waves, but the danger of the intensive wave effect on the coast remains at the distance from the pier.

Член-кореспондент НАН України **В. А. Даниленко,**
С. І. Скуратівський

Солітоноподібні хвилі в нерівноважних середовищах

Досліджуються хвильові розв'язки математичної моделі нерівноважного середовища, яка є одновимірною системою рівнянь гідродинаміки, замкненою нелокальним динамічним рівнянням стану. За допомогою методів якісного аналізу показано, що динамічна система, яка описує хвильові розв'язки моделі, має гомоклінічні розв'язки шильніковського типу, в околі яких виникають періодичні та хаотичні атрактори або багатооб'їдні гомоклінічні петлі при зміні параметрів моделі.

На сьогодні нерівноважні середовища різної природи є об'єктами численних досліджень через їх здатність до формування часово-просторових структур [1–3]. У даній роботі вивчається: як врахування слабкої нерівноважності середовища у поєднанні з фізичною його нелінійністю впливає на появу локалізованих хвильових режимів різних видів та їх біфуркації залежно від параметрів моделі? Розглядається математична модель нерівноважного середовища [3, 4]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial t} - V_0 \frac{\partial u}{\partial r} &= 0, & \frac{\partial u}{\partial t} + V_0 \frac{\partial p}{\partial r} &= 0, \\ \left(\frac{V_0}{V}\right)^2 \left(-\tau_{TP} \frac{\partial^3 V}{\partial t^3} + \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} - \frac{1}{\tau_{TP}} \frac{\partial V}{\partial t}\right) + \omega_0^2 V_0^{-1} \left(\left(\frac{V_0}{V}\right)^{\Gamma_{V_0}} - 1\right) &= \\ &= \left(p - p_0 + \tau_{TV} \frac{\partial p}{\partial t} - \tau_{TP} \tau_{TV} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + \tau_{TP}^2 \tau_{TV} \frac{\partial^3 p}{\partial t^3}\right) b, \end{aligned} \quad (1)$$

де V – питомий об'єм; u – швидкість; p – тиск; $\tau_{TP} = \tau_{TV} \chi_{T_0} \chi_{T_\infty}^{-1}$, де $\chi_{T_0} = V_0 c_{T_0}^{-2}$, χ_{T_0} , χ_{T_∞} – ізотермічні коефіцієнти стиснення, τ_{TP} , τ_{TV} – часи релаксації; $\omega_0^2 = c_{S_0}^2 b \alpha_0 T_0 \gamma_0^{-1}$, де α_0 – коефіцієнт теплового розширення, γ_0 – показник політропи; $b = V_0 \chi_{T_\infty} \tau_{TV}^{-1} \tau_{TP}^{-1}$; Γ_{V_0} – коефіцієнт Грюнайзена; c_{S_0} , c_{T_0} – швидкості звуку в середовищі. Нульові індекси – характеристики середовища в рівноважному стані.

Виконаємо знерозмірення системи (1), використовуючи масштабне перетворення $t = t_0 \bar{t}$, $r = u_0 t_0 \bar{r}$, $V = V_0 \bar{V}$, $u = u_0 \bar{u}$, $p = p_0 + u_0^2 V_0^{-1} \bar{p}$ (тут t_0 , u_0 , V_0 є характерними величинами середовища). Тоді модель (1) має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial r} &= 0, & \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial r} &= 0, \\ \frac{\delta \tau Q}{V^2} \left(-\tau^2 Q^2 \frac{\partial^3 V}{\partial t^3} + \tau Q \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} - \frac{\partial V}{\partial t}\right) + \kappa \left(\frac{1}{V^n} - 1\right) &= p + \tau \frac{\partial p}{\partial t} - \tau^2 Q \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + \tau^3 Q^2 \frac{\partial^3 p}{\partial t^3}, \end{aligned} \quad (2)$$

де

$$\delta = \left(\frac{c_{T_0}}{u_0}\right)^2, \quad Q = \frac{\chi_{T_0}}{\chi_{T_\infty}}, \quad \kappa = \left(\frac{c_{S_0}}{u_0}\right)^2 \frac{\alpha_0 T_0}{\gamma_0}, \quad n = \Gamma_{V_0}, \quad \tau = \frac{\tau_{TV}}{t_0}.$$

Розглянемо випадок, коли $n = 1$. Хвильовий розв'язок системи (2) визначається виразами

$$V = V(\xi), \quad u = U(\xi), \quad p = P(\xi), \quad \xi = r - Dt. \quad (3)$$

Отже, з перших двох рівнянь системи (2) отримаємо

$$V = V_0 - \frac{1}{D}U, \quad P = P_0 + DU = \kappa \left(\frac{1}{V_0} - 1 \right) + DU$$

та динамічну систему

$$\begin{aligned} \frac{dU}{d\xi} &= X, & \frac{dX}{d\xi} &= Y, \\ \frac{dY}{d\xi} &= -\frac{1}{DQ\tau}Y - \frac{1}{(DQ\tau)^2}X + F(U), \end{aligned} \quad (4)$$

де

$$F(U) = \frac{U(U - DV_0)(\kappa + DV_0\{U - DV_0\})}{D^4Q^2\tau^3V_0(-\delta Q + (U - DV_0)^2)} \quad (-\delta Q + (U - DV_0)^2 \neq 0).$$

Значимо, що система (4) в асимптотичних випадках збігається з динамічною системою, яка описує хвильові розв'язки рівняння Курамото–Сивашинського $u_t + auu_x + bu_{xx} + cu_{xxx} + du_{xxxx} = 0$ [5, 6].

Стационарні точки системи (4) мають координати

$$O(0; 0; 0), \quad A(DV_0; 0; 0;), \quad B\left(DV_0 - \frac{\kappa}{DV_0}; 0; 0\right),$$

площина розриву визначається рівнянням $U = DV_0 \pm \sqrt{\delta Q}$. Стационарна точка B може потрапляти в цю площину при

$$\kappa = DV_0\sqrt{\delta Q}. \quad (5)$$

Тип стационарних точок визначається власними значеннями матриці лінеаризованої системи

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \end{pmatrix}.$$

Очевидно, для всіх точок $\alpha_2 = -(DQ\tau)^{-2}$, $\alpha_3 = -DQ\tau$.

$$\text{Для точки } O: \quad \alpha_1 = \frac{D^2V_0^2 - \kappa}{D^3Q^2\tau^3(D^2V_0^2 - \delta Q)}.$$

$$\text{Для точки } A: \quad \alpha_1 = \frac{-\kappa}{D^3Q^3\tau^3\delta}.$$

$$\text{Для точки } B: \quad \alpha_1 = \frac{(D^2V_0^2 - \kappa)\kappa}{D^3Q^2\tau^3(D^2V_0^2\delta Q - \kappa^2)}.$$

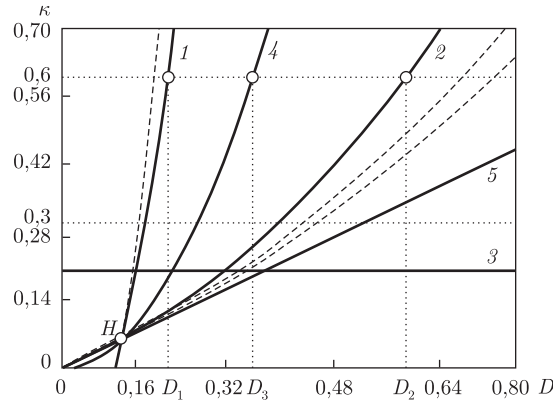


Рис. 1. Структура параметричної площини $(D; \kappa)$ при $\delta = 0,2$, $Q = 0,3$, $\tau = 0,5$, $V_0 = 2,3$, $D_1 = 0,187$, $D_2 = 0,607$, $D_3 = 0,337$. Лінії 1, 2, 3 — криві нейтральної стійкості (7) точок O , A , B ; лінія 4 — графік функції (8); лінія 5 — графік лінії (5)

З метою формулювання необхідних умов народження періодичних коливань у системі (4) проаналізуємо характеристичне рівняння матриці J : $\lambda^3 - \text{sp } J\lambda^2 + \sum_{i=1}^3 J_{ii}\lambda - \det J = 0$. Враховуючи особливий вигляд матриці J , характеристичне рівняння можна записати в такій формі: $\lambda^3 - \alpha_3\lambda^2 - \alpha_2\lambda - \alpha_1 = 0$. Тоді умовою наявності алгебраїчного рівняння третього степеня двох суто уявних коренів є виконання рівності $\det J = \text{sp } J \cdot \sum_{i=1}^3 J_{ii}$, з якого випливає зв'язок між параметрами

$$\alpha_1 + \alpha_2\alpha_3 = 0.$$

Підставляючи значення α_i в останнє рівняння, отримуємо таке:

$$\begin{aligned} \text{для точки } O: \quad & D^2(1+Q)V_0^2 = (\delta + \kappa)Q; \\ \text{для точки } A: \quad & \delta = \kappa; \\ \text{для точки } B: \quad & \kappa^2(1+Q) = D^2QV_0^2(\delta + \kappa). \end{aligned} \quad (6)$$

Ці умови в площині параметрів D й κ зображаються лініями (кривими нейтральної стійкості), рівняння яких мають вигляд

$$\kappa = D^2 \frac{1+Q}{Q} V_0^2 - \delta, \quad \kappa = \frac{D^2 Q V_0^2 \pm \sqrt{(D^2 Q V_0^2)^2 + 4(1+Q)D^2 Q V_0^2 \delta}}{1+Q}. \quad (7)$$

До біфуркаційних ліній також віднесемо сукупність точок, які відповідають умові існування нульового власного значення матриці J : $\alpha_1 = 0$. Для точок O й B з цієї умови випливає:

$$\kappa = D^2 V_0^2. \quad (8)$$

Дослідимо структуру параметричної площини $(D; \kappa)$ при фіксованих значеннях параметрів $\delta = 0,2$, $Q = 0,3$, $\tau = 0,5$, $V_0 = 2,3$ (рис. 1). Для цього побудуємо графіки функцій (7) —

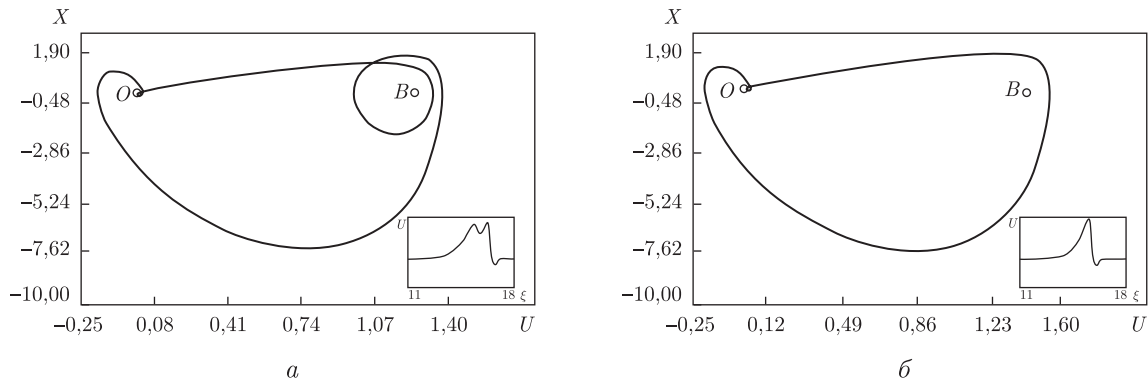


Рис. 2. Фазові портрети гомоклінічних петель при $\kappa = 0,6$ й $D = 0,7036786$ (а), $D = 0,761776$ (б)

кривих нейтральної стійкості критичних точок O й B системи (4), а також графік функції (8) — умову виродження матриці J . Проаналізуємо можливість перетину всіх трьох кривих на рис. 1 в одній точці. Для цього дослідимо систему алгебраїчних рівнянь

$$D^2(1+Q)V_0^2 = (\delta + \kappa)Q, \quad \kappa^2(1+Q) = D^2QV_0^2(\delta + \kappa), \quad \kappa = D^2V_0^2.$$

Легко перевірити, що вона сумісна та її додатний розв'язок є координатами точки перетину кривих $H(\delta Q; V_0^{-1}\sqrt{\delta Q})$. Дослідимо структуру розв'язків системи (4) при зміні параметрів κ й D з області, зображеної на рис. 1.

Випадок 1. Зафіксуємо $\kappa = 0,6$, тоді точка O має пару суто уявних власних значень при $D_1 = 0,187$, точка B — при $D_2 = 0,607$. В інтервалі $D_1 < D < D_2$ існує траєкторія, яка з'єднує стійку стаціонарну точку O з нестійкою точкою B . Періодичних або хаотичних розв'язків у фазовому просторі поблизу стаціонарних точок не виявлено.

Розглянемо динаміку системи (4) при $D \notin (D_1; D_2)$. При $D < D_1$ та $D > D_2$ в околі відповідних точок спостерігається поява граничних циклів у фазовому просторі системи, що відповідає існуванню періодичних розв'язків системи (4). Зміна параметра D у відповідних інтервалах спричинює зростання розмірів граничних циклів та каскад біфуркацій подвоєння періоду з утворенням хаотичних атракторів. При $0,7 < D < 0,755$ у фазовому просторі динамічної системи (4) локалізованих режимів не виявлено. Інший періодичний атрактор проявляється при $0,755 < D < 0,762$, зазнаючи біфуркацій подвоєння періоду з утворенням хаотичного атрактору.

При вивченні структури околу стаціонарних точок не менш важливим є дослідження поведінки сепаратрисних траєкторій, а саме, існування гомоклінічних петель сідлових точок. Пошук гомоклінічних петель у системі (4) проводився за допомогою числових методів. Оскільки власні значення матриці J при $D = 0,7036786$ у стаціонарній точці O [$\lambda = (1,824; -5,649 \pm 8,857i)$], то петля має нестійкий одновимірний багатовид та двовимірний стійкий із сідловою величиною $\Sigma = \text{Re}(\lambda_1) + \text{Re}(\lambda_{2,3}) = -3,825 < 0$. Інтегруючи з початковими умовами $\varepsilon \vec{v}$, де $\varepsilon = 10^{-10} \dots 10^{-14}$, \vec{v} — власний вектор, що відповідає власному значенню $\lambda_1 > 0$, отримуємо траєкторію, яку в певному наближенні можна назвати гомоклінічною петлею (рис. 2, а). Нестійкий двовимірний багатовид точки B [власні значення $\lambda = (-12,275; 1,401 \pm 11,054i)$] частково захоплює гомоклінічну траєкторію точки O , що зумовлює існування на фазовому портреті (див. а на рис. 2) додаткового витка навколо точки B .

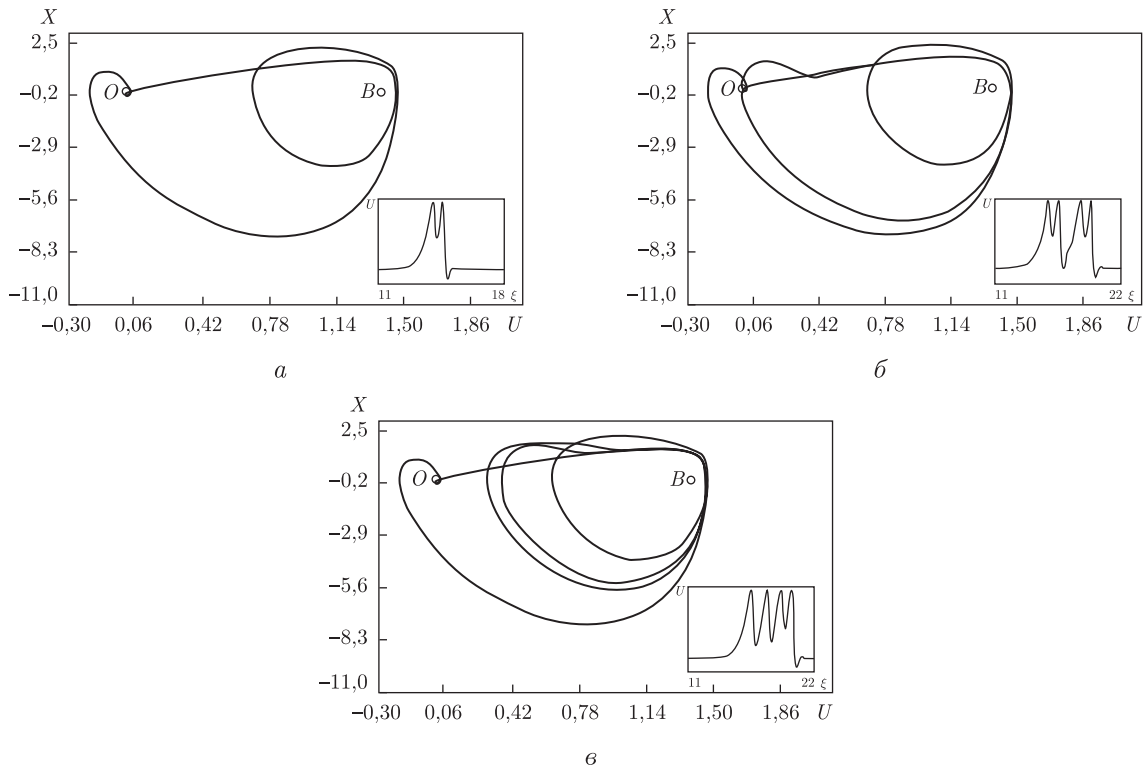


Рис. 3. Фазові портрети гомоклінічних петель ($\Sigma < 0$) при $\kappa = 0,6$ й $D = 0,7432618$ (а), $D = 0,7437897$ (б), $D = 0,7559667$ (в)

Аналогічно обчислювалась петля при $D = 0,761776$ з сідловою величиною $\Sigma = -3,506 < 0$ (див. б на рис. 2). У цьому випадку багатовиди точок O та B не взаємодіють і петля не має додаткових витків.

У параметричній площині $(D; \kappa)$ знайдені петлі утворюють зв'язні множини, позначені на рис. 1 пунктирними лініями. Виявилось, що ці геометричні місця точок також стягуються до точки H як і біфуркаційні лінії.

Порівняння фазових портретів петель рис. 2 свідчить про можливість існування в моделі (1) неklasичних солітоноподібних хвиль з кількома максимумами (багатогорбі). Детальний аналіз траєкторій, які починаються поблизу O показав, що окрім знайдених петель у фазовому просторі динамічної системи існують інші багатообхідні петлі (рис. 3). Оскільки для знайдених петель сідлова величина $\Sigma < 0$, то з петлі може народитись тільки один періодичний режим [7], що і спостерігається для петель рис. 2 й 3.

Випадок 2. Розглянемо структуру розв'язків динамічної системи (4) при $\kappa = 0,3$ та змінному D (див. рис. 1). Вивчення біфуркаційних діаграм при $\kappa = 0,3$ показує, що сценарії розвитку коливних режимів змінюються не істотно. Але при $D > \kappa / (V_0 \sqrt{\delta Q}) = 0,532$ (умова (5)) у частині фазового простору, де знаходяться стаціонарні точки A й B , розвивається граничний цикл. Його походження пов'язане з втратою точкою A стійкості поблизу кривої нейтральної стійкості при $\kappa > \delta = 0,2$. При цьому, як свідчать біфуркаційні діаграми, граничний цикл зазнає лише кількох біфуркацій періоду після чого колювання різко виходять на інший аттрактор, який зазнає біфуркацій з утворенням хаотичного аттрактору. Такий сценарій розвитку колювань вказує на можливість існування гомоклінічної петлі.

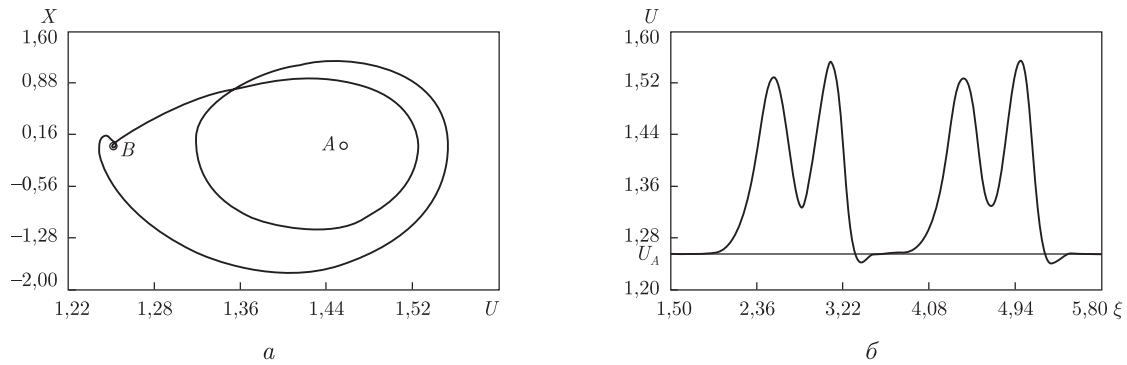


Рис. 4. Гомоклінічна петля (а) при $\kappa = 0,3$ й $D = 0,6352306$ ($\Sigma > 0$) та профіль координати $U(\xi)$ (б)

Гомоклінічну петлю було виявлено для точки B при $\kappa = 0,3$ й $D = 0,6352306$ (рис. 4, а). Для петлі — $\lambda = (12,551; -11,523 \pm 16,328i)$, сідлова величина $\Sigma = 1,028 > 0$. Це означає наявність в її околі складної структури траєкторій, зокрема нетривіальної гіперболічної підмножини [7], яка формує хаотичний атрактор. Для цього випадку в роботах [8–10] описано біфуркації в околі петлі та показано структурну нестійкість однопараметричних систем поблизу петлі. Зокрема, проаналізована можливість утворення багатообхідних петель, які повторюють форму основної петлі. У випадку системи (4) було виявлено таку двообхідну петлю (див. рис. 4).

Таким чином, динамічна система (4) має періодичні, мультиперіодичні, хаотичні, гетероклінічні та гомоклінічні розв'язки. Залежно від сідлової величини гомоклінічні петлі зазнають біфуркацій з утворенням періодичних режимів, багатообхідних петель або хаотичних атракторів. Причиною існування різноманітних хвильових режимів є нерівноважність середовища, яка відображена в динамічному рівнянні стану моделі (1).

1. Вахненко В. А., Даниленко В. А., Кулич В. В. Элементы теории самоорганизации и нелинейных волновых процессов в природных средах со структурой / НАН Украины. Ин-т геофизики им. С. И. Субботина. – Препр. – Киев, 1991. – 44 с.
2. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. – Москва: Мир, 2002. – 461 с.
3. Danylenko V. A., Danevych T. B., Makarenko O. S. et al. Self-organization in nonlocal non-equilibrium media. – Kyiv: S. I. Subbotin Ins-te of Geophys. NAS of Ukraine, 2011. – 333 p.
4. Даневич Т. Б., Даниленко В. А. Точні аналітичні розв'язки нелінійних рівнянь динаміки релаксуючих середовищ з просторовою та часовою нелокальністю // Доп. НАН України. – 2004. – № 3. – С. 110–114.
5. Демехин Е. А., Шкадов В. Я. О солитонах в диссипативных средах // Гидродинамика и теплообмен течений жидкости со свободной поверхностью / Сб. науч. тр. под ред. И. Р. Шрейбера. – Новосибирск: Ин-т техн. физ. Сиб. отд-ния АН СССР, 1985. – С. 32–48.
6. Кудряшов Н. А. Аналитическая теория нелинейных дифференциальных уравнений. – Москва; Ижевск: Ин-т компьютер. исследований, 2004. – 360 с.
7. Шильников Л. П. Теория бифуркаций и модель Лоренца // Бифуркация рождения цикла и ее приложения. – Москва: Мир, 1980. – С. 317–336.
8. Gonchenko S. V., Turaev D. V., Gaspard P., Nicolis G. Complexity in the bifurcation structure of homoclinic loops to a saddle-focus // Nonlinearity. – 1997. – **10**. – P. 409–423.
9. Wiggins S. Introduction to applied nonlinear dynamical systems and chaos. – Berlin: Springer, 1990. – 672 p.
10. Feroe J. A. Homoclinic orbits in a parametrized saddle-focus system // Phys. D. – 1993. – **62**. – P. 254–262.

Відділення геодинаміки вибуху
 Інституту геофізики ім. С. І. Субботіна
 НАН України, Київ

Надійшло до редакції 06.03.2012

Член-корреспондент НАН Украины **В. А. Даниленко, С. И. Скуратовский**

Солитоподобные волны в неравновесных средах

Исследуются волновые решения математической модели неравновесной среды, которая представляет собой одномерную систему уравнений гидродинамики, замкнутую нелокальным уравнением состояния. С помощью методов качественного анализа показано, что динамическая система, описывающая волновые решения модели, имеет гомоклинические решения шильниковского типа, в окрестности которых возникают периодические и хаотические аттракторы или многообходные гомоклинические петли при изменении параметров модели.

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **V. A. Danylenko, S. I. Skurativskyy**

Soliton-like waves in nonequilibrium media

The article deals with the wave solutions to a mathematical model for nonequilibrium media, which is a one-dimensional system of hydrodynamical equations closed by the nonlocal dynamical equation of state. Using the methods of qualitative analysis, it is shown that the dynamical system describing the wave solutions of the model possesses homoclinic solutions of the Shilnikov type. In a vicinity of these trajectories, the periodic and chaotic attractors or multi-circuit homoclinic loops are appear, when the parameters of the model are varied.

Г. М. Жолобак, З. М. Шпортюк, О. М. Сибірцева, С. С. Дугін

**Дослідження спектрів відбиття посівів озимої пшениці
молочно-воскової стиглості в зоні червоного краю
як потенційних індикаторів дистанційної диференціації
гетерогенності рослинного покриву**

(Представлено академіком НАН України В. І. Ляльком)

*Висвітлено результати спектрометрування приладом ASD FieldSpec[®] з FR дрібноділянкових посівів демонстраційного полігону елітного насінневого господарства “Золотий колос” у Миколаївській області, на підставі яких обчислено вегетаційні індекси червоного краю (REP, TCI, NDVI₇₀₅) для двох різновидів (лотесценс та еритроспермум) озимої пшениці м'якої (*Triticum aestivum* L.) та різновиду гордеїформе озимої пшениці твердої (*Triticum durum* Desf.). Найнижчі значення індексів виявлено в озимій пшениці м'якої з безостим колосом різновиду лотесценс, а найвищі — в озимій пшениці твердої різновиду гордеїформе.*

Дослідження спектрів відбиття рослинності за допомогою високоточної апаратури активно проводиться вже понад 30 років. Можна виокремити принаймні три напрями використання вимірювань спектральних характеристик рослинного покриву. Насамперед це пошук неруйнівних методів вивчення рослин, суть яких полягає у відшуканні кореляційних залежностей між спектральними коефіцієнтами відбиття (або обчисленими на їх основі вегетаційними індексами) та окремими біохімічними компонентами рослинних органів (пігментами, вмістом азоту або води) [1]. Другий напрям — оцінка можливості автоматизованої класифікації різних родів рослин зі змішаного посіву за допомогою високоточних безконтактних дистанційних вимірювань [2]. Третій — використання наземних гіперспектральних даних відбиття рослинності — зіставлення їх з інформацією, отриманою зі сенсорів, встановлених на борту космічних апаратів. Застосування методик й технік високоточного спектрометрування дозволяє перевірити, наскільки взаємоузгоджуються індекси, що розраховані на основі гіперспектральних даних наземного оптичного дистанційного зондування (ДЗ), та аналогічні індекси, що обчислені на підставі даних відбиття з порівняно ширших каналів космічних сенсорів. З них варто виділити вегетаційні індекси в області “червоного краю” Red Edge (660–780 нм), за допомогою яких можна неdestructивними методами оцінити різноманітні параметри і культурної, і природної рослинності [1, 3]. З 2010 р. в Україні поширюється інформація з німецького супутникового угруповання Rapid Eye, яке оснащено 5-канальними багатоспектральними оптико-електронними системами, що дозволяють отримувати знімки земної поверхні спеціальним каналом “червоного краю” (690–730 нм). Тому актуальності набувають наземні підсупутникові дослідження особливостей відбиття рослинних угруповань у цій спектральній зоні з метою їх подальшого зіставлення з інформацією, отриманою шляхом обробки космічних знімків.

Метою нашої роботи було дослідження вегетаційних індексів червоного краю окремих різновидів озимої пшениці, обчислених за даними вимірювань спектрорадіометром ASD



Рис. 1. Розташування поля (позначене світлим прямокутником), де знаходився демонстраційний полігон елітного насінневого господарства “Золотий колос”

FieldSpec[®]3 FR для подальшого їх зіставлення з аналогічними індексами, розрахованими по космічних знімках.

Експеримент зі спектрометрування сільськогосподарських культур степової зони України було виконано 16 червня 2010 р. польовим спектрометром у виробничих умовах на дрібноділянкових посівах демонстраційного полігону елітного насінневого господарства “Золотий колос” поблизу м. Миколаєва (рис. 1).

Спектрометрування посівів озимої пшениці приладом ASD FieldSpec[®]3 FR здійснювалося від 13 до 14 год при ясному небі і температурі повітря понад 30 °С. ASD FieldSpec[®]3 FR — польовий портативний переносний спекторадіометр, який охоплює діапазон реєстрації від 350 до 2500 нм. Увесь спектр 350–2500 нм відображається в реальному часі на дисплеї. З його іншими технічними параметрами можна ознайомитись на сайтах — <http://www.asdi-rus.ru/catalog/25/> та <http://www.asdi.com/products/fieldspec-3-portable-spectroradiometer>. Для отримання спектрів відбиття оптична насадка приладу встановлювалась скраю посіву на центральній поздовжній осі ділянки. Кут огляду використаного об’єктива — 1°, тримач пістолетного типу з оптичною насадкою закріплювався на стандартному штативі з висотою над поверхнею ґрунту — 1,2 м, віддаль від об’єктива до ділянки спектрометрування посіву — 5 м, величина площі посіву, яка потрапляє в поле зору — 80 см², кут нахилу оптичної осі об’єктива до вимірюваної площі — 14°. Калібрування до білого проводилось перед кожним вимірюванням на ділянці. Дані 10 спектрів (повторів вимірювання одного місця поверхні посіву кожного сорту) усереднювались програмно і використовувались для обчислення коефіцієнтів відбиття та вегетаційних індексів червоного краю *RE*.

На дату 16.06.2010 р. тут вирощувались різні сорти 14 сільськогосподарських культур, характерних для степової зони України. Об’єктом досліджень були посіви сортів озимої пшениці м’якої або звичайної (вид *Triticum aestivum* L., різновиди лютесценс та еритроспермум, ширина їх ділянок становила 3 м) та озимої пшениці твердої (вид *Triticum durum* Desf., різновид гордеїформе, ширина ділянок — 1,5 м), які перебували у фазі молочно-воскової стиглості і мали зімкнутий рослинний покрив.

Різновид лютесценс об’єднував безості сорти Служниця, Безоста, Подолянка, Фаворитка, Херсонська безоста. Довжина колосу цих рослин становила 7–10 см, а зовнішня квіткова луска закінчувалась остюковим відростком, довжина якого не перевищувала 0,5 см.

Різновид еритроспермум об’єднував сорти Ліона, Селянка, Зміна, Ніконія, Кірія, Турчунчук, Шестопаловка; Отаман, Подяка, Пошана, Куяльник, Тітона, Кохана та Херсонська-99. Перші сім сортів з довжиною остюків (2,5–3,0 см), приблизно вдвічі меншою за

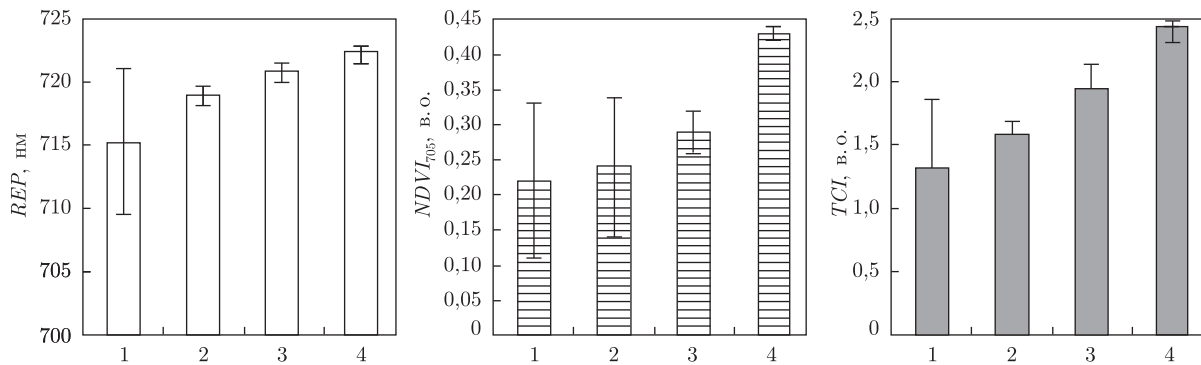


Рис. 2. Значення вегетаційних індексів червоного краю сортів озимої пшениці за даними спектрорадіометра ASD FieldSpec[®]3 FR від 16.06.2010 р.:

1 — озима пшениця м'яка, різновид лютеценс, колос безостий, 5 сортів; 2 — озима пшениця м'яка, різновид еритроспермум, колос короткоостистий, 7 сортів; 3 — озима пшениця м'яка, різновид еритроспермум, колос середньоостистий, 7 сортів; 4 — озима пшениця тверда, різновид гордеїформе, колос остистий, 4 сорти. Планки розбіжностей по вертикальній осі позначають межі довірчого інтервалу з рівнем значущості $\alpha = 0,05$

довжину колоса (6–8 см), нами були віднесені до групи короткоостистих. Інші сім сортів з довжиною остюків (5–7 см), майже співмірною довжині колоса (6–8 см), склали групу середньоостистих.

До різновиду гордеїформе належали сорти остистої пшениці Аргонавт, Лагуна, Дельфін та Алий парус, довгі остюки якої (10 см) більш ніж удвічі перевищували довжину колоса (4 см).

Усі проаналізовані сорти озимої пшениці є середньоранніми з тривалістю вегетаційного періоду в межах 270–280 діб, за винятком сорту Фаворитка (різновид лютеценс), який належить до групи середньостиглих, та сорту Шестопаковка (різновид еритроспермум), що входить до групи ранньостиглих сортів.

У дослідженні використано три індекси червоного краю: позицію червоного краю REP [4], мерсівський наземний хлорофільний індекс $MTCI$ [5], який позначено як TCI , та модифікований нормалізований різницевий індекс червоного краю $NDVI_{705}$ [6]. Обчислення вегетаційних індексів REP , TCI й $NDVI_{705}$ для кожного сорту за даними спектрорадіометра ASD FieldSpec[®]3 FR здійснювалось за такими формулами:

$$REP = 701 + 41 \frac{(\bar{R} - R(701))}{(R(742) - R(701))}, \quad \bar{R} = \frac{R(671) + R(783)}{2}, \quad (1)$$

$$TCI = \frac{R(754) - R(708)}{R(708) - R(681)}, \quad (2)$$

$$NDVI_{705} = \frac{R(750) - R(705)}{R(750) + R(705)}, \quad (3)$$

де $R(\lambda)$ — значення спектрометричного коефіцієнта відбиття на довжині хвилі λ .

Отримані дані було статистично оброблено з розрахунком середніх значень та їх довірчих інтервалів на рівні значущості $\alpha = 0,05$ відповідно для виділених груп озимої пшениці з врахуванням кількості сортів кожного різновиду (рис. 2). З рисунку видно, що найнижчі значення всіх розрахованих індексів червоного краю характерні для озимої пшениці різновиду лютеценс. Причому значення REP для безостих пшениць майже на 7 нм, а значення TCI

та $NDVI_{705}$ достовірно з імовірністю 95% майже вдвічі нижчі, ніж в остистих пшениць. Це, вірогідно, зумовлене тим, що відбивні поверхні посівів пшениць з безостим колосом в умовах степової зони України до середини червня 2010 р. помітно втратили фотосинтетичні пігменти (про це свідчить найменший хлорофільний індекс TCl) і мали жовтіший аспект порівняно з остистими різновидами пшениці. Серед групи пшениць з різними за довжиною остюками для різновиду еритроспермум були властиві, як правило, колос зеленого кольору, а остюки — жовтуватого, в той час як у *Tr. durum* різновиду гордеїформе зеленими були і колос, і остюки, і більша частина листків. Згідно з детальнішою фенологічною шкалою Задокса [7], тверда озима пшениця перебувала на етапі пізньої молочної стиглості (77–79 стадії), а м'яка — на етапі ранньої воскової стиглості (81–83 стадії).

Слід зазначити, що для досліджених ділянок пшениці різновиду лютеценс властиве більше варіювання отриманих вегетаційних індексів, про що свідчать значно ширші границі довірчих інтервалів кожного з них (див. гістограму 1 для REP , $NDVI_{705}$ й TCl на рис. 2). Можна припустити, що це спричинене наявністю в групі лютеценс нових високоінтенсивних сортів Фаворитка і Подолянка, які мають вищу фотосинтетичну активність в репродуктивний період розвитку на противагу іншим сортам пшениці з безостим колосом. Звісно, вивчення виявленої особливості потребує більшої кількості дистанційних спектрометричних вимірювань і подальших досліджень на ширшому обсязі рослинного матеріалу.

Порівнюючи величини довірчих інтервалів досліджених індексів, відзначимо більшу мінливість, властиву TCl й $NDVI_{705}$. Зокрема, за допомогою останнього достовірно розрізняються тільки види *Tr. aestivum* та *Tr. durum*. У той самий час REP й TCl реагують на морфологію верхнього ярусу посіву, проявляючи чітку тенденцію до зростання зі збільшенням довжини остюків колоса навіть у межах різновиду еритроспермум (див. гістограми 2 і 3 для REP й TCl на рис. 2).

Спектри відбиття посівів досліджених різновидів озимої пшениці також демонструють відмінності в конфігурації кривих відбиття на довжинах хвиль 350–750 нм (наприклад, неоднакова амплітуда характерного для досягаючих посівів максимуму на 630–640 нм) та різну позицію точки початку підняття спектра близько 680 нм, де мінімальне значення функції відбиття для сорту Служниця становить 0,20 в.о., для сорту Шестопаловка — 0,14 в.о., для сорту Херсонська-99 — 0,11 в.о., а для сорту Аргонавт — 0,06 в.о. (рис. 3).

Отримані дані не суперечать виявленим Т. А. Казанцевим зі співробітниками [8] сортовим відмінностям форми динамічних кривих деривативного вегетаційного індексу D_{725}/D_{702} озимої пшениці сортів Смуглянка і Переяславка, вирощених на різних рівнях мінерального живлення в умовах мікропольового дослідження лісостепової зони України. Про сортові відмінності рослин під час дистанційного зондування посівів зернових йдеться і у монографії Т. М. Шадчиної [9]. Зазначене вище засвідчує неоднорідність спектрального відгуку посівів озимої пшениці молочно-воскової стиглості в зоні червоного краю, що слід брати до уваги при подальшому аналізі відповідних індексів, розрахованих за супутниковими даними.

Таким чином, на підставі спектрометрування посівів озимої пшениці молочно-воскової стиглості виявлено відмінності в значеннях REP , TCl , $NDVI_{705}$ як для різних її видів, так і для поширеніших в Україні різновидів цієї культури: найнижчими вегетаційні індекси були в озимої пшениці м'якої з безостим колосом різновиду лютеценс, а найвищими — в озимої пшениці твердої різновиду гордеїформе. Придатнішими для виявлення особливостей морфології відбивної поверхні посівів різновиду еритроспермум виявились індекси REP й TCl ,

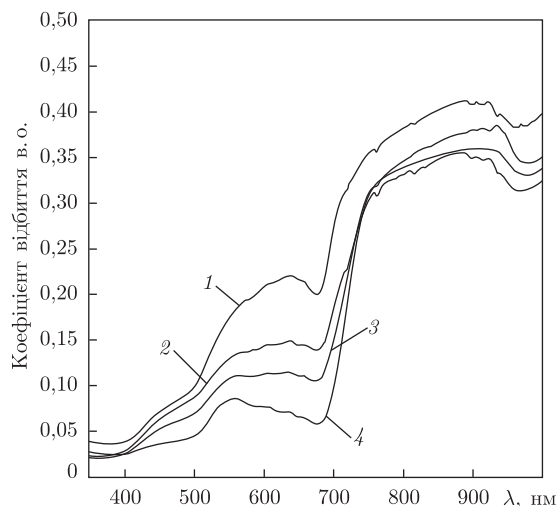


Рис. 3. Спектри відбиття дрібноділянкових посівів озимої пшениці у Миколаївській області, що отримані спектрорадіометром ASD FieldSpec[®]3 FR 16.06.2010 р.

Номер спектрів відбиття: 231 — озима пшениця м'яка, колос безостий, різновид лютеценс, сорт Служниця (1); 285 — озима пшениця м'яка, колос короткоостистий, різновид еритроспермум, сорт Шестопаловка (2); 290 — озима пшениця м'яка, колос середньоостистий, різновид еритроспермум, сорт Херсонська-99 (3); 244 — озима пшениця тверда, різновид гордеїформе, колос остистий, сорт Аргонавт (4)

проте в даному повідомленні викладено початкові напрацювання в цьому напрямі, що зумовлює актуальність подальших більш масштабних досліджень гетерогенності рослинного покриву посівів озимої пшениці під час досягання.

1. Ustin S. L., Gitelson A. A., Jacquemoud S. E. et al. Retrieval of foliar information about plant pigment systems from high resolution spectroscopy // Remote Sensing of Environment. – 2009. – **113**, Supplement 1. – P. S67-S77.
2. Biewer S., Erasmi S., Fricke T., Wachendorf M. Prediction of yield and the contribution of legumes in legume-grass mixtures using field spectrometry // Precision Agriculture. – 2009. – **10**, No 2. – P. 128-144.
3. Kiang N. Y., Siefert J., Govindjee S., Blankenship R. E. Spectral signatures of photosynthesis. I. Review of Earth organisms // Astrobiology. – 2007. – No 7. – P. 222-251.
4. Horler D. N. H., Dockray M., Barber J. The red edge of plant leaf reflectance // Int. J. Remote Sensing. – 1983. – **4**. – P. 273-288.
5. Dash J., Curran P. J. The MERIS terrestrial chlorophyll index // Ibid. – 2004. – **25**. – P. 5403-5413.
6. Gitelson A. A., Merzlyak M. N. Spectral reflectance changes associated with autumn senescence of Aesculus hippocastanum L. and Acer platanoides L. leaves. Spectral features and relation to chlorophyll estimation // J. Plant Physiology. – 1994. – **143**. – P. 286-292.
7. Zadoks J. C., Chang T. T., Konzak C. F. A Decimal Code for the Growth Stages of Cereals // Weed Research. – 1974. – **14**, No 6. – P. 415-421.
8. Казанцев Т. А., Туменов Л. В., Кочубей С. М. Дистанционные измерения динамики содержания хлорофилла в посевах озимой пшеницы // Физиол. и биохим. культ. растений. – 2010. – **42**, № 6. – С. 544-549.
9. Шадчина Т. М. Наукові основи дистанційного моніторингу стану посівів зернових. – Київ: Фітосоціоцентр, 2001. – 220 с.

ДУ "Науковий Центр аерокосмічних досліджень Землі
Інституту геологічних наук НАН України", Київ

Надійшло до редакції 04.04.2012

Г. М. Жолобак, З. М. Шпортюк, О. Н. Сибирцева, С. С. Дугин

Исследования спектров отражения посевов озимой пшеницы молочно-восковой спелости в зоне красного края как потенциальных индикаторов дистанционной дифференциации гетерогенности растительного покрова

*Изложены результаты спектрометрирования прибором ASD FieldSpec[®]3 FR мелкоделяночных посевов демонстрационного полигона элитного семенного хозяйства “Золотой колос” в Николаевской области, на основании которых вычислены вегетационные индексы ближнего инфракрасного края (REP, TCI, NDVI₇₀₅) для двух разновидностей (лютесценс и еритроспермум) озимой пшеницы мягкой (*Triticum aestivum* L.) и разновидности гордеиформе озимой пшеницы твердой (*Triticum durum* Desf.). Самые низкие значения индексов зафиксированы для безостой озимой пшеницы мягкой разновидности лютесценс, а самые высокие — для озимой пшеницы твердой разновидности гордеиформе.*

G. M. Zholobak, Z. M. Shportiuk, O. N. Sibirtseva, S. S. Dugin

The study of reflectance spectra for winter wheat at the early dough stage in the red edge range as potential indicators for the remote differentiation of vegetation cover heterogeneity

*The results of spectrometry surveying by an ASD FieldSpec[®]3 FR device for small plot sowing at a demonstration test site for elite seminal enterprise “Zoloty Kolos” in the Mykolaiv Oblast are presented. Acquired field data have allowed to calculate the vegetation red edge indices (REP, TCI, NDVI₇₀₅) for soft red winter wheat (*Triticum aestivum* L., varieties lutescens and erythrosperrum) and for winter durum wheat (*Triticum durum* Desf., var. hordeiforme). The lowest values of indices are detected for awnless soft red winter wheat var. lutescens and the highest ones for winter durum wheat var. hordeiforme.*

Ю. В. Костюченко, Д. М. Соловійов, М. В. Ющенко, С. С. Дугін,
І. М. Копачевський, І. Г. Артеменко

Використання наземних гіперспектрометричних вимірювань для калібрування даних ДЗЗ в задачах оцінки стану навколишнього середовища

(Представлено академіком НАН України В. І. Ляльком)

Запропоновано засади інтеркалібрування даних супутникових та польових досліджень спектральних властивостей земних покривів у задачах оцінки стану навколишнього середовища, зокрема рослинності, ґрунтів і водного балансу територій. На основі аналізу даних вимірювань польового спектрорадіометра FieldSpec[®] з FR визначено статистичні закономірності просторово-часового розподілу характеристик спектрального відбиття за спектральними індексами. Запропоновано форму оптимального алгоритму розрахунку спектральних індексів на основі кореляційного аналізу, а також загальний вигляд калібрувальних закономірностей для подальшої завірки даних супутникових спостережень.

Спектри відбиття земних утворень, які реєструються за допомогою приладів супутникового базування, формуються шляхом інтеграції енергетичного внеску з великих ділянок поверхні. Це значно відрізняє їх від спектрів, отриманих при наземних вимірюваннях [1], та має бути враховано при порівняльному аналізі. При аналізі суперпозицій спектральних смуг (спектральних індексів), особливо у випадку, коли ширина смуг є суттєвою, просторово-часова варіабельність енергетичного потоку з поверхні має бути врахована при зіставленні даних наземних та дистанційних вимірів. Класичні вирази для нормалізованого вегетаційного індексу *NDVI* (Normalized Difference Vegetation Index) та нормалізованого водного індексу *NDWI* (Normalized Difference Water Index), які обґрунтовані за лабораторними експериментами, запропоновано в наукових публікаціях [2, 3] у вигляді:

$$NDVI = \frac{r_{NIR} - r_{RED}}{r_{NIR} + r_{RED}} = \left(\frac{r_{800} - r_{680}}{r_{800} + r_{680}} \right), \quad (1)$$

$$NDWI = \left(\frac{r_{857} - r_{1241}}{r_{857} + r_{1241}} \right), \quad (2)$$

де r_λ — показник відбиття у відповідній смузі спостереження λ , нм; *NIR* — ближній інфрачервоний діапазон; *RED* — червона частина спектра відбиття.

Враховуючи те, що більшість спектрометричних приладів супутникового базування здійснює зйомку в наперед визначених спектральних смугах, було запропоновано рівняння для розрахунку наведених індексів для порівняння з даними конкретних супутникових сенсорів через інтенсивність отриманого сенсором сигналу I [4]:

$$NDVI^{MSS} = \left[\int_{700}^{800} Id\lambda - \int_{600}^{700} Id\lambda \right] / \left[\int_{700}^{800} Id\lambda + \int_{600}^{700} Id\lambda \right] / g. \quad (3)$$

Для даних, отриманих сенсором *MSS* супутників серії Landsat Геологічної служби США, маємо:

$$NDVI^{ETM} = \left[\int_{760}^{900} Id\lambda - \int_{630}^{690} Id\lambda \right] / \left[\int_{760}^{900} Id\lambda + \int_{630}^{690} Id\lambda \right] / g, \quad (4)$$

а для даних, отриманих сенсорами *TM* і *ETM* супутників серії Landsat, —

$$NDWI^{ETM} = \left(\left[\int_{760}^{900} Id\lambda - \int_{1550}^{1750} Id\lambda \right] / \left[\int_{760}^{900} Id\lambda + \int_{1550}^{1750} Id\lambda \right] \right) / g. \quad (5)$$

Застосування редукованих на спектральні інтервали рівнянь дозволяє отримати розподіли спектральних індексів, що відображають як специфіку використаних засобів зйомки, так і просторові варіації енергетичного балансу земної поверхні і, таким чином, провести більш коректне порівняння результатів супутникових і наземних спектрометричних вимірів.

Регуляризацію слід провести різними шляхами. В рамках розв'язувальної задачі можна запропонувати відносно простий шлях, що базується на визначенні розподілів досліджуваних характеристик по всій території $f_{x,y}$ відносно розподілів на вимірних ділянках f_m [5]:

$$f_{x,y} = \sum_{m=1}^n w_{x,y}(\tilde{f}_m) f_m, \quad (6)$$

де $w_{x,y}(\tilde{f}_m)$ — ваговий коефіцієнт, який визначається через пошук мінімуму [9]:

$$\min \left\{ \sum_{m=1}^n \sum_{f_m \in F} w_{x,y}(\tilde{f}_m) \left(1 - \frac{f_m}{\tilde{f}_m} \right)^2 \right\}. \quad (7)$$

У цьому рівнянні m — кількість точок, на яких проводилися вимірювання; n — кількість серій спостережень; f_m — розподіл результатів вимірювань (дані експериментів); F — множина (загальна сукупність) даних вимірювань; \tilde{f}_m — середній розподіл значень вимірюваних характеристик.

Застосування процедури регуляризації дозволяє отримати розподіли вимірюваних характеристик, що з контрольованою точністю відповідають просторово-часовим параметрам супутникової зйомки. Зіставлення двох регулярних мереж спостереження — наземної та супутникової зйомки — може бути проведено, використовуючи підхід, запропонований в статті [6], відповідно до рівняння:

$$\bar{R} = \int R(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (8)$$

де \vec{r} — двовимірний вектор координат ділянки; R — вимірний розподіл спектрального відбиття (\bar{R} — з гіршим просторовим розрізненням). Таким чином, можна коректно зіставити дані наземних та дистанційних вимірювань.

Для калібрування отриманих спектральних індексів було проведено наземні спектрометричні польові вимірювання, згідно з методикою [1]. За допомогою польового спектродіаметра FieldSpec[®]3 FR на окремих ділянках середньої частини басейну р. Прип'ять

у періоди, що відповідають періодам супутникових спостережень, було виконано 117 вимірів спектральної відбивної здатності земних покривів в діапазоні від 350 до 2500 нм з інтервалом відліку 1,4 нм у діапазоні довжини хвиль від 350 до 1000 нм і 2,0 нм у діапазоні довжини хвиль від 1000 до 2500 нм при спектральній розрізненості: 3,0 нм при 700 нм; 10 нм при 1400 та 2100 нм [1].

Для проведення проблемно-орієнтованої класифікації та подальшого аналізу спектральних характеристик земних покривів було використано матеріали космічних зйомок супутників Landsat-2 (Геологічна служба США), сенсор *MSS*, зйомки від 11.06.1975 р.; 19.03, 12.05, 24.06.1976 р.; Landsat-5, сенсор *TM*, зйомки від 04.05, 07.07.1986 р.; 22.07.2003 р.; 28.04, 14.05, 15.06.2007 р.; Landsat-7, сенсор *ETM*, зйомки від 19.07.1999 р.; 28.02, 02.05.2000 р.; 24.03, 27.05.2003 р.; 22.05, 09.07, 17.07.2007 р.; 09.04, 25.04, 27.05, 28.06, 14.07.2009 р., а також матеріали наземних польових досліджень ЦАКДЗ 2007–2010 рр. по досліджуваній території.

Пряме зіставлення даних вимірювань спектральних характеристик земних покривів та розрахованих на їх основі спектральних індексів земних утворень не дозволяє отримати сталі статистично достовірні кореляційні залежності між розподілами даних супутникового і наземного походження по всьому інтервалу спостережень.

Регуляризація по енергетичному потоку (спектральна регуляризація) дозволяє отримати розподіли даних, які демонструють на окремих інтервалах сталі кореляції певних параметрів. При цьому найкраща кореляція спостерігається між даними супутникових спостережень і наземних вимірювань, обрахованих за рівняннями (4), (5), трохи гірша — при використанні рівняння (3). Застосовуючи алгоритми подальшої просторово-часової регуляризації і корекції, отримуємо кращі кореляції через врахування просторових варіацій розподілів вимірюваних характеристик та різниці просторових характеристик супутникових і наземних вимірів. Отже, оцінимо рівняння лінійної апроксимації, які пов'язують значення спектральних індексів, отриманих за даними супутникових і наземних вимірювань із застосуванням різних алгоритмів:

рівняння лінійної апроксимації між середнім значенням $NDVI_{sat}$, розрахованим за даними супутникових спостережень, та значенням $NDVI_{ground}^{MSS}$, розрахованим за результатами польових спектрометричних досліджень, можна представити, використовуючи алгоритм (9):

$$NDVI_{sat} = 0,19 + 0,55 \cdot NDVI_{ground}^{MSS}, \quad (9)$$

а з використанням алгоритму (4) отримуємо рівняння

$$NDVI_{sat} = 0,17 + 0,45 \cdot NDVI_{ground}^{ETM}. \quad (10)$$

Ці залежності ілюструють рис. 1 й 2 відповідно.

Отримані калібрувальні залежності демонструють достатньо високу кореляцію показників. Отже, виходячи з наведених даних, оптимальним алгоритмом для розрахунку індексу $NDVI$ за даними польових спектрометричних вимірювань за допомогою приладу FieldSpec[®]3 FR слід використовувати рівняння (5).

Аналогічним чином можна провести аналіз розподілів спектральних індексів $NDWI$. Як і у випадку з вегетаційними індексами, регуляризація по енергетичному потоку (спектральна регуляризація) дає змогу отримати розподіли даних, які на окремих інтервалах зумовлюють сталі кореляції певних параметрів. Слід зазначити, що водні індекси $NDWI$ демонструють кращі кореляції, ніж вегетаційні індекси, але просторовий розподіл вимірювань їх значно

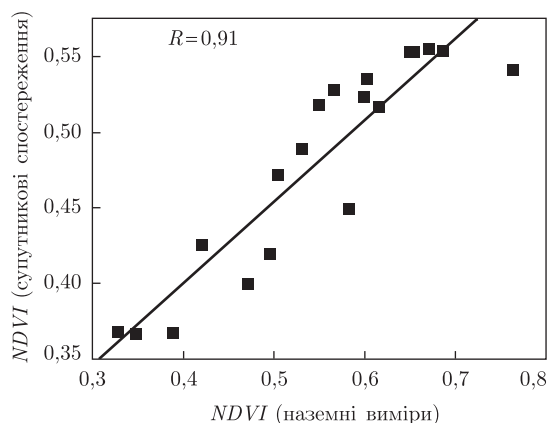


Рис. 1. Зіставлення розподілів індексу $NDVI$, отриманого за даними супутникових і наземних вимірювань, який оброблено за алгоритмом (9) (коефіцієнт кореляції 0,91; середньоквадратичне відхилення 0,029)

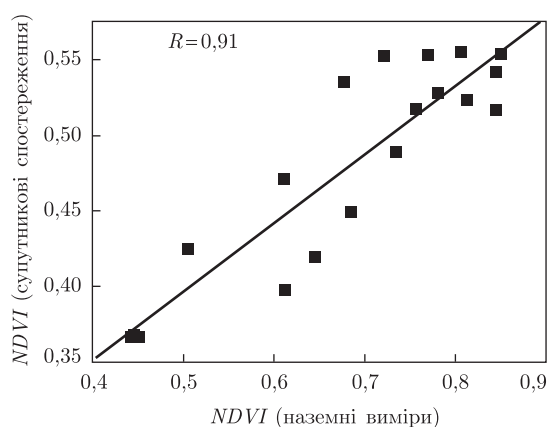


Рис. 2. Зіставлення розподілів індексу $NDVI$, отриманого за даними супутникових і наземних вимірювань, який оброблено за рівнянням (10) (коефіцієнт кореляції 0,90; середньоквадратичне відхилення 0,031)

гірший, що пов'язане з недоопрацьованістю методики наземних вимірювань. Ці дані показують добрі кореляції, завдяки ним можна розрахувати рівняння лінійної апроксимації, які пов'язують значення спектральних індексів, отриманих за результатами супутникових та наземних вимірювань із застосуванням різних алгоритмів. Отриману залежність ілюструє рис. 3.

Рівняння лінійної апроксимації між середнім значенням $NDWI_{sat}$, розрахованим за даними супутникових спостережень, та значенням $NDWI_{ground}^{ETM}$, розрахованим за результатами польових спектрометричних досліджень (для випадку, наведеного на рис. 3), можна представити як

$$NDWI_{sat} = 0,58 + 0,61 \cdot NDWI_{ground}^{ETM}. \quad (11)$$

Враховуючи те, що дані супутника було відкалібровано з коефіцієнтом +0,5 відносно початкового розподілу (з метою більш детального вивчення ділянок з малим значенням індексу $NDWI$), формулу (11) наведемо як

$$NDWI_{sat} = 0,29 + 0,61 \cdot NDWI_{ground}^{ETM}. \quad (12)$$

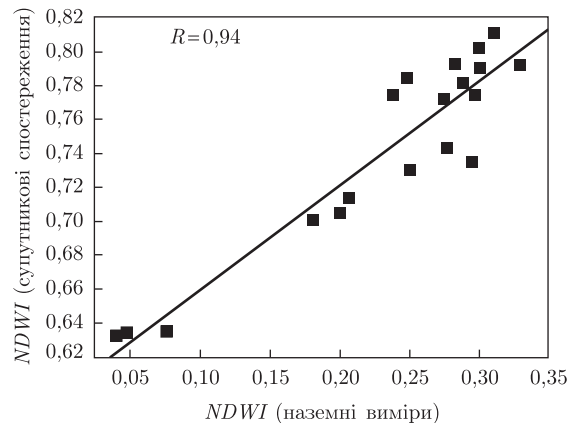


Рис. 3. Зіставлення розподілів індексу $NDWI$, отриманого за даними супутникових і наземних вимірювань, який оброблено за рівнянням (5) (коефіцієнт кореляції 0,94; середньоквадратичне відхилення 0,021)

Таким чином, оптимальним алгоритмом для розрахунку індексу $NDWI$ за даними польових спектрометричних вимірювань за допомогою приладу FieldSpec[®]3 FR слід використовувати рівняння (5), а як калібрувальну залежність для верифікації даних супутникових зйомок при цьому можна запропонувати формулу (12).

Слід відзначити, що під час проведення польових спектрометричних вимірів за лімбічною схемою (тобто під певним кутом) деякі ділянки області огляду спектрометра виявляються екранованими рослинністю. Враховуючи загальну неоднорідність умов досліджуваного району в межах розмірів ділянок зйомок, можна передбачити, що ефект впливу схеми спостереження дасть змогу зменшити невизначеність оцінювання спектральних індексів у середньому на 12–15%. Аналіз отриманих розподілів показує, що визначені лінійні калібрувальні залежності для вегетаційного індексу $NDVI$ слід вважати достатньо коректними лише в інтервалі значень індексу від 0,4 до 0,55. При $NDVI > 0,55$ калібрувальна залежність не буде лінійною, як це демонструють представлені дані. Визначення точного вигляду калібрувальних залежностей для всього інтервалу можливих значень індексів є предметом подальших досліджень.

1. ASD FieldSpec[®]3 FR User Manual. – Boulder: ASD Document, 2007. – 96 p.
2. Jackson R. D., Slater P. N., Pinter P. J. Discrimination of Growth and Water Stress in Wheat by Various Vegetation Indices Through Clear and Turbid Atmospheres // Remote Sensing of the Environment. – 1983. – 15. – P. 187–208.
3. Gao B. C. Normalized Difference Water Index for Remote Sensing of Vegetation Liquid Water from Space // Proceedings of SPIE. – 1995. – 2480. – P. 225–236.
4. Kostyuchenko Y. V., Kopachevskiy I., Solovyov D. et al. Coupling of satellite observation to increase reliability of analysis of socio-ecological consequences of technological disasters // Reliability and Safety. – 2012. – 6. – P. 225–241.
5. Fowler H. J., Kilsby C. G., O'Connell P. E. Modeling the impacts of climatic change and variability on the reliability, resilience and vulnerability of a water resource system // Water Resour Res. – 2003. – 39. – P. 12–22.
6. Acarreta J. R., Stammes P. Calibration comparison between SCIAMACHY and MERIS onboard ENVISAT // IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters. – 2005. – 1. – P. 31–35.

ДУ “Науковий Центр аерокосмічних досліджень Землі
Інституту геологічних наук НАН України”, Київ
Морський гідрофізичний інститут
НАН України, Севастополь

Надійшло до редакції 02.04.2012

Ю. В. Костюченко, Д. М. Соловьёв, М. В. Ющенко, С. С. Дугин,
И. М. Копачевский, И. Г. Артеменко

**Использование наземных гиперспектрометричных измерений
для калибровки данных ДЗЗ в задачах оценки состояния
окружающей среды**

Предложены основы интеркалибровки данных спутниковых и полевых исследований спектральных свойств земных покровов в задачах оценки состояния окружающей среды, в частности растительности, грунтов и водного баланса территорий. На основе анализа данных измерений полевого спектрорадиометра FieldSpec® 3 FR определены статистические закономерности пространственно-временного распределения характеристик спектрального отражения по спектральным индексам. Предложена форма оптимального алгоритма расчета спектральных индексов на основе корреляционного анализа, а также общий вид калибровочных закономерностей для дальнейшей проверки данных спутниковых наблюдений.

Yu. V. Kostyuchenko, D. M. Solovyov, M. V. Yuschenko, S. S. Dugin,
I. M. Kopachevskyi, I. G. Artemenko

**Utilization of in-field hyperspectral measurements for the calibration of
satellite observation data for the environmental condition analysis**

A basic approach for the intercalibration of satellite observational data and in-field hyperspectre measurements of land covers is proposed. It can be applied to the tasks of environmental analysis, in particular, to the assessment of a condition of vegetation, soil, and water balance of territories. Using the in-field measurement data of a spectroradiometer FieldSpec® 3 FR, the statistical trends of the spatial-temporal distribution of spectral reflectance indices are determined. The optimal form of an algorithm for the calculation of spectral indices has been proposed basing on correlation analysis, and the calibration equations for satellite data verification are obtained.

В. Н. Тарасов, И. М. Логвинов, И. В. Гордиенко

Результаты магнитотеллурических исследований юга Воронежской антеклизы

(Представлено академиком НАН Украины В. И. Старостенко)

На основе одномерной инверсии кривых МТЗ в земной коре и верхней мантии выделены объекты пониженного сопротивления. Приблизительно от 37° меридиана восточной долготы в азимутальных направлениях и величинах типперов четко прослеживается их разворот и изменение амплитуд, которые обусловлены аномальными особенностями региона. Проведено сопоставление полученных результатов с распределением глубинного теплового потока Земли.

В сезоны 2009–2011 гг. были выполнены исследования вариаций магнитотеллурического (МТ) поля Земли в 14-ти пунктах наблюдений в северо-восточной части Украины на территории южного склона Воронежского массива (рис. 1). Одной из причин выбора региона послужили результаты геотермических исследований, вследствие чего были обнаружены районы с повышенными значениями теплового потока (ТП).

Регистрация вариаций МТ поля осуществлялась современными цифровыми станциями с шагом 1–5 с. Интервал регистрации на каждом пункте составлял не менее 5 сут. Район исследований изобилует электрифицированными железными дорогами, что привело к большому фону помех на многих пунктах.

В данном сообщении представлены передаточные функции МТ поля, полученные в результате обработки, и их предварительная интерпретация.

Результаты обработки. Обработка вариаций МТ поля к настоящему времени на всех пунктах выполнена по одноточечной схеме с использованием современных программ [2–4]. На этапе предпроцессинга на всех пунктах были применены разработанные авторами специальные программы, позволяющие устранять помехи без искажения вариаций.

Обработка данных МТ наблюдений позволила установить магнитотеллурические и магнитовариационные (типперы) параметры в диапазоне периодов от 25 до 10800 с. Несмотря на применение программ, подавляющих помехи, МТ параметры на пунктах наблюдений, расположенных вблизи электрифицированных железных дорог, получены с большими погрешностями. Амплитуды реальных (C_u) и мнимых (C_v) частей типперов определены с точностью до 0,01–0,03, а их азимуты — до 5°.

Направление реальных частей типперов в диапазоне периодов, меньших 400 с, вдоль профиля изменяется почти на 180°. В пунктах, где азимут C_u составляет около 270°, его величина в диапазоне периодов от 70 до 400 с почти в два раза больше, чем на остальных пунктах профиля (рис. 2). Указанные признаки свидетельствуют о наличии аномалии проводимости квазимеридионального простирания.

Приблизительно в 100 км практически параллельно профилю прослеживается Днепровско-Донецкий грабен (ДДГ), суммарная продольная проводимость осадочных пород (S_{oc}) в осевой части которого достигает 1000 См [5]. Реальные части типперов в этом случае должны быть направлены перпендикулярно простиранию линиям S_{oc} , т. е. под углом 20–30° (ноль направлен на север).

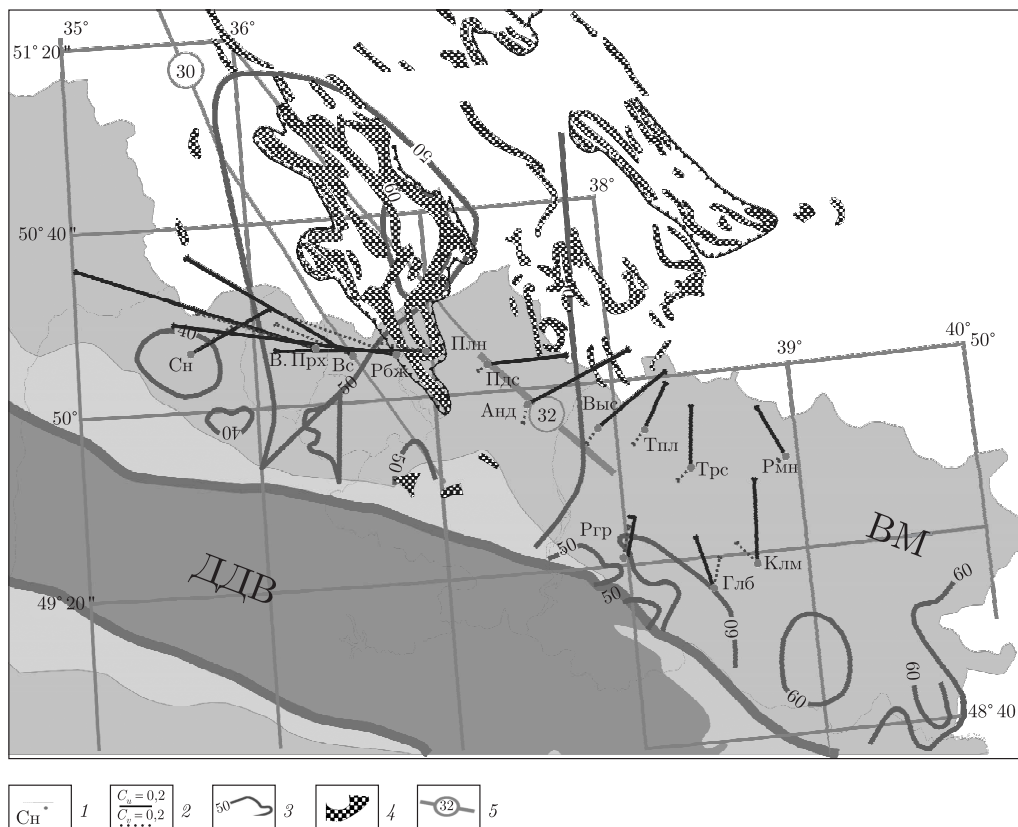


Рис. 1. Расположение пунктов наблюдений (1): Сн — Сенное, В. Прх — Великие Проходы, Вс — Веселое, Рбж — Рубежное, Плн — Польное, Пдс — Подсерединое, Анд — Андреевка, Выс — Выселки, Тпл — Тополи, Трс — Тарасовка, Рмн — Романовка, Ргр — Райгородок, Глб — Голубовка, Клм — Калмыковка. Части типперов (2): реальные (C_u) и мнимые (C_v); изолинии теплового потока, мВт/м^2 (3); железистые кварциты, по [1], (4). Региональные разломы (5): Волчанско-Шабаликинский и Новооскольско-Воронцовский (цифры в кружках соответственно 30 и 32). ДДВ — Днепровско-Донецкая впадина, VM — Воронежский массив

При наличии проводящих неоднородностей квазимеридионального простирания азимуты C_u частей типперов будут отклоняться от направления, перпендикулярного простиранию максимальных значений S_{oc} в ДДГ. В результате суперпозиции аномальных полей азимут C_u должен отклоняться от направления $20\text{--}30^\circ$. Указанные признаки четко отмечаются (как видно из рис. 2) на всех пунктах с азимутом C_u около 270° . Частотный диапазон максимума C_u говорит об относительно неглубоком залегании аномалеобразующего объекта (в верхних частях земной коры).

Одномерная инверсия. В то время как магнитовариационные данные позволили получить сведения о пространственном распределении аномальной проводимости земных недр, данные магнитотеллурических зондирований (МТЗ) могут помочь исследовать распределение проводимости с глубиной. Так как кривые МТЗ приемлемого качества в достаточно широком диапазоне периодов получены только для части пунктов (рис. 3), то применение 2-D или 3-D моделирования для таких данных довольно спекулятивно. Поэтому на первом этапе ограничимся одномерной интерпретацией данных МТЗ и обсудим полученные 1-D модели в пунктах наблюдений с точки зрения оценки приблизительных диапазонов глубины распределения проводимости в регионе.

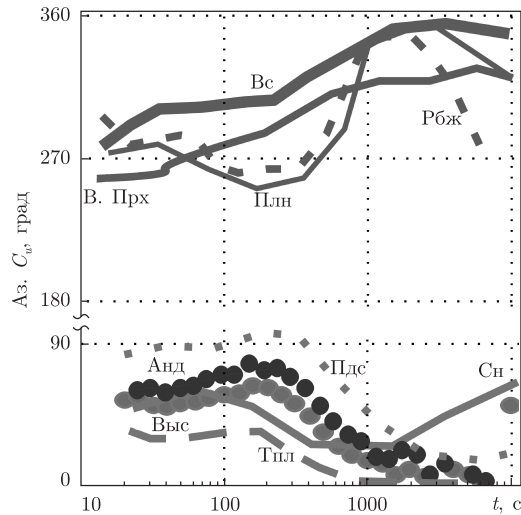


Рис. 2. Распределение азимутов C_u вдоль профиля (с запада на восток) Сенное–Романовка

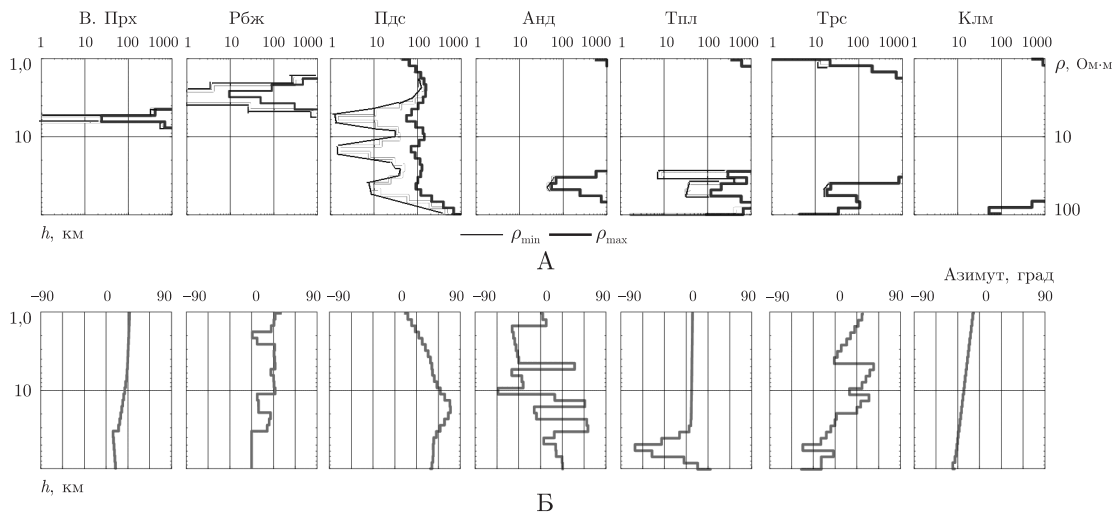


Рис. 3. Результат одномерной инверсии данных МТЗ: А — геоэлектрический разрез; Б — направление минимального сопротивления

Результат изменения геоэлектрического разреза и азимутальных кривых демонстрирует рис. 3. Пункты показаны в порядке следования с запада на восток. Частотный диапазон зондирования позволяет уверенно представить модели в диапазоне глубин 10–100 км. Метод МТЗ обладает плохой разрешающей способностью к высокоомным объектам. Поэтому значения удельного электрического сопротивления (ρ , Ом · м) выше 1000 можно рассматривать как единые (в моделях они не показаны).

В пункте В. Прх проводник отмечается на глубине приблизительно 6 км. Азимутальное направление минимального сопротивления находится в диапазоне 10–30°. Пункт Вc сложен высокоомными породами ($\rho > 1000$). Азимут изменяется в пределах –60°–10°. В пункте Рбж слой с пониженными ρ лежит на глубине 20–35 км, азимут соответствует 0–30°.

Совершенно новые свойства обнаруживаются в пункте Пдс и продолжают далее на восток. Появляется несколько слоев с высокой проводимостью на глубинах 6, 15 и 40–50 км.

Здесь также отмечается резкий разворот направлений типперов и сокращаются амплитуды (см. рис. 1). Азимут характеризуется значениями 15–80°. В пунктах Анд, Тпл, Трс и Клм на глубинах от 28 до 60–80 км отмечаются проводящие объекты, однако значения ρ здесь несколько выше, чем в пункте Пдс. Значения азимутов сильнее варьируют в Анд и Трс (от –60° до 60°) и несколько спокойнее в Тпл и Клм (–80–10°).

Таким образом, использованная нами инверсия для анизотропной слоистой среды [6] характеризуется рядом преимуществ: а) позволяет избегать пересчета экспериментальных кривых МТЗ в выбранные направления, что сильно зависит от качества определения элементов матрицы импеданса; б) позволяет находить геоэлектрический разрез локальных структур даже в случае изменения простирания этих структур на разных периодах; в) указывает диапазоны глубин, где возможна интерпретация наблюдаемых данных изотропной моделью.

1. *Карта* структурного районирования докембрия юго-западной части Восточно-Европейской платформы: 1 : 1 000 000 / Ред. Л. С. Галецкий. – Москва: ВСЕГЕИ, 1992.
2. *Egbert G. D., Booker J. R.* Robust estimation of geomagnetic transfer function // *Geophys. J. Royal Astron. Soc.* – 1986. – **87**. – P. 173–194.
3. *Ладановский Б. Т.* Алгоритм обработки данных МТЗ // Тез. докл. “Пятое геофизические чтения имени В. В. Федынского”, Москва, 27 февр. – 01 март., 2003. – Москва: Центр ГЕОН, 2003. – С. 134–135.
4. *Varentsov I. M.* Joint robust inversion of MT and MV data // *Electromagnetic sounding of the Earth's interior (Methods in geochemistry and geophysics, 40)*. – Amsterdam: Elsevier, 2007. – P. 189–222.
5. *Логвинов И. М.* Карта суммарной продольной проводимости осадочного чехла Днепровско-Донецкой впадины по результатам двумерного моделирования электромагнитных данных // *Физика Земли*. – 2002. – **11**. – С. 94–96.
6. *Pek J., Santos F. A. M.* Magnetotelluric inversion for anisotropic conductivities in layered media // *Phys. Earth Planet. Int.* – 2006. – **158**. – P. 139–158.

*Институт геофизики им. С. И. Субботина
НАН Украины, Киев*

Поступило в редакцию 22.02.2012

В. М. Тарасов, І. М. Логвінов, І. В. Гордієнко

Результати магніотелуричних досліджень півдня Воронізької антеклізи

На основі одновимірної інверсії кривих МТЗ у земній корі та верхній мантії виділено об'єкти зниженого опору. Приблизно від 37° меридіана східної довготи в азимутальних напрямках та величинах тїперів чітко простежується їх розворот і зміна амплітуд, що зумовлено аномальними особливостями надр регіону. Проведено зіставлення отриманих результатів із розподілом глибинного теплового потоку Землі.

V. N. Tarasov, I. M. Logvinov, I. V. Gordienko

The results of magnetotelluric investigations on the South of the Voronezh antecline

On the basis of the one-dimensional inversion of MT curves in the crust and the upper mantle, the objects with reduced resistance are marked. Approximately from 37° E, the turning of the azimuthal direction and a change of the amplitudes of tippers can clearly be seen, which is caused by anormal features of the region. The results obtained are compared with the distribution of Earth's deep heat flow.



УДК 678.643

© 2012

М. М. Братичак, О. І. Яцишин

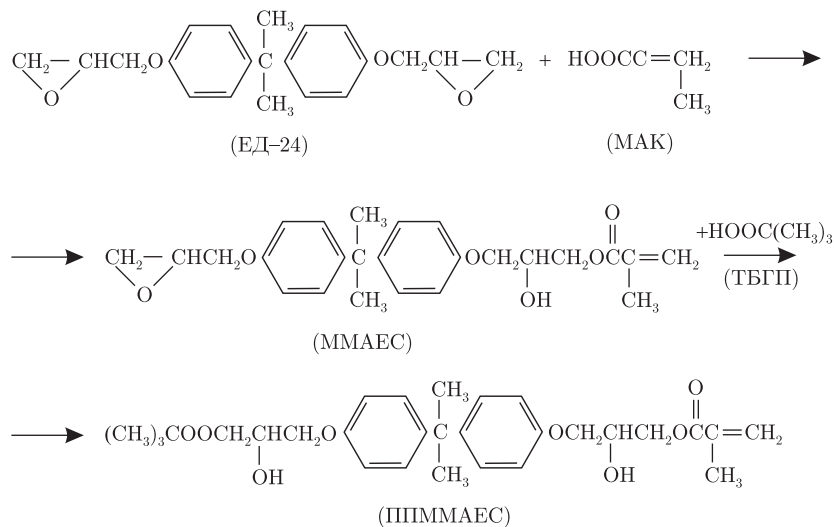
Пероксидна похідна монометакрилату епоксидної смоли ЕД-24

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Ю. Ю. Керчею)

Запропоновано отримувати на основі епоксидної смоли ЕД-24 олігомер, який одночасно містить пероксидну групу та метакрилатний фрагмент. Вивчено вплив природи та кількості каталізатора, співвідношення вихідних речовин, природи розчинника та температури процесу на швидкість перебігу реакції між монометакрилатом епоксидної смоли ЕД-24 та трет-бутил-гідропероксидом при 313, 323 і 333 К у присутності 18-краун-6, $ZnCl_2$ та каталітичної системи 18-краун-6 + $ZnCl_2$. Синтезовано та схарактеризовано пероксидну похідну монометакрилату епоксидної смоли ЕД-24 (ППММАЕС). Показано на прикладі промислової смоли ЕД-22 можливість використання ППММАЕС як активного додатку для структурування полімерної суміші у присутності поліетиленполіаміну при 383, 403 і 423 К.

Олігомери, що містять у своїй структурі різні за природою функційні групи, знаходять застосування як активні добавки до полімерних композиційних матеріалів [1] та як макроініціатори [2]. З них на особливу увагу заслуговують сполуки, які отримують на основі епоксидних смол. Присутність у молекулі епоксидної смоли реакційної епоксидної групи дає змогу отримувати на її основі олігомери з різноманітними функційними групами. Так, при хімічній модифікації епоксидних смол акриловими кислотами отримано олігомери з кінцевими ненасиченими зв'язками та гідроксильними групами [3]. При обробленні епоксидних сполук гідропероксидами отримано олігомери з пероксидною та епоксидною групами [4, 5]. Хімічна модифікація останніх спиртами-таломерами, що містять атоми флуору, дозволяє синтезувати продукти, які одночасно містять пероксидну і гідроксильні групи та атоми флуору [6, 7].

У роботі запропоновано отримувати на основі епоксидної смоли ЕД-24 олігомер, який одночасно містить пероксидну групу та метакрилатний фрагмент за такою схемою:



Пероксидну похідну монометакрилату епоксидної смоли ЕД-24 (ППММАЕС) в науковій літературі не описано.

Синтез ППММАЕС проводили у дві стадії. На першій стадії, згідно з методикою [2], з урахуванням необхідності збереження вільної епоксидної групи отримували монометакрилат епоксидної смоли ЕД-24 (ММАЕС). Для цього в тригорлий реактор з механічним перемішуванням у середовищі інертного газу завантажували 100 г епоксидної смоли ЕД-24 і 24,96 г МАК, розчинених у 250 мл толуолу. Як каталізатор реакції використовували тетрабутиламоній йодистий в кількості 5,36 г. Реакційну масу при 373 К витримувати впродовж 1,5 год, охолоджували, переносили в ділильну лійку та відмивали каталізатор водою. Верхній органічний шар вакуумували до відгонки 3/4 об'єму розчинника. Надалі залишок висаджували петролейним етером і висушували при 313 К та залишковому тиску 133–266 Па до постійної маси. Отриманий продукт характеризувався молекулярною масою (M_n) 375 г/моль та епоксидним числом (е. ч.) 10,8%. Синтезований таким чином ММАЕС надалі використовували для синтезу ППММАЕС.

З метою встановлення умов перебігу реакції між ММАЕС і *трет*-бутил-гідропероксидом (ТБГП) вивчено вплив природи та кількості каталізатора, співвідношення вихідних речовин, природи розчинника та температури процесу на швидкість проходження такої реакції.

Взаємодію ММАЕС з ТБГП вивчали в тригорлому реакторі з механічною мішалкою, зворотним холодильником и термометром. У реактор поміщали ММАЕС, розчинник і ТБГП, нагрівали з точністю $\pm 0,1$ К до певної температури та додавали водні розчини каталізаторів: 18-краун-6, ZnCl_2 і 18-краун-6 + ZnCl_2 . Через певні проміжки часу відбирали проби по 0,5 мл та визначали концентрацію епоксидних груп $[\text{C}]_{\text{еп. гр}}$ (моль/л) за формулою, запропонованою раніше [6].

Деякі результати досліджень демонструють рис. 1 та табл. 1. Як видно з рис. 1, реакція між ТБГП та ММАЕС є реакцією другого порядку. З табл. 1 знаходимо, що каталізаторами такої реакції можуть бути як 18-краун-6, ZnCl_2 , так і каталітична суміш, що складається з 18-краун-6 + ZnCl_2 . Реакційним середовищем може слугувати не тільки 2-пропанол, а й толуен і 1,4-діоксан. Перебіг такої реакції залежить від співвідношення реагуючих речовин, причому найбільша швидкість реакції за вивчених умов спостерігається за кількості

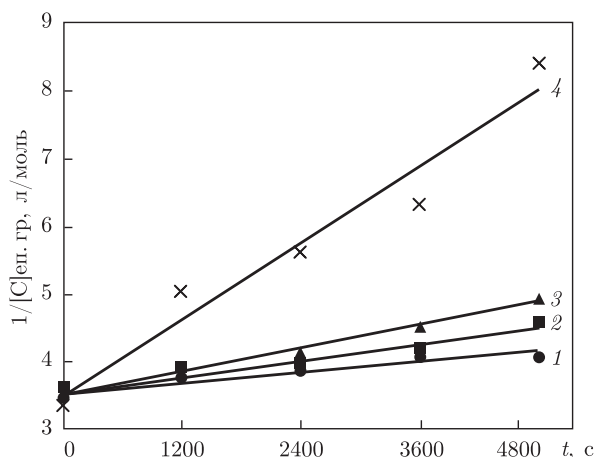


Рис. 1. Кінетичні анаморфози в координатах $1/C-t$ для реакції ММАЕС з ТБГП при 323 К у середовищі 2-пропанолу. Кількість ТБГП становила, моль: 0,5 (1), 1,0 (2), 2,0 (3) й 3,0 (4) у розрахунку на 1 г-екв. епоксидної групи ММАЕС. Каталітична система 18-краун-6: $ZnCl_2$ дорівнює 1 : 2 моль із розрахунку $ZnCl_2$ — 10% (мольн.) на 1 г-екв. епоксидної групи ММАЕС

ТБГП 3,0 моль на 1 г-екв. ММАЕС (див. рис. 1; табл. 1). На швидкість перебігу реакції має також вплив температура процесу і реакційне середовище. Швидкість реакції між ТБГП і ММАЕС у середовищі 2-пропанолу й толуену є практично однаковою і зменшується при використанні як реакційне середовище 1,4-діоксан. Із підвищенням температури до 333 К спостерігається значне підвищення швидкості реакції. Подальше її підвищення дає змо-

Таблиця 1. Ефективні константи швидкості реакції взаємодії ТБГП з ММАЕС

Кількість ТБГП, моль/(г-екв.) епоксидної групи ММАЕС	Каталізатор; кількість, %(мольн.)/(г-екв.) епоксидної групи	Розчинник	Температура реакції, К	$K_{\text{эф.}} \cdot 10^4$, л/(моль · с)
3,0	18-Краун-6; 10,0	2-Пропанол	323	$6,34 \pm 0,11$
3,0	18-Краун-6; 20,0	2-Пропанол	323	$7,58 \pm 0,43$
3,0	18-Краун-6; 30,0	2-Пропанол	323	$8,66 \pm 0,51$
3,0	18-Краун-6; 40,0	2-Пропанол	323	$7,47 \pm 0,22$
3,0	$ZnCl_2$; 5,0	2-Пропанол	323	$8,00 \pm 0,36$
3,0	$ZnCl_2$; 10,0	2-Пропанол	323	$12,50 \pm 0,60$
3,0	$ZnCl_2$; 20,0	2-Пропанол	323	$7,20 \pm 0,80$
3,0	$ZnCl_2$; 30,0	2-Пропанол	323	$4,10 \pm 0,46$
3,0	$ZnCl_2$; 40,0	2-Пропанол	323	$4,30 \pm 0,36$
3,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 3,33+10,0	2-Пропанол	323	$5,60 \pm 0,30$
3,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 5,0+10,0	2-Пропанол	323	$9,13 \pm 0,56$
3,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 10,0+10,0	2-Пропанол	323	$5,06 \pm 0,21$
1,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 5,0+10,0	2-Пропанол	323	$1,90 \pm 0,65$
2,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 5,0+10,0	2-Пропанол	323	$3,10 \pm 0,43$
3,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 5,0+10,0	Толуен	323	$9,80 \pm 0,11$
3,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 5,0+10,0	1,4-Діоксан	323	$5,60 \pm 0,21$
3,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 5,0+10,0	2-Пропанол	313	$5,20 \pm 0,26$
3,0	18-Краун-6 + $ZnCl_2$; 5,0+10,0	2-Пропанол	333	$51,0 \pm 0,14$

Примітка: 18-Краун-6 використовували у вигляді 25%-го водного розчину, $ZnCl_2$ — у вигляді 20%-го водного розчину.

гу надалі збільшувати ефективну константу швидкості реакції ТБГП з ММАЕС, але при цьому має місце побічна реакція, а саме, розклад утвореного продукту за пероксидними групами утвореного ППММАЕС. Оброблення отриманих результатів в аренисовських координатах дозволило визначити енергію активації реакції ТБГП з ММАЕС, яка становить 96,0 кДж/моль.

ППММАЕС синтезували в тригорлому реакторі у середовищі інертного газу, виходячи із 100 г ММАЕС і 71,09 г ТБГП, розчинених у 350 мл 2-пропанолу, 3,28 г 18-краун-6 у вигляді 25%-го водного розчину та 3,39 г $ZnCl_2$ у вигляді 20%-го водного розчину. Суміш при перемішуванні та нагріванні до 333 К витримували 5 год, охолоджували до кімнатної температури і переносили в ділительну лійку, додавали 350 мл толуолу, вимивали каталізатор і вакуумували при 313 К до 1/3 об'єму від початкової кількості. Залишок виливали у петролейний етер. Отриманий продукт (ППММАЕС) висушували спочатку на повітрі, а потім у вакуум-сушильній шафі при 303 К до постійної маси. Отримано 146 г (вихід 85,4%) ППММАЕС, розчинного у більшості органічних розчинників. Продукт характеризувався M_n 465 г/моль, активним киснем 2,3% та не містив епоксидних груп.

Структуру синтезованого продукту було підтверджено ІЧ спектроскопічними дослідженнями. У синтезованому ППММАЕС у порівнянні з ММАЕС при 895 см^{-1} знайдено смугу поглинання, яка відповідає валентним коливанням — O—O-зв'язку. При цьому в синтезованому олігомері відсутня смуга поглинання при 912 см^{-1} , на що вказує відсутність вільних епоксидних груп, які за наведеною вище реакцією заміщені на пероксидні фрагменти. Присутність метакрилатного фрагмента в молекулі ППММАЕС доказана смугою поглинання при 1620 см^{-1} , що відповідає подвійному зв'язку, та при 1720 см^{-1} , яка характерна для валентних коливань групи $>C=O$ в естерах.

Синтезований ППММАЕС вивчено як активний компонент епоксидолігоестеракрилатної суміші на основі епоксидної смоли ЕД-22 та олігоестеракрилату ТГМ-3. Для цього були приготовлені три суміші, які містили: 90 м. ч. епоксидної смоли ЕД-22 та 10 м. ч. олігоестеракрилату ТГМ-3 (композиція I), 90 м. ч. смоли ЕД-22, 10 м. ч. ТГМ-3 та 10 м. ч. синтезованого ППММАЕС (композиція II) та композиція III, що містила 90 м. ч. смоли ЕД-22 і 10 м. ч. ППММАЕС. Затвердником усіх композицій слугував поліетиленполіамін у кількості 14 м. ч.

Процес структурування сумішей проходив ступінчасто: спочатку при кімнатній температурі впродовж 24 год, а потім при 383, 403 й 423 К впродовж 75 хв. Контроль за структурними змінами проводили з урахуванням зміни гель-фракції (G) та твердості (T) отриманих плівок. Деякі отримані результати демонструє рис. 2. З рисунку видно, що найкращі результати отримано при структуруванні композиції III, яка складається тільки із епоксидної смоли ЕД-22 і синтезованого ППММАЕС. Підвищення температури процесу структурування до 403 К приводить до отримання в композиції III за 75 хв гель-фракції 96,2% при твердості плівок 0,61 в. о. Для порівняння, у випадку композиції I кількість гель-фракції становить 83,3% при твердості 0,43 в. о. Композиція II при 403 К містить: вміст гель-фракції — 95,2%, твердість плівок — 0,45 в. о. Підвищення температури до 423 К призводить до невеликого зменшення вмісту гель-фракції в композиції III (92%) при збереженні твердості плівок (0,57 в. о.), що викликано швидким розкладом пероксидних груп у ППММАЕС при температурі 423 К.

Таким чином, отримані результати підтверджують можливість використання синтезованого ППММАЕС як реакційноздатного компонента при структуруванні промислових епоксидних смол.

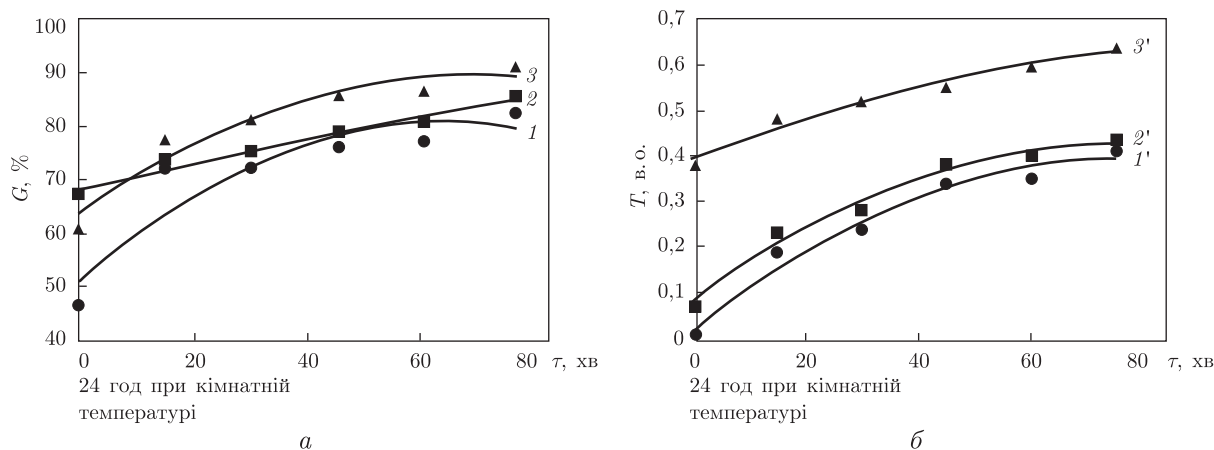


Рис. 2. Залежність вмісту гель-фракції (а) та твердості плівок за приладом М-3 (б) від тривалості структурирування при 383 К для композицій I (1, 1'), II (2, 2') й III (3, 3')

1. Братичак М. М., Червінський Т. І., Яцишин О. І. Пероксидні олигомери на основі ціанурової епоксидної смоли // Доп. НАН України. – 2010. – № 8. – С. 137–141.
2. Voronov S., Samaryk V. Heterofunctional oligoperoxides on the interface // Chem. and Chem. Technol. – 2007. – 1, No 1. – P. 1–13.
3. Habib F., Vajrai M. UV Curable Heat Resistant Epoxy Acrylate Coatings // Ibid. – 2010. – 4, No 3. – P. 205–216.
4. Братичак М. М., Червінський Т. І., Гагін М. Б. та ін. Хімічна модифікація епоксидних смол гідропероксидами в присутності каталітичної системи 18-краун-6 + ZnCl₂ // Укр. хім. журн. – 2005. – 71, № 5. – С. 50–54.
5. Братичак М. М., Носова Н. Г., Червінський Т. І. Модифікація поверхні скла епоксидолігомерними сумішами, які містять пероксидну похідну епоксидної смоли ЕД-20 // Доп. НАН України. – 2006. – № 9. – С. 140–145.
6. Братичак М. М., Шуст О. В., Астахова О. Т., Ягупольський Ю. Л. Хімічна модифікація епоксидних смол флуорвмісними спиртами-таломерами // Укр. хім. журн. – 2010. – 76, № 8. – С. 116–120.
7. Bratychak M., Chervinsky T., Shust O., Shyshchak O. Chemical Modification of ED – 24 Epoxy Resin Peroxy Derivative by C₉H₄F₁₆O Fluorine – Containing Alcohol-Telomer // Chem. and Chem. Technol. – 2010. – 4, No 2. – P. 125–130.

Національний університет “Львівська політехніка”

Надійшло до редакції 05.03.2012

М. Н. Братычак, О. И. Яцышин

Пероксидная производная монометилметакрилата эпоксидной смолы ЭД-24

Предложен метод получения на основе эпоксидной смолы ЭД-24 олигомера, который одновременно содержит пероксидную группу и метакрилатный фрагмент. Изучено влияние природы та количества катализатора, соотношение исходных веществ, природы растворителя и температуры процесса на скорость протекания реакции между монометакрилатом эпоксидной смолы ЭД-24 и трет-бутил-гидропероксидом при 313, 323 и 333 К в присутствии 18-краун-6 + ZnCl₂ и каталитической системы 18-краун-6 + ZnCl₂. Синтезирована и охарактеризована пероксидная производная монометилметакрилата эпоксидной смолы ЭД-24 (ППММАЭС). Показана на примере промышленной смолы ЭД-22 возможность использования ППММАЭС как активного компонента для структурирования полимерной смеси в присутствии полиэтиленполиамин при 383, 403 и 423 К.

M. M. Bratychak, O. I. Iatsyshyn

Peroxy derivative of ED-24 epoxy resin monomethacrylate

The oligomer containing a peroxy group and a methacrylate fragment at the same time has been obtained on the basis of ED-24 epoxy resin. The effects of catalyst nature and amount, initial reagents ratio, solvent nature, and temperature on the reaction rate have been studied. The reaction between monomethacrylate of ED-24 epoxy resin and tert-butylhydroperoxide proceeds at 313, 323, and 333 K in the presence of 18-Crown-6, ZnCl₂, and the 18-Crown-6 + ZnCl₂ catalytic system. The peroxy derivative of ED-24 epoxy resin monomethacrylate (PDMMAER) has been synthesized, and its characteristics have been determined. Taking industrial resin ED-22, as an example, the possibility of the PDMMAER application as an active additive for the crosslinking of a polymer mixture in the presence of polyethylenepolyamine at 383, 403, and 423 K has been shown.

І. С. Давідовіч, Г. В. Калітовська, Н. Г. Антонюк, А. Ф. Бурбан

Отримання альгінатних мікрокапсул мікроемульсійним методом: вплив параметрів процесу на характеристики мікрокапсул

(Представлено академіком НАН України М. Т. Картелем)

Розроблено та оптимізовано методику отримання альгінатних мікрокапсул мікроемульсійним методом. Досліджено вплив параметрів процесу, таких, як співвідношення полімер:емульгатор, швидкість перемішування і концентрація розчину полімеру на розміри та дисперсність мікрокапсул.

Останнім часом все частіше увагу дослідників привертають так звані розумні матеріали, під якими розуміють речовини, що здатні реагувати на незначні зміни зовнішнього середовища заздалегідь запрограмованим чином. Серед водорозчинних полімерів, які використовуються для отримання мікрокапсул, чутливих до змін рН, для адресної доставки лікарських засобів, великого поширення набув альгінат натрію через його біосумісність, здатність до біодеградації та мукоадгезивні властивості.

Розмір альгінатних мікрокапсул істотно впливає на спосіб їх введення в організм. Так, мікрокапсули розміром 20 мкм можна вводити безпосередньо у кров'яне русло людини. Мікрокапсули, розміри яких більше, вводять перорально. Згідно з вимогами, мікрокапсули для введення лікарських засобів повинні мати вузький розподіл за розмірами та індекс однорідності 2,0. Крім того, розмір мікрокапсул також впливає на кінетику вивільнення введених лікарських засобів.

Метою роботи було отримання альгінатних мікрокапсул із заданими характеристиками, які в подальшому будуть використовуватися як рН чутлива матриця для цільової доставки та контрольованого вивільнення лікарських засобів. Мікрокапсули, які отримано методом екструзії, відповідають вимогам стосовно ширини розподілу та однорідності, однак мають великі розміри. Це призводить до незадовільної швидкості вивільнення з них лікарських засобів [1], що є одним з недоліків методу. Мікроемульсійний метод дозволяє широко варіювати розміри альгінатних мікрокапсул та ширину їх розподілу за розмірами. Характеристики мікрокапсул можна контролювати, змінюючи такі параметри процесу мікрокапсулювання, як природа емульгатора, співвідношення полімер:емульгатор, швидкість перемішування та концентрація розчину полімеру.

Експериментальна частина. Методика отримання мікрокапсул мікроемульсійним методом. Розчин альгінату натрію (1,25, 1,5, 1,75% й 2,0%) додавали краплями до суміші 160 мл рослинної олії та 1,0–2,2 г поверхнево-активної речовини (ПАР) Tween-80, перемішували на механічній мішалці впродовж 10 хв з частотою 600–1200 об./хв, потім додавали 30 мл 0,33 моль/л розчину хлориду кальцію, продовжуючи перемішування 30 хв. Після цього емульсію відстоювали 60 хв для отвердіння мікрокапсул. Відфільтровували отримані мікрокапсули на ультрафільтраційній комірі Amicon 8200 (Millipore, США) непроточного типу під тиском 3 атм, промивали дистильованою водою та етиловим спиртом до відсутності ПАР у промивній рідині.

Методика визначення розмірів мікрокапсул. Визначення розміру мікрокапсул проводили за допомогою світлового мікроскопа MBL 2000. Невелику кількість сухих мікрокапсул суспендували в дистильованій воді (10 мл) за допомогою ультразвуку. Краплину суспензії поміщали на предметне скло, зафарбовували розчином фуксину. Визначали розмір 300 мікрокапсул при збільшенні 4800. Середнє значення та розподіл за розмірами за допомогою програми Microsoft Excel.

Індекс однорідності (UI) визначали за формулою [2]:

$$UI = \frac{D_w}{D_n},$$

де D_w — середньомасовий діаметр мікрокапсул; D_n — середньочисловий діаметр мікрокапсул.

Аналіз результатів. *Вплив швидкості перемішування емульсії на розмір альгінатних мікрокапсул.* Швидкість перемішування мікроемульсії зміщує рівновагу коалесценція/диспергування крапель розчину полімеру, а отже, впливає на розмір мікрокапсул (табл. 1) [3].

Як і очікувалося, зменшення швидкості перемішування від 1800 до 600 об./хв призводить до збільшення середнього розміру мікрокапсул від 8,9 до 19,8 мкм, а при швидкості <800 об./хв мікрокапсули набувають видовженої форми. Збільшення швидкості перемішування >1200 об./хв викликає високу турбулентність, спінування та адгезію до стінок контейнера, що також призводить до отримання мікрокапсул неправильної форми. Так, неагреговані мікрокапсули сферичної форми з найвужчою межею розподілу за розмірами було отримано при швидкості перемішування 1200 об./хв.

Вплив концентрації альгінату натрію на розмір альгінатних мікрокапсул. На наступному етапі було досліджено вплив концентрації альгінату натрію на розподіл мікрокапсул за розмірами, оскільки в цьому випадку відбувається зміна в'язкості розчину полімеру. Концентрацію полімеру в розчині варіювали від 1,25 до 2,00%. Як видно з рис. 1, а–в, криві розподілу мікрокапсул за розмірами, отриманих з розчинів полімерів концентрацією 1,25, 1,50 та 1,75%, є асиметричними. При збільшенні концентрації полімеру до 2,00% крива розподілу стає симетричною та звужується, отже мікрокапсули стають більш однорідними (див. г на рис. 1). Характеристики розмірів та індекс однорідності мікрокапсул демонструє табл. 2. Як видно з таблиці, збільшення концентрації розчину альгінату натрію зумовлює зростання середніх розмірів мікрокапсул. Таким чином, змінюючи концентрацію альгінату натрію в розчині, можна отримати різні за розміром мікрокапсули.

Таблиця 1. Характеристики альгінатних мікрокапсул, отриманих мікроемульсійним методом при різних швидкості перемішування

Швидкість перемішування, об./хв	$D_{сер}$, мкм	D_{min} , мкм	D_{max} , мкм	Індекс однорідності	Сферичність
600	19,8	5,0	47,5	1,8	—
800	15,7	5,8	47,5	1,7	—
1000	15,3	5,0	35,0	1,7	+
1200	10,4	5,2	32,3	1,7	+
1400	10,0	5,0	31,7	1,7	—
1600	9,5	4,8	29,6	1,7	—
1800	8,9	4,6	27,8	1,7	—

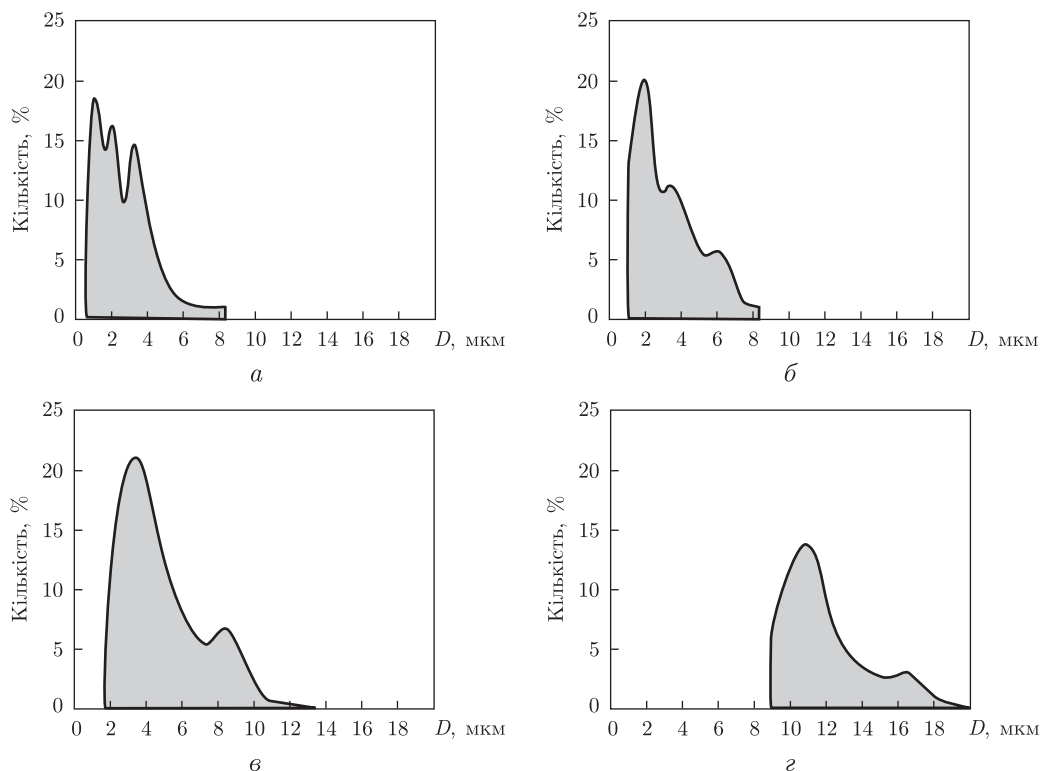


Рис. 1. Розподіл за розмірами альгінатних мікрокапсул, отриманих мікроемulsійним методом при різних концентраціях альгінату (*a* – 1,25%, *б* – 1,50%, *в* – 1,75%, *г* – 2,00%): співвідношення ПАР : альгінат натрію – 5,5 : 1,0 (1200 об./хв)

Вплив співвідношення ПАР : альгінат натрію на розмір мікрокапсул. При використанні розчинів полімерів з високою в'язкістю швидкість коалесценції перевищує швидкість диспергування. Розв'язати цю проблему можна додаванням диспергуючого агента, який створює тонкий захисний шар навколо мікрокапсул, знижуючи при цьому ступінь коалесценції. Як диспергуючі агенти використовують різні полімерні матеріали [4], білки [5] та поверхнево-активні речовини [6]. У нашій роботі для стабілізації емульсії “вода в маслі” використовували неіоногенну ПАР Tween-80.

Вплив кількості емульгатора на розмір альгінатних мікрокапсул було досліджено при зміні вмісту емульгатора за постійної концентрації розчину альгінату натрію (2%). При збільшенні кількості ПАР спостерігається зменшення розмірів мікрокапсул, що можна пояснити зростанням стійкості диспергованих крапель розчину полімеру до злипання, що зумовлено сорбцією молекул Tween-80 на поверхні полімеру, та утворенням захисного шару

Таблиця 2. Характеристики альгінатних мікрокапсул, одержаних мікроемulsійним методом при різних концентраціях альгінату натрію

Концентрація альгінату натрію, %	$D_{\text{сеп}}$, мкм	D_{min} , мкм	D_{max} , мкм	Індекс однорідності
1,25	2,2	0,6	8,3	2,5
1,50	2,9	1,0	8,3	2,3
1,75	4,9	1,7	27,1	2,7
2,00	10,4	5,2	32,3	1,7

(табл. 3). Кількість емульгатора істотно впливає як на розмір мікрокапсул, так і на їх індекс однорідності. Крім того, зменшення вмісту ПАР спричинює звуження межі розподілу мікрокапсул за розміром. У даному випадку спостерігається чітка кореляція між вмістом ПАР і IU альгінатних мікрокапсул. Отже, за результатами дослідження можна зробити висновки, що кількість емульсифікатора є визначальним параметром, який впливає на ширину розподілу та однорідність мікрокапсул.

Регресійний аналіз. Для систематичного дослідження спільного впливу параметрів мікроемульсійного процесу (концентрації альгінату натрію, C ; вмісту ПАР, m ; швидкості перемішування, w) на $D_{\text{сер}}$ та IU альгінатних мікрокапсул був використаний регресійний аналіз (табл. 4).

Регресійна залежність середнього діаметра мікрокапсул від змінних параметрів є значущою на 100,0% і має $R^2 = 0,975$ та доводить, що всі досліджені параметри значно впливають на розмір мікрокапсул. Концентрація альгінату прямо пропорційно впливає на середній діаметр, а зі збільшенням вмісту ПАР та швидкості перемішування емульсії розмір мікрокапсул зменшується. Дані параметри на 47% обумовлюють розмір альгінатних мікрокапсул. Рівняння регресії має такий вигляд:

$$D_{\text{сер}} = 14,875C - 18,600m - 0,012w + 36,789.$$

З параметрів регресії IU альгінатних мікрокапсул від змінних параметрів, яка є значущою на 99,5% та має $R^2 = 0,787$, видно, що швидкість перемішування не впливає на однорідність розмірів мікрокапсул, тоді як концентрація альгінату натрію має обернено пропорційний вплив, а вміст емульгатора — прямо пропорційний. Вивчені параметри тільки на 30% зумовлюють дисперсність мікрокапсул. Рівняння регресії має такий вигляд:

$$UI = 0,323m - 1,198C + 3,484.$$

Таким чином, проведені дослідження свідчать, що найбільш сприйнятливими умовами для одержання мікрокапсул сферичної форми з вузьким розподілом за розміром є: концентрація полімеру 2,0%; співвідношення полімер : ПАР у діапазоні від 1 : 1 до 1,0 : 5,5; швидкість перемішування 1000–1200 об./хв.

Таблиця 3. Характеристики альгінатних мікрокапсул при різному співвідношенні ПАР : альгінат натрію

Альгінат натрію-ПАР	$D_{\text{сер}}$, мкм	D_{min} , мкм	D_{max} , мкм	Індекс однорідності
1,0 : 1	44,1	17,5	113,3	1,22
1,0 : 2,5	37,0	15,8	79,2	1,39
1,0 : 4	19,3	7,5	40,0	1,45
1,0 : 5,5	10,4	5,2	32,3	1,70

Таблиця 4. Параметри лінійної регресії

Змінна	Залежність $D_{\text{сер}}$			Залежність індексу однорідності		
	Коефіцієнти		Значущість	Коефіцієнти		Значущість
	B	похибка		B	похибка	
Константа	36,789	$\pm 8,065$	0,002	3,484	$\pm 0,816$	0,003
C	14,875	$\pm 3,043$	0,001	-1,198	$\pm 0,308$	0,005
m	-18,600	$\pm 1,268$	0,000	0,323	$\pm 0,128$	0,036
w	-0,012	$\pm 0,003$	0,003	0,000	$\pm 0,000$	0,932

1. Чабан М. О., Давидович І. С., Антонюк Н. Г. та ін. Одержання рН-чутливих альгінат-агарових мікрокапсул для контрольованого вивільнення білкових лікарських засобів // Наук. зап. НаУКМА. Сер. Хімічні науки і технології. – 2011. – **118**. – С. 30–35.
2. Dubey R. R., Parikh R. H. Two-Stage Optimization Process for Formulation of Chitosan Microspheres // AAPS PharmSciTech. – 2004. – **5**. – P. 1–9.
3. Denkbas E. B., Seyyal M., Piskins E. 5-Fluorouracil loaded chitosan microspheres for chemoembolization // J. Microencapsul. – 1999. – **16(6)**. – P. 741–749.
4. Bezemer J. M., Radersma R., Grijpma D. W. et al. Microspheres for protein delivery prepared from amphiphilic multiblock copolymers: 1. Influence of preparation techniques on particle characteristics and protein delivery // J. Control. Release. – 2000. – **67**. – P. 233–248.
5. Lambert O., Nagele O., Loux V. et al. Poly (ethylene carbonate) microspheres: manufacturing process and internal structure characterization // Ibid. – 2000. – **67**. – P. 89–99.
6. Petrovic L. B., Sovilj V. J., Katona J. M. et al. Influence of polymer-surfactant interactions on o/w emulsion properties and microcapsule formation // J. Colloid and Interface Sci. – 2010. – **342**. – P. 333–339.

Національний університет
“Киево-Могилянська академія”

Надійшло до редакції 14.03.2012

И. С. Давидович, Г. В. Калитовская, Н. Г. Антонюк, А. Ф. Бурбан

Получение альгинатных микрокапсул микроэмульсионным методом: влияние параметров процесса на характеристики микрокапсул

Разработана и оптимизирована методика получения альгинатных микрокапсул микроэмульсионным методом. Исследовано влияние параметров процесса, таких, как соотношение полимер:эмульгатор, скорость перемешивания и концентрация раствора полимера на размеры и дисперсность микрокапсул.

I. S. Davidovich, H. V. Kalitovska, N. G. Antoniuk, A. F. Burban

Microemulsion technique for the production of alginic microcapsules: influence of parameters of the process on the characteristics of microcapsules

The microemulsion technique for the production of alginic microcapsules is developed and optimized. It is shown that varying the parameters such as the ratio of polymer: emulsifier, stirring speed, and polymer concentration influences the size and the dispersion of microcapsules.

В. Д. Курочкін

Частотний коефіцієнт в теорії абсолютних швидкостей реакцій

(Представлено академіком НАН України Ю. В. Найдичем)

Розглядається питання визначення частотного фактора у відомій формулі Ейрінга–Полані в теорії активованого комплексу. Отримана у напівкласичному наближенні ця формула для переходу частинки через потенційний бар'єр не містить характеристик бар'єра (енергії, протяжності), що суперечить сучасним уявленням. Показано, що послідовне дотримання принципів квантової механіки призводить до знаходження цього коефіцієнта з співвідношення невизначеності Гайзенберга для енергії. Розглядається застосування запропонованої формули на прикладі переходу атомів через потенційний бар'єр при випаровуванні деяких елементів у вакуумі.

Теорію абсолютних швидкостей реакцій або теорію активованого комплексу (ТАК) було розвинуто в 30-х роках минулого століття завдяки науковим публікаціям Ейрінга, Еванса і Полані [1–3]. Докладний огляд стану проблеми можна знайти у роботах [4, 5] і тому ми не будемо зупинятися на варіантах розвитку теорії. Вважається, що ТАК описує кінетику будь-яких процесів, які полягають у перегрупованні частинок, і тому формула Ейрінга (1935) використовувалася для розрахунку швидкостей не лише хімічних реакцій, а й для розрахунків швидкості таких фізико-хімічних процесів, як випаровування, кінетика розтікання краплі тощо [6].

Робота Г. Ейрінга була першою спробою розрахунку абсолютної швидкості реакції з використанням напівкласичного підходу. Частотний фактор у формулі Ейрінга виражається формулою $\nu = kT/h$, з якої видно, що він залежить лише від теплової енергії частинки. Відсутність у формулі енергії бар'єра, що долається, є слабкою стороною ТАК і суперечить сучасним уявленням про поведінку частинки у потенційній ямі.

Існування впродовж понад 70 років формули Ейрінга у первісному вигляді говорить про те, що це питання потребує спеціального розгляду. Для подальшого обговорення необхідно навести висновок вказаної формули, тим більше, що він дуже лаконічний. Згідно з цією теорією, непружний процес (утворення молекули, відрив атома від поверхні при випаровуванні, дифузія атомів у конденсованій фазі) відбувається через певний перехідний стан системи (активованій комплекс). Автори вважали, що перехід через потенційний бар'єр можна вважати як рух частинки зі швидкістю v , що дорівнює її тепловій швидкості $(2kT/\pi m^\ddagger)^{1/2}$ уздовж шляху реакції δ на вершині бар'єра. Оскільки довжина шляху δ невідома, то було запропоновано оригінальний прийом. Вважалось, що частинка має трансляційну ступінь свободи при своєму русі вздовж бар'єра із статистичною сумою $(2\pi m^\ddagger kT)^{1/2} \delta/h$. Тоді підстановка цієї величини у формулу призводить до скорочення невідомої величини δ і для швидкості реакції було отримано таке співвідношення [3]:

$$R = \chi 1/2 C_\delta^\ddagger (v/\delta) = \chi 1/2 C^\ddagger ((2\pi m^\ddagger kT)^{1/2} \delta/h) (2kT/\pi m^\ddagger)^{1/2} / \delta = \chi (kT/h) C^\ddagger, \quad (1)$$

де $\nu = kT/h$ так звана частота переходу частинок через потенційний бар'єр; χ — трансмісійний коефіцієнт $\approx 1/2 - 1$; C_δ^\ddagger — концентрація активованих комплексів на довжині δ ; C^\ddagger — концентрація активованих комплексів на довжині δ у нижньому трансляційному стані; m^\ddagger — маса активованого комплексу; k — константа Больцмана; T — температура.

Використовуючи статистичну термодинаміку, константу k_1 швидкості мономолекулярної реакції у цій теорії зазвичай записують так:

$$k_1 = (kT/h)(Q^\ddagger/Q_i) \exp(-E_a^\ddagger/kT). \quad (2)$$

Тут Q^\ddagger/Q_i відношення статистичних сум системи в перехідному та вихідному станах; E_a^\ddagger — енергія активації.

Для кімнатної температури “час переходу через бар'єр”, що розрахований за формулою Ейрінга, становить $\approx 10^{-13}$ с. Необхідно відзначити, що в енциклопедіях час існування перехідного стану оцінюється коректно (10^{-15} с); це відповідає енергії (~ 4 eВ), знайденої із співвідношення невизначеності. На жаль, у літературі ці оцінки існують незалежно, без відповідного аналізу.

Формально вираз (1) можна отримати й іншим шляхом, не роблячи ніяких припущень щодо ступеня свободи вздовж координати реакції. Якщо припустити, що довжини бар'єра порядку довжини хвилі де Бройля $\delta \approx \lambda = h/p$, де p — імпульс частинки, а її швидкість дорівнює тепловій швидкості $(2kT/\pi m)^{1/2}$, можна отримати таке співвідношення:

$$R = \chi 1/2 C_\delta^\ddagger (v/\delta) = \chi 1/2 C_\delta^\ddagger (vp/h) = \chi 1/2 C_\delta^\ddagger (mv^2/h) = (\chi/\pi)(kT/h) C_\delta^\ddagger. \quad (3)$$

Видно, що це співвідношення з точністю до постійного множника збігається зі співвідношенням (1).

Отже, частота переходу через потенційний бар'єр в теорії Ейрінга не залежить від характеристик бар'єра, фігурує лише енергія теплового руху. Але, як відомо, класична частинка з енергією kT , яка менше енергії потенційного бар'єра, його взагалі не долає. Тому розглядаючи рух частинки і використовуючи такий самий напівкласичний підхід, треба було б враховувати не середню теплову швидкість одновимірного руху, а швидкість “енергійної” частинки, яка власно і долає бар'єр. Ця швидкість визначається її енергією (енергією активації) і дорівнює $(2E_a/m)^{1/2}$. Підставляючи це значення у співвідношення (3), формально маємо такий вираз для константи швидкості мономолекулярної реакції:

$$k_1 = \chi(E_a/h)(Q^\ddagger/Q_i) \exp(-E_a/kT). \quad (4)$$

У такій інтерпретації час, необхідний для подолання бар'єра $\tau = h/E$, дорівнює часу, який необхідний частинці для проходження відстані довжиною порядку довжини хвилі де Бройля при швидкості, яка знаходиться з величини енергії бар'єра. Наведені напівкласичні міркування не слід розглядати як обґрунтування формули (4). Більш строгий розгляд дозволяє показати зв'язок цього коефіцієнта із співвідношенням невизначеності Гайзенберга для енергії.

Процес подолання частинкою потенційного бар'єра є давно розв'язаною задачею у квантовій механіці. Цей розгляд дає значення ймовірностей подолання, відбиття, тунелювання та спектра енергій залежно від співвідношення енергії частинки, висоти бар'єра та його протяжності [7]. Питання часу, впродовж якого цей процес відбувається, вважається зрозумілим і таким, що впливає з принципу невизначеності Гайзенберга для енергії. Оскільки на

даний момент у фізичній хімії та хімічній кінетиці широко використовується згадана формула Ейрінга необхідно більш детально зупинитися на цьому питанні. Існують різні способи виведення співвідношення невизначеності для енергії. Більш загальний спосіб ґрунтується на використанні формалізму квантової механіки із застосуванням правила комутації операторів [7], але для даної задачі більш наочним є прямиий розрахунок. Відомо, що для нестационарного стану, якщо хвильова функція є суперпозицією двох функцій:

$$\Psi(r, t) = \sqrt{1/2}\psi_1(r) \exp(-iE_1t/\hbar) + \sqrt{1/2}\psi_2(r) \exp(-iE_2t/\hbar), \quad (5)$$

можливі вимірювані енергії E_1 й E_2 з імовірностями $1/2$ [8]. Ймовірності середньої енергії та середнього значення її квадрата, які усереднюються за допомогою функції (5) з урахуванням ортогональності та нормування відповідно становлять:

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi d^3r = \frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{2}E_2,$$

$$\langle E^2 \rangle = \int \Psi^* \hat{H}^2 \Psi d^3r = \frac{1}{2}E_1^2 + \frac{1}{2}E_2^2,$$

де \hat{H} — оператор Гамільтона. Звідси невизначеність в енергії опишемо виразом

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \frac{1}{2}|E_1 - E_2|. \quad (6)$$

Густина ймовірності положення частинки залежить від часу і визначається таким виразом:

$$\Psi^* \Psi = 1/2[|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 \exp(+i(E_1 - E_2)t/\hbar) + \psi_1 \psi_2^* \exp(-i(E_1 - E_2)t/\hbar)].$$

Видно, що її положення осцилює з періодом $\delta t = 2\pi\hbar/|E_1 - E_2|$, звідки безпосередньо слідує відоме співвідношення Гайзенберга для енергії та часу. Як відомо, у нерелятивістській квантовій механіці координата і час входять у рівняння нерівноправно і тому δt інтерпретується не як невизначеність, а як інтервал часу, впродовж якого відбувається перехід.

Виходячи з наведеного, формула для константи швидкості мономолекулярної реакцій повинна записуватися у такому вигляді:

$$k_1 = \chi(\Delta E/\hbar)(Q^\ddagger/Q_i) \exp(-E_a/kT). \quad (7)$$

У хімічній кінетиці ΔE з точністю, достатньою для практичних розрахунків, можна отождивити з енергією активації.

Наведені теоретичні викладки підтверджуються відомими експериментальними фактами. Так, переріз непружних зіткнень має максимальне значення, коли час перебування збуджуючої частинки (наприклад, електрона) на відстані приблизно рівної радіуса атома дорівнює величині, яка знаходиться з співвідношення невизначеності [9]. Це, зокрема, пояснює, чому збудження атомів у плазмі відбувається головним чином електронами. Їх швидкість для лабораторної плазми при енергії порядку одиниць еВ ($1 \text{ eV} \approx 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$), як раз така, що час перебування їх біля атома задовольняє співвідношенню невизначеності при типових значеннях енергії збудження атомів порядку кількох еВ. Для ефективного збудження іонами, маса яких у тисячі разів більше ніж маса електрона, їх енергія повинна складати десятки кілоелектронвольт, що відомо як критерій Мессі: $K_0 \approx \mu v_0^2/2 \approx \mu r_a^2 E_{0j}^2/2h^2$ [9].

Зіткнення з тепловими іонами при тій самій відстані між атомами, як відомо, призводить лише до розширення спектральних ліній внаслідок ефекту Штарка. Іонізація відбувається також ефективно при зіткненнях атомів з іонами у метастабільному збудженому стані (Пенінгівська іонізація). Згідно з формулою (6), при близьких значеннях енергій (майже резонансний процес) перехід можливий і при малих швидкостях частинок, тому що час переходу може бути значним.

Тривале використання формули Ейрінга пояснюється, ймовірно, тим, що Больцманівський множник більш сильно впливає на результати, ніж інші члени, та певним вибором величини енергії активації можна більш-менш адекватно описати процес. Такий підхід є лише певною апроксимацією, яка є дещо більш “фізичною”, ніж апроксимація поліномами, але при цьому розраховані енергії активації не відповідають експериментальним даним щодо енергії хімічного зв’язку, енергії випаровування або дифузії. Похибки розрахунків за формулою Ейрінга будуть також малопомітними при низьких значеннях енергії активації.

Відмінності формул (2) і (7) можна продемонструвати на прикладі процесу подолання атомами потенційного бар’єра при випаровуванні елементів у вакуумі. Ми спеціально обрали цей процес, враховуючи можливість порівняння з великою кількістю надійних довідкових даних, з одного боку, та відносною простотою мономолекулярного переходу — з іншого. Для розрахунків обрані тугоплавкі елементи з високими енергіями випаровування, де ефект, що розглядається, буде ясно виражений. Рішення задачі будемо шукати на основі формули (7) у такому вигляді:

$$J = N_s(E_a/h)Q^\ddagger/Q_c \exp(-E_a/kT), \quad (8)$$

де N_s — поверхнева густина атомів ($1/\text{м}^2$), яка знаходиться з атомного об’єму V_a та числа Авогадро N_a , $N_s = (V_a/N_a)^{-2/3}$. Статистичні суми атомів у конденсованому стані Q_c наведено у довіднику [10], а перехідний стан атомів у першому наближенні можна розглядати як адсорбований двовимірний газ із відповідною трансляційною статистичною сумою: $Q^\ddagger = (2\pi m_a kT) r_a^2 / h^2$. Зв’язок між густиною потоку випаровування й тиском пари дається відомим співвідношенням Кнудсена.

Згідно з положеннями теорії активних зіткнень, енергія активації має бути близькою до енергії хімічного зв’язку, в даному випадку — до енергії випаровування. Теплота випаровування починаючи з енергії сублімації при 0 К лінійно зменшується із зростанням температури. Коефіцієнт обирали таким чином, щоб температура кипіння відповідала відомим літературним даним. Адекватність підходу легко перевірити шляхом порівняння отриманої теплоти випаровування при температурі кипіння з відомими даними. Справедливо також зворотне, якщо підставити в формулу (8) відомі теплоти випаровування, то можна знайти температуру кипіння та порівняти її з табличними даними. Формула (8) дозволяє розрахувати тиск пари в широкому діапазоні температур, що також можна порівняти з відомими значеннями. Результати розрахунків наведено на рис. 1 і в табл. 1.

Ентальпії випаровування при використанні формули (8) достатньо точно узгоджуються з довідковими даними. При використанні формули Ейрінга (2) для компенсації занадто низького частотного коефіцієнта доводиться сильно занижувати енергію випаровування. Підстановка у цю формулу табличних даних за теплою випаровування дає завищені на сотні градусів температури кипіння. Невеликі розходження між отриманими за формулою (8) і літературними даними пояснюється наближеним характером описання статистичних сум атомів у перехідному стані.

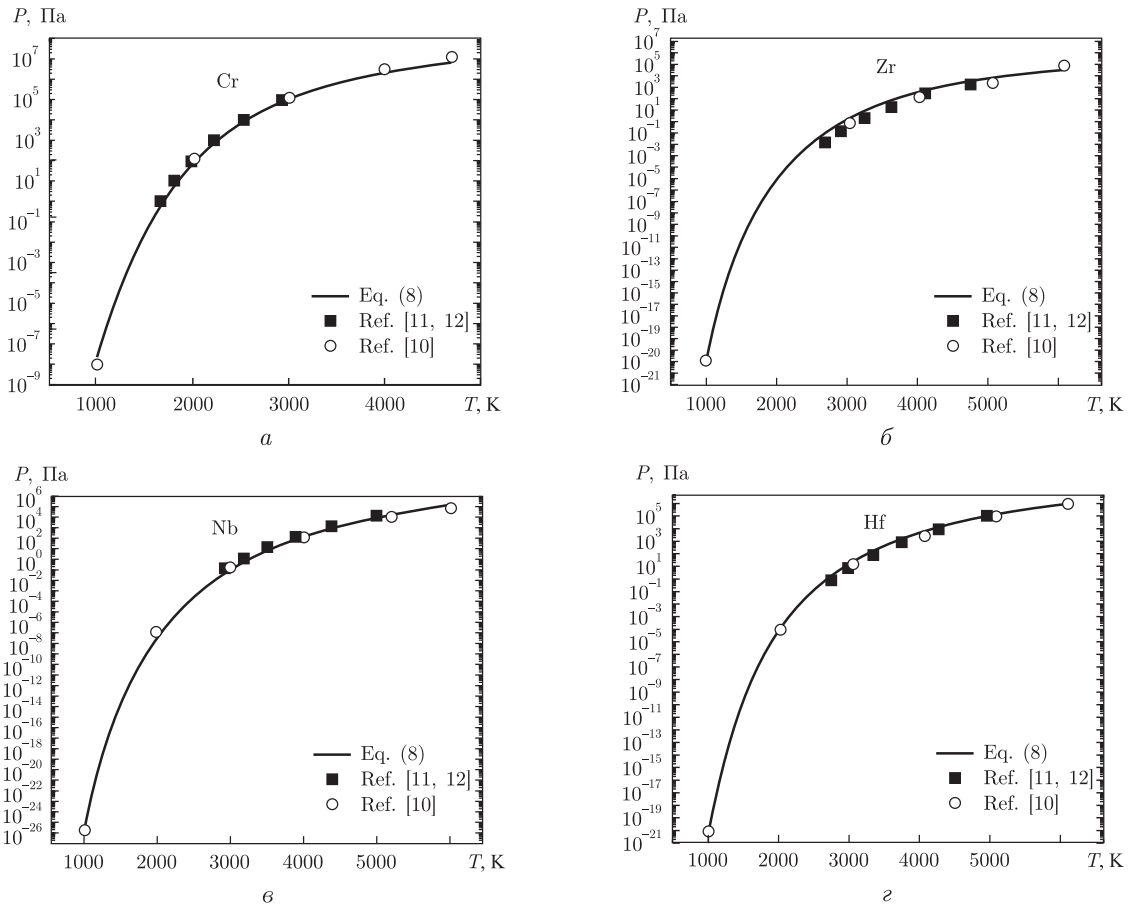


Рис. 1. Тиск насиченої пари деяких елементів, що розрахований за формулою (8), та довідкові дані [10–12]: а... г — відповідно хром, цирконій, ніобій, гафній

Таблиця 1. Розраховані за формулами (8) й (2), а також довідкові дані за температурою кипіння та теплотою випаровування деяких елементів

Елемент	$T_{\text{кип}}$, К [10]	$T_{\text{кип}}$, К (розрахунок за (8))	$H_{\text{субл}}$, кДж/моль [10–12]	$H_{\text{вип}}$, кДж/моль		
				довідкові [10–12]	розрахунок за (8)	розрахунок за (2)
Ti	3560	3568	472	425	424	340
V	3680	3682	515	453	453	378
Cr	2944	2944	397	344	389	230
Zr	4682	4684	605	573	573	430
Nb	5017	5012	733	690	621	535
Mo	4912	4914	659	600	612	483
Hf	4876	4870	640	575	588	483
Ta	5731	5738	782	735	718	555
W	5970	5970	885	800	790	631

Наведений розрахунок слід розглядати як ілюстрацію, яка показує різницю цих двох підходів при описанні кінетики конкретного процесу. Походження та обґрунтування формул (7) й (8) мають більш фундаментальну природу, що повинно проявитися при описанні кінетики інших процесів, пов'язаних з перегрупуванням атомів.

1. *Eyring H.* The Activated Complex in Chemical Reactions // *J. Chem. Phys.* – 1935. – **3**. – P. 107–115.
2. *Evans M. G., Polanyi M.* Some applications of the transition state method to the calculation of reaction velocities, especially in solution // *Trans. Faraday Soc.* – 1935. – **31**. – P. 875.
3. *Эйринг Г., Лин С. Г., Лин С. М.* Основы химической кинетики. – Москва: Мир, 1983. – 528 с.
4. *Laidler K. J., King M. C.* The Development of Transition-State Theory // *J. Phys. Chem.* – 1983. – **87**. – P. 2657–2664.
5. *Truhlar D. G., Garrett B. C., Klippenstein S. J.* Current status of transition-state theory // *Ibid.* – 1996. – **100**. – P. 12771–12800.
6. *Blake T. D., Haunes J. M.* Kinetics of liquid-liquid displacement // *J. Coll. and Interface Sci.* – 1969. – **30**, No 3. – P. 421–423.
7. *Матвеев А. Н.* Атомная физика. – Москва: Оникс: Сер. Мир и образование. 2-е изд, 2007. – 432 с.
8. *Phillips A. C.* Introduction to Quantum Mechanics. – Manchester: Wiley, 2003. – 267 p.
9. *Голант В. Е.* Основы физики плазмы / В. Е. Голант, А. П. Жилинский, С. А. Сахаров. – Москва: Атомиздат, 1977. – 383 с.
10. *Термодинамические свойства индивидуальных веществ:* Справ. в 5 т. / Ред. Л. В. Гурвич, И. В. Вейц, В. А. Медведев. – Москва: Наука, 1978. – 1982.
11. *James A. M., Lord M. P.* Macmillan's Chemical and Physical Data. – London: Macmillan, 1992.
12. *Kaye G. W. C., Laby T. H.* Tables of physical and chemical constants. – 15th ed. – London: Longman, 1993.

*Институт проблем матеріалознавства
ім. І. М. Францевича НАН України, Київ*

Надійшло до редакції 19.04.2012

В. Д. Курочкин

Частотный коэффициент в теории абсолютных скоростей реакций

Рассматривается вопрос о частотном коэффициенте в известной формуле Эйринга–Полани в теории активированного комплекса. Полученная в полуклассическом приближении эта формула для перехода частицы через потенциальный барьер не содержит характеристик барьера (энергии, протяженности), что противоречит современным представлениям. Показано, что последовательное применение принципов квантовой механики приводит к определению этого коэффициента из соотношения неопределенностей Гейзенберга для энергии. Рассмотрено применение предложенной формулы на примере перехода атомов через потенциальный барьер при испарении некоторых элементов в вакууме.

V. D. Kurochkin

Frequency factor in the theory of absolute reaction rates

The problem of transition frequency factor in the known formula by Eyring–Polanyi in transition state theory is discussed. This formula for the transition of a particle through a potential barrier was derived using the semiclassical approach and does not include parameters of the barrier (energy, length), which contradicts the modern conceptions. It is shown that the consistent application of the fundamental principles of quantum mechanics leads to the determination of this factor from Heisenberg's uncertainty principle for energy. The use of the proposed formula is discussed by the example of the transition of atoms through a potential barrier at the evaporation of elements in vacuum.

Л. И. Руденко, В. Е.-И. Хан, О. В. Джужа, В. И. Кашковский,
О. А. Аксеновская, В. И. Пархоменко

Комплексный способ очистки жидких радиоактивных отходов от органических соединений и радионуклидов

(Представлено академиком НАН Украины В. П. Кухарем)

Изучены закономерности очистки жидких радиоактивных отходов (ЖРО) от органических и полимерных веществ и альфа-излучающих радионуклидов. Были использованы: реагентная обработка коагулянтно-флокулянтном типа сизол, каталитическое окисление пероксидом водорода и ультрафильтрация. Предложен актуальный и практически важный для химического цеха ГСП "Чернобыльская АЭС" метод удаления из ЖРО органических и полимерных соединений, плутония, америция, кюрия и урана. Проведены пилотные испытания в химическом цехе ЧАЭС. Определена эффективность разработанного комплексного способа очистки ЖРО.

Проблема обращения с жидкими радиоактивными отходами (ЖРО) весьма актуальна для Чернобыльской АЭС. В соответствии с конвенцией безопасного обращения с радиоактивными отходами на ЧАЭС ведутся работы по оптимизации схемы переработки жидких радиоактивных отходов (ЖРО). По инициативе МАГАТЭ создана пилотная установка, с помощью которой должна быть решена задача предварительной очистки ЖРО от органических полимерных соединений и трансурановых элементов до норм, позволяющих в последующем перерабатывать эти отходы на существующем оборудовании химцеха ЧАЭС или на установках стоящегося завода по переработке жидких радиоактивных отходов. В настоящее время одним из видов ЖРО, подлежащих предварительной очистке, являются трапные воды четвертого блока ЧАЭС, в состав которых входят: полимерное соединение силасинакрилатное связующее, неионогенное поверхностно-активное вещество ОП-7, глицерин, щавелевая, олеиновая и оксиэтилендифосфоновая кислоты, этиловый спирт. В этих водах находятся гамма- и бета-излучатели — цезий и стронций, а также наиболее опасные альфа-излучатели — плутоний, америций, кюрий, уран и другие нуклиды.

В ЖРО концентрация органических соединений составляет 0,4–0,6 г/дм³, а величина бихроматного окисления (ХПК) достигает 2000–3500 мгО₂/дм³. Для последующей переработки ЖРО методом упаривания необходимо снижение содержания в радиоактивных водах количества органических веществ (ХПК ≤ 200 мгО₂/дм³) и объемной активности альфа-излучателей до уровня ≤ 370 Бк/дм³.

В рамках работ по обращению с ЖРО проведен ряд исследований, показавших перспективность применения методов коагуляции, каталитического окисления пероксидом водорода и мембранной технологии для очистки от органических соединений и радионуклидов. Достоинствами метода коагуляции являются: невысокая стоимость очистки; простота используемого оборудования; возможность удаления органических веществ и радионуклидов в ионной и коллоидной фазах; возможность переработки засоленных отходов.

Ранее нами [1, 2] была показана важность очистки ЖРО от органических полимерных веществ и урана при использовании кремнийалюмосодержащих коагулянтно-флокулянтно-

типа “Сизол-2500”. Изучена очистка проб ЖРО из внутренних помещений 001/3 и 012/5 объекта “Укрытие” [2]. Характеристика помещений приведена в статье [2]. Пробы ЖРО с рН 9,0–9,2, ХПК 2100–2500 мгО₂/дм³ и концентрацией урана 12–34 мг/дм³ доводили до рН 6–7, доливая оптимальные добавки “Сизол-2500” (массовое содержание активных веществ 6,5%) 20–30 мл на 1 дм³. При такой обработке ЖРО ХПК уменьшалось до 35–317 мгО₂/дм³ (степень очистки составляла 87–98%), а концентрация урана снижалась до 2,7–9,5 мг/дм³ (степень очистки 72–77%). Важным преимуществом применения сизола было снижение массы сухого остатка (0,300–0,371 г/дм³) и доли сухого остатка (0,030–0,037%).

Эффективность применения каталитического окисления пероксидом водорода и последующей ультрафильтрации для очистки кубовых остатков ЖРО от органических соединений, трансурановых элементов (ТУЭ) и урана, установленная авторами ранее, описана в публикации [3]. Изучение закономерностей реагентной, окислительной и ультрафильтрационной очистки трапных вод от органических соединений, ТУЭ и урана [4] при одновременном уменьшении количества вторичных отходов, предопределили цель авторов настоящего сообщения.

Количество органических соединений определяли методом бихроматной окисляемости (ХПК) [5]. Концентрацию урана устанавливали фотометрическим методом в виде его комплекса с арсеназо III и по интенсивности люминисценции ионов уранила при их возбуждении ультрафиолетовым излучением азотного импульсного лазера. Активность изотопов Рс, ²⁴¹Am и ²⁴⁴Cm находили на α -спектрометрическом комплексе фирмы Canberra.

Первоначально брали пробы ЖРО из внутренних помещений 001/3, 014/2, скважины Ю-9-Б объекта “Укрытие” и обрабатывали коагулянт-флокулянт “Сизол-2500”. Методика такой обработки описана выше. Затем фильтраты проб каталитически окисляли пероксидом водорода. Пробы ЖРО нагревали до температуры 70–80 °С и при перемешивании добавляли сульфат железа (II) FeSO₄ и пероксид водорода (H₂O₂). Мольное соотношение H₂O₂ : органические вещества составляло 1 : 1, а мольное соотношение H₂O₂ (100%) : Fe²⁺ — 50 : 1. Время окисления 60 мин. Влияние обработки ЖРО сизолом и каталитическим окислением пероксидом водорода на величину ХПК демонстрирует табл. 1.

В табл. 2 и 3 приведены характеристики исходных проб 001/3, 014/2 и скв. Ю-9-Б и после их комплексной обработки. Сравнение данных этих таблиц показывает, что совместная

Таблица 1. Характеристика проб ЖРО

Отбор проб ЖРО	ХПК, мгО ₂ /дм ³		
	Исходная проба	Проба после очистки сизолом	Проба после каталитического окисления
Помещение: 001/3	2400	240	40
012/2	7000	510	30
Скважина Ю-9-Б	5200	460	40

Таблица 2. Радионуклидный состав исходных проб ЖРО

Отбор проб ЖРО	Концентрация урана, мг/дм ³	Активность, Бк/дм ³				
		²³⁸⁺²³⁹⁺²⁴⁰ Pu	²⁴¹ Am	²⁴⁴ Cm	¹³⁷ Cs	⁹⁰ Sr
Помещение: 001/3	9,0	3,3 · 10 ³	3,4 · 10 ⁴	1,1 · 10 ³	9,7 · 10 ⁶	1,9 · 10 ⁶
014/2	2,1	2,2 · 10 ³	6,2 · 10 ³	1,8 · 10 ²	2,2 · 10 ⁶	2,9 · 10 ⁵
Скважина Ю-9-Б	180	1,6 · 10 ⁴	5,5 · 10 ⁵	2,0 · 10 ⁴	3,6 · 10 ⁷	3,0 · 10 ⁷

реагентная обработка сизолом, каталитическим окислением и последующая ультрафильтрация вызывают существенное снижение активности альфа-излучателей.

Показано, что предложенный комплексный способ очистки ЖРО приводит к существенному уменьшению содержания трудноудаляемых полимерных и других органических веществ, ТУЭ и урана при существенном снижении количества вторичных отходов.

На завершающем этапе проводили пилотные испытания разработанного способа очистки ЖРО в химическом цеху ГСП “Чернобыльская АЭС”. Определялась эффективность технологий очистки от органических (полимерных) веществ, в том числе от силасинакрилатного связующего (входит в пылеподавляющий состав), а также от ТУЭ и урана.

Пилотная установка включала расходную ($V = 300 \text{ дм}^3$), осадительную ($V = 300 \text{ дм}^3$) и накопительную ($V = 150 \text{ дм}^3$) емкости ЖРО. Емкости пилотной установки соединены с дозирующими и перекачивающим насосами, а также снабжены запорной и регулирующей арматурой для обеспечения дозирования реактивов. Имеются перемешивающие устройства, а также фильтры для напорной, механической и ультрафильтрационной очистки очищаемых сред в разных режимах.

В работе использовались: трапные воды объекта “Укрытие” и трапные воды третьего блока из бака БТВ-3 (образец БТВ-3); трапная вода из приемка 0005 объекта “Укрытие” (образец 0005). Применялись такие реагенты: а) коагулянт-флокулянт “Сизол-2500” (6,5% активного вещества); б) товарные реактивы: пероксид водорода, сульфат железа (II) $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, азотная кислота. Для очистки радиоактивных вод применялись: патронный фильтр с поверхностью фильтрования $0,08 \text{ м}^2$ с мембраной $0,2 \text{ мкм}$; ультрафильтрационная установка с поверхностью фильтрования $0,08 \text{ м}^2$ с мембраной ПС-100 из ароматического полиамида.

В процессе испытаний в трапные воды при перемешивании добавляли водные растворы сизола в количестве 10 дм^3 на 1 м^3 ЖРО. После отстаивания суспензии осветленный раствор фильтровали через патронный фильтр либо использовали ультрафильтрационную установку. Сгущенную суспензию фильтровали через напорный фильтр, заполненный кварцевым песком (фракция $0,25\text{--}1,0 \text{ мм}$). На завершающей стадии проводили комплексную очистку трапных вод, включающую реагентную очистку сизолом (10 дм^3 на 1 м^3 ЖРО) и каталитическое окисление пероксидом водорода при pH 4. Мольные соотношения H_2O_2 : органические вещества составляло $1 : 1$, H_2O_2 : Fe^{2+} — $50 : 1$. Окисление проводили в течение 60 мин. После этого ЖРО фильтровали через мембрану $0,2 \text{ мкм}$.

В исходных трапных водах и после каждой стадии их обработки определяли содержание органических (полимерных) веществ по величине ХПК и активность альфа-излучателей. Результаты пилотных испытаний демонстрирует табл. 4. Показана высокая степень очистки ЖРО от органических веществ, в том числе и от полимерного соединения — силасинакри-

Таблица 3. Радионуклидный состав ЖРО после комплексной обработки

Отбор проб ЖРО	Концентрация урана, мг/дм ³ (степень очистки, %)	Активность, Бк/дм ³ (степень очистки, %)		
		²³⁸⁺²³⁹⁺²⁴⁰ Pu	²⁴¹ Am	²⁴⁴ Cm
Помещение: 001/3	2,8 (68,9)	$1,3 \cdot 10^2$ (96,1)	$1,6 \cdot 10^3$ (95,3)	59 (94,6)
014/2	0,13 (93,8)	94 (95,7)	$3,2 \cdot 10^2$ (94,8)	9,1 (94,9)
Скважина Ю-9-Б	33 (81,7)	37 (99,8)	$2,3 \cdot 10^4$ (95,8)	$8,6 \cdot 10^2$ (95,7)

латного связующего и других трудноудаляемых веществ (ионогенных поверхностно-активных веществ ОП-7, минеральных масел и других соединений). ХПК фильтрата составляет 6–40 мгО₂/дм³ (степень очистки 95,8 – 99,4%). Значительным преимуществом предложенного способа является эффективная очистка от ТУЭ–²³⁸⁺²³⁹⁺²⁴⁰Pu (на 95,7–99,8%), ²⁴¹Am (на 90,5–99,8%), ²⁴⁴Cm (на 94,6–95,7%) при сохранении высокой степени очистки от урана (на 92,1–98,1%).

Для получения из сгущенной суспензии осадка и осветленной жидкости нами опробованы метод фильтрования с применением вспомогательных фильтрующих материалов (ВФМ) [6]. ВФМ являются тонкодисперсными, проницаемыми для жидкости материалами, задерживающими твердые частицы. Для очистки труднофильтруемых суспензий ВФМ предварительно наносят на фильтровальную перегородку, что предотвращает закупоривание ее пор частицами разделяемой суспензии. Перед началом фильтрования в исходную суспензию добавляют ВФМ, что улучшает структуру образующегося осадка и уменьшает его удельное сопротивление. В качестве ВФМ применяются диатомит, перлит, целлюлоза, древесная мука, асбест, а также смеси некоторых из этих материалов. При эмпирическом выборе ВФМ выбирают материал, обладающий максимальным размером пор, определяемый размером и формой его частиц, и обеспечивает получение достаточно чистого фильтрата.

В работах [7, 8] экспериментально показано, что применение товарной древесной муки марок 140 или 180 ГОСТ 16361-87 позволяет существенно увеличить скорость фильтрования и получить фильтрат высокой степени очистки. Осадок после фильтрования, содержащий органические (полимерные) вещества, в том числе и силасинакрилатное связующее и другие трудноудаляемые вещества, нерастворимые соли, оксиды кремния и алюминия, радионуклиды и древесную муку, высушивают при температуре 105 °С, а затем сжигают при температуре более 700 °С. При сжигании этого осадка образуются радиоактивные аэрозоли. Выбросы аэрозолей задерживаются на многослойных фильтрах Петрянова [9]. При сжигании осадка после фильтрования количество золы в граммах из расчета на 1 дм³ ЖРО составляет 0,02 г/дм³, а доля золы осадка – 0,002% [7]. Вместо древесной муки можно использовать целлюлозу фирмы Decalite торговой марки Solka-Floc.

Таблица 4. Комплексная очистка трапных вод на пилотной установке

ЖРО Способ очистки	ХПК, мгО ₂ /дм ³ (степень очистки, %)	Активность, Бк/дм ³ (степень очистки, %)			Концентрация U, мкг/дм ³ (степень очистки, %)
		²³⁸ Pu	²³⁹⁺²⁴⁰ Pu	²⁴¹ Am	
Исходная проба БТВ-3	280	13	27	3,4 · 10³	110
Очищенная проба БТВ-3	80	0,56	1,1	76	52
Способ очистки № 1	(71,4)	(95,7)	(95,9)	(97,8)	(52,7)
Исходная проба 0005	960	180	350	6,3 · 10³	610
Очищенная проба 0005	6–40	0,31–0,89	0,59–1,7	16–110	12–18
Способ очистки № 1	(95,8–99,4)	(99,5–99,8)	(99,5–99,8)	(98,3–99,7)	(97,0–98,0)
Очищенная проба 0005	14	1,1	1,9	6,1 · 10 ²	48
Способ очистки № 2	(98,5)	(99,4)	(99,4)	(90,5)	(92,1)
Очищенная проба 0005	18	0,78	1,5	13	11
Способ очистки № 3	(98,1)	(99,6)	(99,6)	(99,8)	(98,1)

Примечание. Способы очистки: № 1 — очистка сизолом, фильтрование через мембрану 0,2 мкм; № 2 — очистка сизолом, ультрафильтрация через мембрану 0,08 мкм; № 3 — очистка сизолом, каталитическая очистка Н₂О₂, фильтрование через мембрану 0,2 мкм.

Опытным путем была также показана эффективность использования товарного перлита по ГОСТ 30566-98 для фильтрования сгущенной суспензии. Ранее перлит применялся для фильтрования трапных вод ЧАЭС. Существует проблема переработки перлитовых пульп из-за абразивности перлита. Вместе с тем есть информация о переработке смеси перлита, ионообменных смол и осадка кубовых остатков ЖРО на Игналинской АЭС (Литва).

Переработка сгущенной суспензии возможна также методом осаждения в центробежном поле [10].

Таким образом, авторами данного исследования показано, что способ предварительной очистки с использованием коагулянта-флокулянта, каталитического окисления пероксидом водорода и ультрафильтрации, который не имеет аналогов, позволяет устранить возможные нарушения технологического процесса на выпарных аппаратах при последующей переработке ЖРО. Предложенный способ устраняет закоксовывание выпарных аппаратов силасинакрилатным связующим и другими органическими веществами, которые вулканизируются при нагревании; повышает уровень радиационной безопасности ЧАЭС при переработке ЖРО.

1. Пат. 91810 Україна. МПК (2009) С 02 F 1/00, G 21 F 9/04. Спосіб очищення рідких радіоактивних відходів від органічних речовин і урану / Л. І. Руденко, В. Є.-І. Хан, О. А. Гуменна, В. І. Кашковський, О. В. Джужа, В. М. Горбенко, О. В. Зубенко. – № а 2010 00465; Заяв. 18.01.2010; Опубл. 25.08.2010; Бюл. № 16.
2. Руденко Л. И., Хан В. Е.-И., Аксеновская О. А., Кашковский В. И. и др. Реагентная очистка жидких радиоактивных отходов от органических соединений и урана // Доп. НАН України. – 2011. – № 5. – С. 140–143.
3. Корнеев А. А., Криницын А. П., Стрихарь О. Л., Щербин В. Н. Жидкие радиоактивные отходы внутри объекта “Укрытие” // Радиохимия. – 2002. – 44, № 6. – С. 545–552.
4. Руденко Л. И., Джужа О. В., Хан В. Е.-И. Окислительная очистка кубовых остатков жидких радиоактивных отходов от органических веществ и трансурановых элементов // Доп. НАН України. – 2008. – № 5. – С. 151–154.
5. Унифицированные методы анализа вод / Под ред. Ю. Ю. Лурье. – Москва: Химия, 1976. – 375 с.
6. Жужиков В. А. Фильтрование. Теория и практика разделения суспензий. – Москва: Химия, 1980. – 400 с.
7. Пат. на корисну модель 64130. МПК (2011.01) С02F1/00, G21F9/04 (2006.01). Спосіб очищення рідких радіоактивних відходів від органічних речовин і урану / Л. І. Руденко, В. Є.-І. Хан, В. І. Пархоменко, В. І. Кашковський, О. А. Аксеновська, О. В. Джужа. – № у 2011; 05177; Заявл. 26.04.2011; Опубл. 25.10.2011. – Бюл. № 20.
8. Пат. на корисну модель 64131. МПК (2011.01) С02F1/00, G21F9/04 (2006.01). Спосіб очищення рідких радіоактивних відходів від органічних речовин, урану і трансуранових елементів / Л. І. Руденко, В. Є.-І. Хан, В. І. Пархоменко, В. І. Кашковський, О. В. Джужа, О. А. Аксеновська. – № у 2011 05179; Заявл. 26.04.2011; Опубл. 25.10.211; Бюл. № 20.
9. Огородников Б. И., Пазухин Э. М., Ключников А. А. Радиоактивные аэрозоли объекта “Укрытие”: 1986–2006 гг. – Чернобыль: Ин-т пробл. безопасности АЭС НАН Украины, 2008. – 456 с.
10. Соколов В. И. Центрифугирование. – Москва: Химия, 1976. – 408 с.

*Институт биоорганической химии
и нефтехимии НАН Украины, Киев
Институт проблем безопасности атомных
электростанций НАН Украины, Чернобыль*

Поступило в редакцию 03.04.2012

Л. І. Руденко, В. Є.-І. Хан, О. В. Джужа, В. І. Кашковський,
О. А. Аксеновська, В. І. Пархоменко

Комплексний спосіб очищення рідких радіоактивних відходів від органічних сполук і радіонуклідів

Вивчено закономірності очищення рідких радіоактивних відходів (РРВ) від органічних і полімерних речовин та альфа-випромінювальних радіонуклідів. Було використано: реагентну обробку коагулянт-флокулянт-типу сизол, каталітичне окиснення пероксидом водню та ультрафільтрацію. Запропоновано актуальний і практично важливий для хімічного цеху ДСП "Чорнобильська АЕС" метод видалення з РРВ органічних і полімерних сполук, плутонію, америцію, кюрію та урану. Проведені пілотні випробування в хімічному цеху ЧАЕС. Визначена ефективність розробленого комплексного способу очищення РРВ.

L. I. Rudenko, V. E. Khan, O. V. Dzhuzha, V. I. Kashkovsky,
O. A. Aksenovskaya, V. I. Parkhomenko

A complex method for liquid radioactive waste purification from organic compounds and radionuclides

Regularities of liquid radwaste (LRW) purification from organic and polymeric substances and alpha-emitting radionuclides are studied. The reagent processing with a coagulant-flocculant of the sizol type, as well as the catalytic oxidation by hydrogen peroxide and ultrafiltration, is used. An actual practically important method to remove organic and polymeric compounds, plutonium, americium, curium, and uranium was offered for SSE "Chornobyl NPP" chemical department, where pilot tests were carried out. Efficiency of the developed complex procedure for the LRW treatment is determined.

В. В. Співак, І. М. Астрелін, Н. М. Толстопалова, І. В. Атаманюк

Регулювання фізико-хімічних та адсорбційних властивостей українських сапонітів

(Представлено академіком НАН України М. Т. Картелем)

Встановлено принципову можливість використання сапонітового мінералу Ташківського родовища як імпортозамінну сировину для виробництва адсорбентів та іонообмінних матеріалів. Досліджено фізико-хімічні та структурно-адсорбційні характеристики сапоніту, а також їх зміну під впливом кислотного, термічного й ультразвукового активування. Вивчено механізм впливу стабілізуючих агентів на стійкість колоїдної системи сапоніт–вода та доцільність їх використання для підвищення ефективності сорбційного вилучення полутантів різного генезису з водного середовища. Експериментально доведено технологічну ефективність застосування сапоніту для отримання сорбентів багатогалузевого призначення.

Однією з актуальних проблем подальшого розвитку промисловості України є розширення мінерально-сировинної бази з максимально можливим переведенням виробництв на вітчизняну сировину. Зокрема, відкрито багато родовищ такої мінеральної сировини, як бентоніти, каоліни, цеоліти тощо [1]. Проте значна їх частина з різних причин не знайшла промислового застосування через недостатні для промислової розробки запаси, складність гірничо-технічних умов залягання, порівняно невисокий вміст основної породи або низьку якість, обумовлену підвищеним вмістом вільного кварцу та карбонатних включень. Однією з основних причин затримки використання цих глинистих мінералів України є недостатність повноцінних фундаментальних досліджень фізико-хімічних характеристик останніх і, головним чином, методів покращення їх якості та, як наслідок, розширення діапазону їх промислового застосування.

Авторами даного повідомлення було досліджено поклади бентонітових глин Ташківського родовища Хмельницької області, основним компонентом яких є тріоктаедричний смектит — сапоніт. На сьогодні існує ряд методів хімічного і геометричного модифікування поверхні та регулювання пористості мінеральних сорбентів. Незважаючи на те що деякі з цих методів застосовуються до глин вже давно та отримали широке визнання серед технологів, однак у наукових джерелах недостатньо відомостей, які б описували зміни, що відбуваються на поверхні та в об'ємі міжпакетного й внутрішньопорового простору глинистих мінералів сапонітового типу під час процесу активації різними способами.

Методика дослідження. Для того щоб визначити ефективність методів активації та встановити оптимальні технологічні умови їх реалізації, було досліджено хімічну активацію сапонітової глини Ташківського родовища кислотами та лугами. Для цього змінювали параметри процесів активації: час кислотної активації (від 1 до 4 год), концентрацію кислоти (10 й 20%) та комбінації реагентів-активаторів. Масове співвідношення твердої та рідкої фаз підтримували на рівні 1 : 3. Активацію проводили в тефлоновому реакторі при температурі кипіння реакційної суміші та постійному перемішуванні.

Отриманий активований сорбент відділяли на лійці Бюхнера, промивали дистильованою водою, потім висушували при 105 °С впродовж трьох годин. Отриманий висушений по-

рошкоподібний сорбент піддавали також обробці розчинами лугів та основ (NH_4OH , KOH , NaOH , LiOH) при постійному перемішуванні у шейкері 1 год при кімнатній температурі. Після цього адсорбент відфільтровували, промивали і висушували.

У серії дослідних зразків мінерального адсорбенту визначали фізико-хімічні та адсорбційні характеристики.

Рентгенофазовий аналіз зразків здійснювали на рентгенівському дифрактометрі ДРОН-УМ1 з двома щілинами Соллера з фільтрованим CoK_α — випромінюванням при швидкості зйомки 1 град/хв. Точність визначення кількісного складу фаз становила $\pm 5\%$. Мінеральний склад ідентифікували, згідно з картотекою ASTM. Термогравіметричний процес відбувався в температурному інтервалі від 25 до 850 °C зі швидкістю нагрівання 10 град/хв. ІЧ спектроскопічні дослідження зразків проводили на спектрометрі Spekord M80 в області частот 4000–450 cm^{-1} з часом інтегрування 2 с та кроком 10 cm^{-1} . Зразки для аналізу готували методом таблетування з бромідом калію у співвідношенні 1 : 100.

Результати та їх обговорення. В процесі кислотної активації фіксувалася втрата маси вихідного твердого мінералу. Втрати маси, що зумовлені кислотним розчиненням мінералу, залежать значною мірою від активуючого агента та від часу активації. Перший етап активування (1–2 год) пов'язаний, головним чином, з розчиненням вільних оксидів заліза, алюмінію, лужноземельних металів та заміщенням периферійних обмінних катіонів кальцію, магнію, калію в кристалічній ґратці сапоніту на іон гідрогену кислоти.

Друга година активування характеризується незначними змінами маси зразків, оскільки незв'язані компоненти вже розчинились, а руйнування кристалічної ґратки ще не почалось. Наступний етап супроводжується вимиванням алюмінію з октаєдрів кристалічної структури і може тривати до зменшення маси зразка майже до маси оксиду силіцію (IV). У результаті не виключається можливість утворення аморфного кремнегелю.

Другий етап активації (3–4 год) супроводжується глибокими кристалохімічними перетвореннями, пов'язаними з деалюмініванням кристалічної ґратки мінералу, іноді до повного її руйнування.

Отже, можна зробити висновок що, найефективнішим активатором бентонітових глин є хлороводнева кислота, яка володіє високою селективністю як до Fe_2O_3 , так і до Al_2O_3 . Сульфатна і щавлева кислоти менш вибіркові до компонентів глини, тому співвідношення $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Fe}_2\text{O}_3$ з часом активації змінюється мало. Беручи до уваги розчинність оксидів феруму, ефективність кислот спадає в ряді $\text{HCl}-\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4-\text{H}_2\text{SO}_4$, у той час як у випадку з алюмінієм ситуація дещо змінюється: $\text{HCl}-\text{H}_2\text{SO}_4-\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ [2]. Перший етап активування сапоніту супроводжується розчиненням в основному оксидів заліза і алюмінію, присутніх у складі мінералу у вільній формі, що призводить до найбільшої втрати питомої ваги мінералу на першій годині процесу.

Поведінка сапоніту при нагріванні залежить від багатьох факторів. При температурі 850 °C відбувається перехід у енстатит. Температура плавлення мінералу тим нижча, чим вищий в ньому вміст заліза. Термогравіметричні дослідження нативних та активованих зразків показали, що найбільш низькотемпературний ендотермічний ефект при 120–200 °C викликаний видаленням адсорбційної води (рис. 1). Другий ендотермічний ефект при 250–300 °C пов'язаний з обмінними катіонами (з їх переходом в октаєдричні позиції або втратою ними гідратної води). Високотемпературний ендотермічний пік при 760–850 °C зумовлений видаленням конституційної води. Проявлення на термограмі цього процесу ускладнюється дуже вузькими екзотермічними ефектами, викликаними кристалізацією енстатиту.

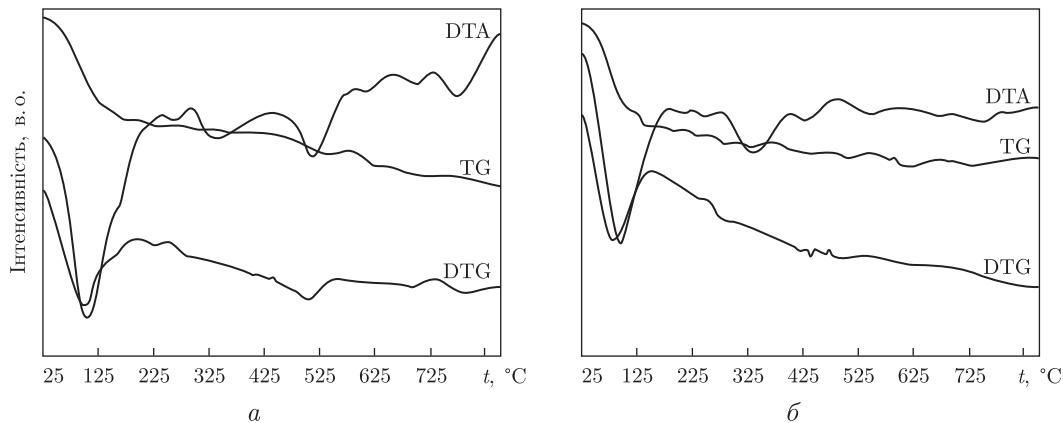


Рис. 1. Дериватограма природного сапоніту (а) та зразка мінералу, активованого хлороводневою кислотою (б)

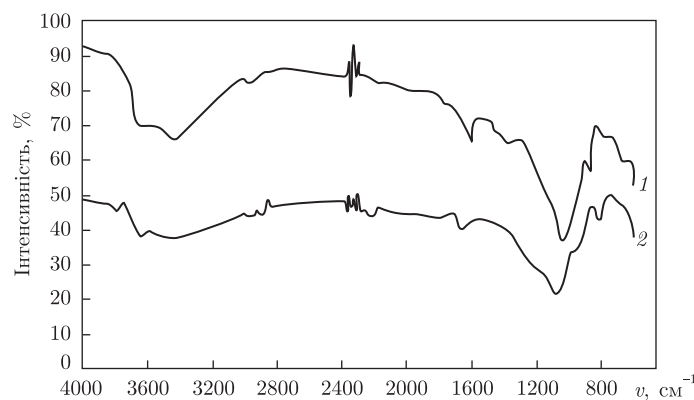


Рис. 2. ІЧ-спектри нативного (1) та активованого хлороводневою кислотою (2) сапоніту

За результатами рентгенофазового аналізу нативні зразки сапоніту мають однаковий якісний склад — кварц, анатаз, кальцит, гематит та глинисті мінерали — сапоніт з рядом базальних рефлексів 001 (1,487 нм), 002 (0,732 нм), 003 (0,483 нм), 004 (0,363 нм), 005 (0,292 нм) та смугами двовимірної дифракції, характерними для турбостратних структур: 0,458 нм; 0,258 нм; 0,153 нм. Крім триоктоедричного смектиту (власне сапоніту), у мінералі виявлено також діоктоедричний смектит (монтморилоніт). Кислотне активування спричинює часткове (у випадку використання сульфатної та щавлевої кислот) або повне (при використанні хлороводневої кислоти) руйнування глиняної фракції.

На ІЧ-спектрах вихідних зразків спостерігаються основні характеристичні смуги поглинання бентонітової породи: валентні (νOH при 3625 cm^{-1}) та деформаційні (δAlAlOH при 915 cm^{-1} та δAlMgOH при 850 cm^{-1}) коливання структурних OH -груп сапоніту. Інтенсивна смуга поглинання в області 1035 cm^{-1} пов'язана з Si-O валентними коливаннями в тетраедричному положенні, а в області 525 cm^{-1} — з відповідними деформаційними коливаннями. Поглинання випромінювання (1630 cm^{-1}) відноситься до деформаційних коливань молекул кристалізаційної води в міжшаровому просторі сапоніту. Кислотне активування призводить до зниження інтенсивності даної смуги поглинання, що підтверджує результати термогравіметричного аналізу і може свідчити про зближення октаедричних й тетраедричних шарів мінералу. Зниження інтенсивності смуги (1035 cm^{-1}) для активованих зразків свідчить про

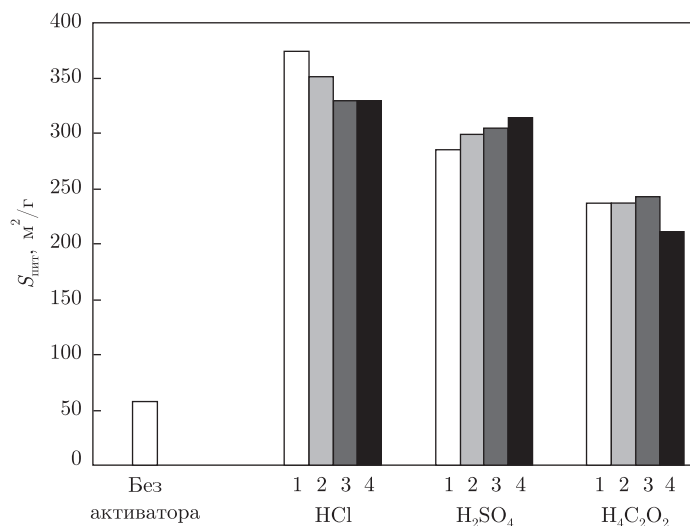


Рис. 3. Зміна площі питомої поверхні сапоніту в результаті кислотного активування: 1...4 — тривалість активування, год

часткове руйнування тетраедрів, проте коливання Si—O присутнє, оскільки в зразках залишається багато кварцу та аморфного кремнегелю. Затухання коливання (3400 см^{-1}) дає підстави припустити, що внаслідок кислотного активування на поверхні мінералу зменшується кількість гідроксидних груп, а більш чітке вираження піку деформаційних коливань δAlMgOH при 850 см^{-1} на спектрах кислотноактивованих зразків свідчить про збільшення гідроксидних груп в алюмомагнієвих октаедрах.

Кислотна активація впливає також на фізичні та фізико-хімічні властивості глин, зокрема на величину питомої поверхні, пористість, теплоту змочування, гідрофільність, електрокінетичні властивості колоїду отриманого сорбенту тощо.

Використовуючи різні кислоти як активатори, можна збільшити питому поверхню сапонітового мінералу в середньому в 4–6 разів (для нативного зразка $S_{\text{пит}} \approx 60\text{ м}^2/\text{г}$). При цьому також спостерігається збільшення середнього радіуса пор (рис. 3). У природному мінералі переважають пори радіусом 2,9–3,0 нм, при активації хлороводновою кислотою їх величина збільшується до 6,2–6,5 нм. При використанні сульфатної та щавлевої кислот збільшення ефективного радіуса пор не таке значне, в середньому в 1,2–1,5 раза.

Електрокінетичні явища, що проходять на межі твердої та рідкої фаз (глина–вода), зумовлені наявністю заряду на поверхні сапоніту. Частинки природного мінералу заряджені негативно і є так званими макроаніонами. Розподіл іонів на поверхні таких частинок обумовлює наявність електрокінетичного потенціалу, відповідного до товщини дифузного шару. Електрокінетичний потенціал ζ у грубому наближенні характеризує товщину гідратної оболонки. Тому можна припустити, що між величинами ζ -потенціалу і кількістю адсорбційно зв'язаної води існує певна залежність. Для встановлення цієї залежності дослідженню підлягали зразки як природної, так і активованої сапонітової глини. Використання розчину гідроксиду літію як стабілізатора збільшує значення електрокінетичного потенціалу в порівнянні з нативними зразками в 7 разів, гідроксиду натрію в 2,6.

Значення електрокінетичного потенціалу та дані седиментаційного аналізу показують, що використання розчинів електролітів як стабілізуючих агентів призводить до пептизації, потовщення подвійних електричних шарів та утворення сольватних оболонок навколо ко-

лоїдних частинок сапоніту. Як наслідок, відбувається самочинне диспергування дисперсної фази в дисперсійному середовищі, колоїдна система набуває агрегативної та седиментаційної стійкості, а також за рахунок адсорбції молекул електроліту на поверхні сапоніту зростає вплив структурно-механічного фактора, який за Ребіндером, є найбільш сильним стабілізуючим фактором і зберігає свою дію протягом тривалого часу.

За даними експериментальних досліджень, ефект, що аналогічний дії розчинів електролітів, на суспензію сапоніту має ультразвукове диспергування. За Іоффе, утворення поверхневих мікротріщин є головною причиною різкого зниження міцності твердих тіл. Усі тверді тіла мають дефекти структури, а мікротріщини утворюються саме в слабких місцях кристалічної ґратки. Через те що процес УЗ-активування проводився в розчині, тому утворені мікротріщини відразу заповнювалися молекулами розчинника, що, в свою чергу, викликає дію розклинювального тиску та сприяє диспергуванню. Одночасно з механічним диспергуванням проходить сольватація новоутворених частинок, які в подальшому протистоять силам адгезії, адже за Деряґіним, сольватні оболонки захищають частинки від злипання завдяки розклинювальному тиску, що виникає між ними.

Після дослідження основних фізико-хімічних властивостей нативного та модифікованого сапонітового мінералу були проведені експерименти для встановлення принципової можливості використання останнього як сорбенту для видалення різних класів поллютантів із забруднених водних систем. Серед поллютантів досліджувалися іони важких та перехідних металів, органічні барвники, низькомолекулярна токсична органіка (фенольні речовини), високомолекулярна органіка ліпідної та протеїнової природи. Адсорбційне очищення проводили в статичному режимі. Доза адсорбенту в середньому становила $(4,5 \pm 0,5)$ г на 1 дм^3 забрудненої води. Як показали результати наших попередніх досліджень [3, 4], значення рН у системі для ефективного проведення процесу необхідно підтримувати на рівні 7 ± 1 . Тривалість процесу очищення в середньому становила 90 хв. Результати експериментального встановлення сорбційної ефективності природного та модифікованого сапоніту підтвердили прогнозовані залежності.

Так, наприклад, для використання сапоніту в технології виробництва вина на стадії освітлення виноградного суслу слід провести кислотне активування природного мінералу хлороводневою кислотою впродовж 1,5 год, промивку та сушку порошкоподібного сорбенту з подальшим відділення фази кварцу. Суспензію рекомендовано готувати, змішуючи сапонітовий порошок з виноматеріалом, та піддавати УЗ-диспергації впродовж 10 хв на частоті випромінювання 44 кГц. Отриманий таким чином адсорбент є гідною альтернативою закордонним адсорбентам, що використовують на даний час більшість виноробних господарств України.

Для очистки стічних вод м'ясопереробних комбінатів та маслосирзаводів, які характеризуються високими показниками хімічного та біологічного споживання кисню (ХСК та БСК), значним вмістом нерозчинних жирів і речовин білкової природи, рекомендуємо використовувати сапонітовий мінерал, що активований сульфатною кислотою впродовж 2 год та стабілізований електролітом (хлоридом або гідроксидом натрію). При дозі такого адсорбенту 5 г на 1 дм^3 очищуваної води та дворазовому очищенні можливо досягнути 90–95%-й ступінь очистки стоків.

Видалення катіонних барвників зі стоків текстильних підприємств найбільш ефективно при застосуванні сапоніту, активованого хлороводневою кислотою та стабілізованого хлоридом феруму та УЗ-обробкою. За таких умов видалення одного з найпоширеніших промислових барвників — активного яскраво-червоного 5СХ — становить 87–90% [5]. При очис-

тці промислових стічних вод, забруднених токсичною органікою, в тому числі фенольними сполуками, найкращі результати показав нативний зразок сапоніту, водна суспензія (Т:Р дорівнює 1 : 3) якого стабілізувалась ультразвуком перед введенням у забруднену воду [6].

Стоки гальванічних цехів електрохімічних виробництв та інші стічні води, що містять важкі та перехідні метали (мідь, нікель, манган, кобальт, хром, цинк, залізо), ефективно очищуються нативним сапонітовим мінералом, при цьому ступінь вилучення поліютанту становить 70–95%. Збільшення даного показника досягається при використанні розчину гідроксиду натрію як модифікуючого та стабілізуючого агента [7, 8].

Дослідження сорбційної здатності сапонітового адсорбенту проводили як на модельних розчинах індивідуальних поліютантів, так і на реальних стічних водах гальванічного цеху, текстильного виробництва, молокопереробного підприємства ЗАТ “Дунаєвецький маслозавод” (Дунаєвці, Хмельницька область), виноробного підприємства ПАТ “Київський завод шампанських вин “Столичний” (Київ) та на виноматеріалі агропромислової фірми “Таврія” (Каховка, Херсонська область).

Таким чином, результати термогравіметричного та рентгенофазового аналізів, ІЧ спектроскопії, визначення питомої поверхні та розміру пор, теплоти змочування та гідрофільності, значення ζ -потенціалу нативних зразків сапоніту та зразків, активованих за різних умов і стабілізованих розчинами електролітів та УЗ-диспергацією, дозволяють зробити висновки, що фізико-хімічні властивості мінералу піддаються регулюванню з наданням йому технологічно ефективних адсорбційних властивостей.

Експериментальними дослідженнями структурно-сорбційних характеристик сапонітового мінералу та його модифікованих зразків доведено, що сапонітовий природний мінерал після активування є технологічно ефективним, екологічно безпечним та економічно доцільним сорбувальним матеріалом, який рекомендується використовувати для виготовлення адсорбентів багатогалузевого призначення як заміну імпортованих реагентів даного технологічного класу.

1. *Сивий М. Я.* Мінеральні ресурси Поділля: конструктивно-географічний аналіз і синтез. – Тернопіль: Підручники і посібники, 2004. – 654 с.
2. *Марцин И. И.* Регулирование адсорбционных свойств дисперсных минералов методом кислотной активации: Автореф. дис. ... канд. хим. наук – Киев, 1983. – 20 с.
3. *Пат.* 64424. Україна, МПК С02F 1/28 (2006.01). Спосіб вилучення органічних поліютантів із водних систем / В. В. Співак, І. М. Астрелін, Н. М. Толстопалова, Н. О. Стельмах. – У 201103753; Заяв. НТУУ “КПІ”; Заявл. 28.03.2011; Опубл. 10.11.2011; Бюл. № 21/2011.
4. *Пат.* 45002. Україна, МПК С02F 1/28; В01J 20/02. Спосіб вилучення іонів металів із забруднених водних систем / В. В. Співак, І. М. Астрелін, Н. М. Толстопалова. – Заяв. НТУУ “КПІ”; Заявл. 30.04.2009; Опубл. 26.10.2009; Бюл. № 10/2009.
5. *Бабчук М. М., Алексеев О. Ф., Астрелін І. М.* Використання сапоніту для очищення стічних вод від барвників // Східно-Європ. журн. передов. технологій. – 2009. – Вип. 5/5(41). – С. 41–44.
6. *Співак В. В., Стельмах Н. О.* Адсорбційне вилучення токсичних поліютантів за допомогою сапоніту у підготовці стічної води до біологічного очищення // Зб. тез доп. XIII Міжнар. наук.-практ. конф. “Екологія. Людина. Суспільство”, 19–23 трав. 2010 р. – Київ: Нац. техн. ун-т України “КПІ”, 2010. – С. 263–264.
7. *Співак В. В.* Очищення промислових стічних від іонів важких металів новим сорбентом – сапонітом: Зб. тез доп. конф. з екології. – Севеодонецьк: Східноукраїнський нац. ун-т ім. В. Даля, 2009. – С. 86.
8. *Співак В. В., Астрелін І. М.* Адсорбція іонів важких металів природними та модифікованими бентанноїдами // Вісн. НТУ “ХПІ”. Тематичн. вип. “Хімія, хімічна технологія і екологія”. – Харків, 2010. – Вип. 11. – С. 117–127.

В. В. Спивак, И. М. Астрелин, Н. М. Толстопалова, И. В. Атаманюк

Регулирование физико-химических и адсорбционных свойств украинских сапонитов

Установлена принципиальная возможность использования сапонитового минерала Ташковскогo месторождения в качестве импортозамещающего сырья в производстве адсорбентов и ионообменных материалов. Исследовано физико-химические и структурно-адсорбционные характеристики сапонита, а также их изменение под влиянием кислотной, термической и ультразвуковой активации. Изучен механизм влияния стабилизирующих агентов на стойкость коллоидных систем сапонит–вода и целесообразность их использования для повышения эффективности сорбционного извлечения поллютантов разного генезиса из водной среды. Экспериментально доказана эффективность использования сапонита для получения сорбентов многоотраслевого назначения.

V. V. Spivak, I. M. Astrelin, N. M. Tolstopalova, I. V. Atamaniuk

Regulation of physico-chemical and adsorption properties of Ukrainian saponites

The possibility of using a saponite mineral from the Tashkivske clay-field as an import substitution of raw materials for the production of adsorbents and ion-exchange materials is established. The physico-chemical, structural, and adsorption characteristics of saponite and their changes under the influence of acid, thermal, and ultrasonic activations are investigated. The stabilization mechanism for the colloidal saponit–water system under the influence of stabilizing agents is studied, and the reasonability of their use in order to increase the efficiency of water purification from different pollutants by absorption is established. Moreover, the efficiency of saponite’s multipurpose use is proved by experiments.



УДК 597.556.31:591.111:612.22

© 2012

А. Ю. Андреева, А. А. Солдатов

Изменения объема ядерных эритроцитов скорпены в условиях внешней гипоксии (эксперименты *in vitro*)

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Г. Е. Шульманом)

В условиях *in vitro* исследовано влияние внешней гипоксии на цитометрические характеристики ядерных эритроцитов *Scorpaena porcus* L. Показано, что при понижении содержания кислорода в концентрационном диапазоне 1,76–8,17 мг О₂/л (температура 14–16 °С) объем клеток уменьшается на 1,5–4,5% ($p < 0,05$). При более глубокой гипоксии (диапазон 0,57–1,76 мг О₂/л) происходят противоположные изменения. Объем клеток красной крови увеличивается на 3–12% ($p < 0,05$). При этом эритроциты приобретают форму удлинённого эллипса, так как увеличение объема клетки происходит преимущественно за счет изменения значений ее продольной оси и толщины ($R^2: 0,51; 0,76$). Обсуждаются механизмы, лежащие в основе отмеченных изменений.

Эритроциты костистых рыб, в отличие от красных клеток крови млекопитающих и человека, обладают развитыми системами переноса органических и неорганических ионов через клеточную мембрану, что позволяет осуществлять адаптивную регуляцию объема клетки [1].

Гипоксия является одним из факторов, индуцирующих изменения объема ядерных эритроцитов. В большинстве работ *in vivo* констатируется факт роста объема клеток красной крови в условиях внешнего дефицита кислорода [2]. Процесс контролируется катехоламинами, взаимодействующими с поверхностными β -адренорецепторами эритроцитов, т. е. контроль осуществляется на системном уровне [3]. Это не позволяет судить о процессах, развивающихся на уровне отдельных клеточных систем. Информация по этому поводу крайне ограничена.

В настоящей работе приведены результаты исследования в условиях *in vitro* влияния гипоксии на цитометрические характеристики ядерных эритроцитов.

Объектом исследования служили эритроциты *Scorpaena porcus* L. Кровь получали из хвостовой артерии. В качестве антикоагулянта применяли гепарин ("Richter", Венгрия). Эритроциты отделяли от плазмы путем центрифугирования при 1000 g в течение 15 мин и трижды отмывали в эквивалентном объеме изотоничной среды: 128 мМ NaCl, 3 мМ KCl, 1,5 мМ CaCl₂, 1,5 мМ MgCl₂, 15 мМ Трис, 2,2 мМ D-глюкозы [4].

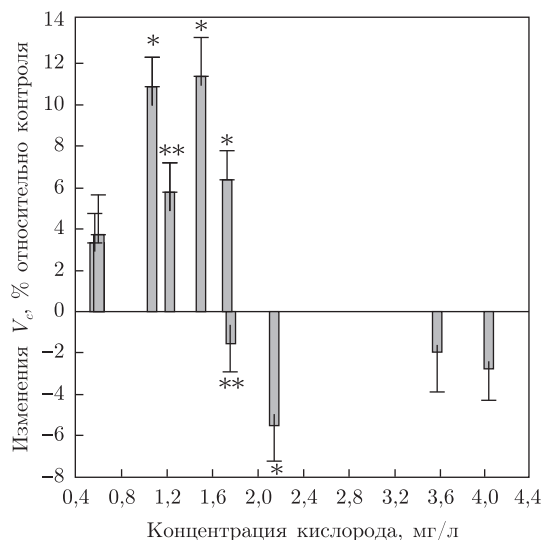


Рис. 1. Изменения объема эритроцитов скорпены в условиях экспериментальной гипоксии (* — $p < 0,05$; ** — $p < 0,02$)

Инкубация эритроцитов в гипоксической среде составляла 4 ч при 14–16 °С. Понижение концентрации кислорода достигалось путем барботажа изотоничного раствора газообразным азотом. Исследовали концентрационный диапазон 0,57–8,17 мг O₂/л. Инкубацию клеток проводили в герметичных вакуумных пробирках “Vacuette” (Greiner Bio-One GmbH).

По окончании экспозиции ядра эритроцитов окрашивались витальным красителем SYBR Green I (Molecular probes), который, связываясь с двухцепочечной нитью ДНК, флюоресцировал зеленым цветом в видимой части спектра.

Эритроциты фотографировали на инвертированном микроскопе для светлого поля и флюоресценции Nikon Eclipse TS100, оборудованном камерой Ikegami ICD-848P. Длину большой и малой осей клеток и их ядер измеряли по цифровым фотографиям в программе ImageJ 1.44r [5]. Объем клетки рассчитывали по уравнению [6] с учетом объема ядра [7]:

$$V_c = 0,7012 \left(\frac{C_1 + C_2}{2} \right)^2 h + \frac{\pi N_1 N_2^2}{6},$$

где C_1 — длина большой оси клетки; C_2 — длина малой оси клетки; h — толщина клетки ($h = 1,8 + 0,0915(C_1 - 7,5)$) [8]; N_1 — длина большой оси ядра; N_2 — длина малой оси ядра.

Количество измерений составляло 100 клеток на одну пробу. Нормальность распределения цифровых массивов проверяли, используя критерий Пирсона. Достоверность отличий оценивали при помощи t -критерия Стьюдента. Результаты представлены в виде $\bar{x} \pm S\bar{x}$.

При понижении концентрации кислорода в инкубационной среде в концентрационном диапазоне 1,76–4,03 мг O₂/л отмечали уменьшение объема эритроцитов на 1,5–4,5% (рис. 1). При 1,76 и 2,14 мг O₂/л различия были статистически выражены (см. рис. 1).

Уменьшение содержания кислорода в инкубационной среде в диапазоне 0,57–1,76 мг O₂/л вызывало прямо противоположную реакцию. Объем клеток красной крови увеличивался на 3–12%. В четырех случаях (при 1,07; 1,23; 1,50; 1,73 мг O₂/л) изменения были статистически значимы (см. рис. 1).

Эритроциты рыб имеют эллипсоидную форму. Объем клеток зависит от изменения их линейных характеристик: C_1 , C_2 , h . Оценка коррелятивных связей показала, что эти вели-

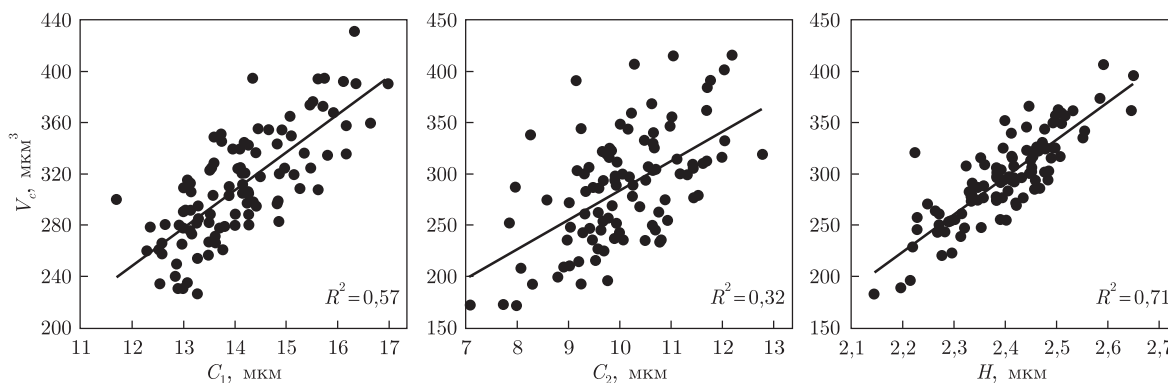


Рис. 2. Коррелятивные связи между линейными и объемными характеристиками ядерных эритроцитов скорпены

чины изменяются независимо друг от друга (R^2 0,003–0,006). Это означает, что каждая из них может вносить свой вклад в изменение объема клеток.

Рост объема клетки происходил преимущественно за счет изменения значений C_1 и h . Об этом свидетельствуют более высокие значения коэффициентов R^2 (0,51; 0,76) в сравнении с C_2 (0,10–0,32) (рис. 2). Это означает, что в условиях гипоксии эритроциты приобретают форму удлинённого эллипса, что подтверждается данными световой микроскопии.

Таким образом, объем эритроцитов скорпены в условиях внешней гипоксии претерпевает ряд последовательных изменений. Вначале (диапазон 1,76–4,03 мг O_2 /л) значения данного показателя снижались, затем существенно возрастали (диапазон 0,57–1,76 мг O_2 /л).

Информация об уменьшении объема клеток красной крови рыб в условиях недостатка кислорода крайне ограничена. Описан случай подобного поведения эритроцитов у скорпены в условиях кратковременной гипоксии (90 мин, эксперимент *in vivo*) [9]. Вместе с тем механизмы, которые могут лежать в основе данного поведения клеток, вполне реальны. Известно, что регуляторное уменьшение объема эритроцитов может происходить благодаря деятельности K^+/Cl^- -котранспорта, а также путем выхода из клетки органических осмолитов [10]. Среди возможных путей активации канала наиболее вероятным представляется незначительное снижение pH внутриклеточной среды (до 7,0), которое может быть следствием активизации анаэробных процессов и увеличения внутриклеточной концентрации лактата [11]. Известно, что ядерные эритроциты низших позвоночных способны при наступлении неблагоприятных условий переходить на анаэробные режимы функционирования [12].

Свеллинг эритроцитов — более распространенная и описанная во многих работах реакция клеток красной крови рыб [13]. Набухание эритроцитов в условиях гипоксии происходит вследствие входа в клетку ионов Na^+ через Na^+/H^+ -антипорт. Наиболее сильным стимулом к активации транспорта являются катехоламины, которые выбрасываются в кровь при снижении концентрации доступного кислорода и вступают во взаимодействие с β -адренорецепторами эритроцитов [14]. Однако в условиях *in vitro* эта последовательность событий исключена. В работе [15] показано, что активность Na^+/H^+ -канала также возрастает при значительном снижении pH цитоплазмы эритроцитов и, как следствие, повышение сродства внутренней стороны мембраны клеток к H^+ . В условиях экстремальной гипоксии это состояние клеток вполне допустимо и объясняет наблюдаемую последовательность событий.

Из рассмотренных выше аргументов следует, что наблюдаемое вначале снижение, а затем увеличение объема эритроцитов скорпены в условиях гипоксии, вероятно, является следствием постепенного понижения величины рН клетки. Вначале оно активирует K^+/Cl^- -котранспорт, а затем Na^+/H^+ -антипорт. Это наиболее вероятный механизм влияния гипоксии, реализуемый в условиях *in vitro*. В условиях *in vivo* активация K^+/Cl^- -канала маловероятна, так как поступление в кровь катехоламинов и активирование β -адренорецепторов эритроцитов практически сразу запускает Na^+/H^+ -обмен на мембране клетки.

Итак, понижение содержания кислорода в инкубационной среде в диапазоне 0,57–8,17 мг O_2 /л вызывало неоднозначную реакцию у ядерных эритроцитов скорпены. Вначале объем клеток снижался (1,76–4,03 мг O_2 /л), а затем существенно возрастал (0,57–1,76 мг O_2 /л). При этом в конце клетки приобретали форму удлиненного эллипса, что было обусловлено возрастанием значений C_1 и h . В основе отмеченных изменений, вероятно, лежит постепенное понижение рН клетки, которое последовательно активирует K^+/Cl^- -котранспорт, а затем Na^+/H^+ -антипорт.

1. *Cossins A. R., Gibson J. S.* Volume-sensitive transport systems and volume homeostasis invertebrate red blood cells // *J. Exp. Biol.* – 1997. – **200**. – P. 343–352.
2. *Wells R. M. G.* Blood-gas transport and hemoglobin function: adaptations for functional and environmental hypoxia // *Fish Physiol.* – 2009. – **27**. – P. 255–299.
3. *Lowe T. E., Brill R. W., Cousins K. L.* Responses of the red blood cells from two high-energy-demand teleosts, yellowfin tuna (*Thunnus albacares*) and skipjack tuna (*Katsuwonus pelamis*) to catecholamines // *J. Comp. Physiol. B.* – 1998. – **168**, No 6. – P. 405–418.
4. *Tiihonen K., Nikinmaa M.* Short communication substrate utilization by carp (*Cyprinus carpio*) erythrocytes // *J. Exp. Biol.* – 1991. – **161**. – P. 509–514.
5. *Girish V., Vijayalakshmi A.* Affordable image analysis using NIH Image/ImageJ // *Indian J. Cancer.* – 2004. – **41**, No 1. – P. 41–47.
6. *Houchin D. N., Munn J. I., Parnell B. L.* A method for the measurement of red cell dimensions and calculation of mean corpuscular volume and surface area // *Blood.* – 1958. – **13**. – P. 1185–1191.
7. *Ташкэ К.* Введение в количественную цитологическую морфологию. – Бухарест: Изд-во Академии Респ. Румынии, 1980. – 291 с.
8. *Чижевский А. Л.* Структурный анализ движущейся крови. – Москва: Изд-во АН СССР, 1959. – 474 с.
9. *Солдатов А. А., Русинова О. С., Трусевич В. В. и др.* Влияние гипоксии на биохимические показатели эритроцитов скорпены // *Укр. биохим. журн.* – 1994. – **66**, № 5. – С. 115–118.
10. *Jensen F. B.* Regulatory volume decrease in carp red blood cells: mechanisms and oxygenation-dependency of volume-activated potassium and amino acid transport // *J. Exp. Biol.* – 1995. – **198**. – P. 155–165.
11. *Adragna N. C., Di Fulvio M., Lauf P. K.* Regulation of K–Cl cotransport: from function to genes // *J. Membrane Biol.* – 2004. – **201**. – P. 109–137.
12. *Walsh P. J., Wood C. M., Thomas S., Perry S. F.* Characterization of red blood cell metabolism in rainbow trout // *J. Exp. Biol.* – 1990. – **154**. – P. 475–489.
13. *Jensen F. B., Weber R. E.* Kinetics of the acclimational responses of tench to combined hypoxia and hypercapnia // *J. Comp. Physiol. B.* – 1989. – **156**, No 2. – P. 197–203.
14. *Borgese F., Garcia-Romeu F., Motais R.* Control of cell volume and ion transport by β -adrenergic catecholamines in erythrocytes of rainbow trout, *Salmo gairdneri* // *J. Physiol.* – 1987. – **382**. – P. 123–144.
15. *Motais R., Borgese F., Fievet B. et al.* Regulation of Na^+/H^+ exchange and pH in erythrocytes of fish // *Comp. Biochem. Physiol.* – 1992. – **102a**, No 4. – P. 597–602.

О. Ю. Андреева, О. О. Солдатов

Зміни об'єму ядерних еритроцитів скорпени в умовах зовнішньої гіпоксії (експерименти *in vitro*)

В умовах in vitro досліджено вплив зовнішньої гіпоксії на цитометричні характеристики ядерних еритроцитів Scorpaena porcus L. Показано, що при зниженні вмісту кисню в концентраційному діапазоні 1,76–8,17 мг О₂/л (температура 14–16 °С) об'єм клітин зменшується на 1,5–4,5% (p < 0,05). При глибшій гіпоксії (діапазон 0,57–1,76 мг О₂/л) відбуваються протилежні зміни. Об'єм клітин червоної крові збільшується на 3–12% (p < 0,05). При цьому еритроцити набувають форми подовженого еліпса, тому що зростання об'єму клітини відбувається переважно за рахунок зміни значень її поздовжньої осі і товщини (R²: 0,51; 0,76). Обговорюються механізми, що лежать в основі зазначених змін.

O. Y. Andriieva, A. A. Soldatov

Changes in volume of scorpaena erythrocytes during outer hypoxia (*in vitro* experiments)

The influence of outer hypoxia on the cytometric parameters of Scorpaena porcus L. red blood cells is studied in vitro. It has been shown that a reduction of the oxygen content in a concentration range of 1.76–1.17 mg O₂/l (T = 14–16 °C) led to a decrease in the cell volume by 1.5–4.5% (p < 0.05). In case of deeper hypoxia (range of concentrations 0.57–1.76 mg O₂/l), the opposite changes are observed. Erythrocytes volume increases by 3–12% (p < 0.05). The shape of red blood cells changed to an extended ellipse, as the cell volume growth was caused by changes in the longitudinal axis and the width of erythrocytes (R²:0.51; 0.76). The mechanisms of observed changes are discussed.

В. В. Анистратенко, Ю. С. Рябцева, З. В. Цегельник

Репродуктивные характеристики моллюсков рода *Viviparus* (Gastropoda: Viviparidae) в зимний период на примере украинских популяций

(Представлено академиком НАН Украины В. И. Монченко)

Анатомическое изучение половозрелых самок Viviparus viviparus и V. sphaeridius из трех популяций в Украине в период ноябрь–март 2010/2011 гг. показало наличие у них эмбрионов во все зимние месяцы. Этот факт трактуется нами как первое прямое свидетельство о круглогодичном (без зимней диапаузы) вынашивании молоди у моллюсков рода Viviparus. Присутствие эмбрионов на разных стадиях развития, а также динамика размеров их раковины позволяют предположить, что рост и развитие молоди зимой не прекращается. Отмечена некоторая разница между количеством и размерно-возрастными характеристиками молоди у двух изученных видов живородок.

Сезонная динамика репродуктивной активности и особенности онтогенетических характеристик моллюсков рода *Viviparus* Montfort, 1810 изучаются давно и весьма продуктивно. Накоплены детальные сведения о продолжительности жизни живородок, количестве эмбрионов, вынашиваемых самками, их размерах, активности отрождения молоди и т. п. ([1–9] и др.).

В значительной мере этот интерес связан с тем, что представители семейства Viviparidae — практически космополитные животные и в бентосе континентальных водоемов различного типа играют зачастую ключевую роль. Знание биологии этих пресноводных моллюсков крайне важно для решения целого ряда прикладных задач рыбного хозяйства, акклиматизации и т. п. (см. [4] и др.).

Также решение вопросов видовой самостоятельности видов рода *Viviparus* требует привлечения дополнительных морфологических признаков или, например, онтогенетических характеристик [10–12]. Перспективными в этом отношении могут оказаться данные по размножению живородок в разные сезоны года. Сопоставление динамики количественных и качественных характеристик, возможно, позволит уловить специфику раннего онтогенеза каждого вида и более четко отличать близкие виды живородок, особенно при их совместном обитании.

Между тем, насколько можно судить по литературным данным, до сих пор остается совершенно не изученной биология размножения живородок в зимние месяцы. Во всяком случае, нам не удалось найти публикаций, где, помимо более или менее вероятных предположений, приведены сведения о наличии эмбрионов у зимующих самок *Viviparus* и хотя бы их самые общие характеристики. В итоге складывается представление, что цикл размножения в зимние месяцы у живородок “выключается” и моллюски пассивно перезимовывают без каких-либо репродуктивных усилий с тем, чтобы лишь с наступлением весны перейти к стадии бурного производства молоди.

В настоящем сообщении обсуждаются данные прямых наблюдений в зимние месяцы за динамикой количества и размеров эмбрионов у моллюсков двух видов рода *Viviparus* из трех популяций в Украине: *V. viviparus* (Linnaeus, 1758) и *V. sphaeridius* (Bourguignat, 1880). Всего за период с ноября 2010 г. по март 2011 г. собрано и вскрыто 154 половозрелые самки, собранные в р. Южный Буг (с. Баловное, Николаевская обл., 47°02'59.9" N, 31°52'29.3" E) и р. Буча (пос. Лесная Буча, Киевская обл., 50°32'33.5" N, 30°14'46.2" E). Мы регистрировали количество эмбрионов, отмечали стадию их зрелости и измеряли раковинки с точностью 0,01 мм; всего промерено 1331 эмбрион. Для сравнения данных из двух названных стационаров использованы материалы разовых проб из Кременчугского водохранилища (сборы за ноябрь и декабрь 2011 г.).

Известно, что переход молоди к самостоятельному существованию, сроки наступления половозрелости и способности выметывать эмбрионы у моллюсков рода *Viviparus* разделены определенными промежутками времени (см. [1]). Также не совпадают у живородок сроки созревания половой системы самцов и самок ([5, 6] и др.).

По нашим данным, формирование всех отделов половой системы у живородок украинских популяций полностью завершается при достижении примерно 4,5 оборотов и высоты раковины 16,5–17,0 мм. Именно такие размеры характерны для самых молодых моллюсков, имеющих в выводковых путях сформированные эмбрионы. Правда, количество таких моллюсков во всех исследованных популяциях в течение всего года невелико, число эмбрионов у них незначительно и высота раковинки последних не превышает 1,2–1,3 мм при 1–1,25 оборотах. Эти размерные характеристики практически не отличаются у обоих обсуждаемых видов живородок.

Важное биологическое свойство всех живородок состоит в том, что моллюски самого мелкого размерного класса не способны сразу же продуцировать молодь. Вынашивание первых эмбрионов, готовых к выходу из материнского организма, занимает время (от наступления половозрелости), за которое раковина материнской особи вырастает еще примерно на 0,5 оборота и достигает высоты около 22 мм. Так что готовая к выходу молодь у обоих видов имеет раковину не менее 3,25 оборота и высоту 4 мм [5, 6, 12].

Из табл. 1, показывающей количество молоди в материнских особях в интервале ноябрь–март, видно, что во все без исключения месяцы в половых путях самок живородок имеется достаточно большой набор эмбрионов. Важно отметить наличие у них молоди всех размерно-возрастных классов, характерных для видов рода *Viviparus*. Среди них есть молодые моллюски со вполне сформированной раковинкой от 3,0 вплоть до 3,5 оборотов, без остатков белковой оболочки и, по сути, готовые к выходу в воду. Количество этой молоди колеблется по месяцам, но в изученных местообитаниях составляет обычно около 15–20% от общего количества эмбрионов. Примерно такую же часть составляют “пакеты”, т. е. эмбрионы на ранних стадиях развития (до 2 оборотов раковинки). Доля среднеразмерных эмбрионов, имеющих раковинку от 2,25 до 2,75 оборотов, составляет 50–75% и даже более от общего количества молоди в течение всех месяцев зимних наблюдений (см. табл. 1).

Известный интерес представляет сравнение данных по двум изученным видам в отдельности. К сожалению, ограниченный во времени года материал не позволяет отметить четких трендов в динамике количества и размерно-возрастных характеристик молоди *V. viviparus* и *V. sphaeridius*, но известная специфика этих показателей все-таки существует (см. табл. 1).

Также важно отметить, что живородки из трех исследованных популяций совпадают в основных репродуктивных свойствах, однако заметно различаются в конкретных коли-

Таблица 1. Количественный и размерно-возрастной состав молоди *V. viviparus* и *V. sphaeridius* из рек Южный Буг и Буча

Дата сбора	<i>Viviparus viviparus</i>								<i>Viviparus sphaeridius</i>							
	N	Количество эмбрионов на одну самку	Возрастные классы эмбрионов						N	Количество эмбрионов на одну самку	Возрастные классы эмбрионов					
			I размерный класс (до 2 оборотов)		II размерный класс (2,25–2,75 оборота)		III размерный класс (3 оборота и более)				I размерный класс (до 2 оборотов)		II размерный класс (2,25–2,75 оборота)		III размерный класс (3 оборота и более)	
			n	%	n	%	n	%			n	%	n	%	n	%
		min-max (среднее)								min-max (среднее)						
р. Южный Буг																
07.11.2010	9	5–13 (8,44)	4	5,33	56	74,67	15	20	7	0–16 (5,71)	6	14,34	24	58,54	11	26,83
10.12.2010	9	2–21 (14)	23	18,25	78	61,90	25	19,84	9	4–26 (12,67)	25	21,93	62	54,38	27	23,68
18.01.2011	9	5–24 (13,22)	23	19,16	62	51,67	35	29,16	5	1–16 (6,8)	1	2,94	14	41,18	19	55,88
17.02.2011	2	9–10 (9,5)	5	26,32	10	52,63	5	21,05	2	0–20 (10)	2	10	18	90		0
30.03.2011	13	0–20 (8,31)	17	15,89	72	67,29	18	16,82	5	0–15 (9)	11	24,44	30	66,67	4	8,88
р. Буча																
20.11.2010	5	0–9 (6)	15	50	10	33,33	5	16,67	4	0–5 (1,25)	0		4	80	1	20
11.12.2010	9	0–8 (1)	1	11,11	8	88,89	0	0								
29.01.2011	7	0–21 (4)	7	25	20	71,43	1	3,57	6	0–19 (5,17)	11	35,48	18	58,06	2	6,45
27.02.2011	14	0–15 (4,43)	13	20,97	42	67,74	7	16,67	3	0–9 (3)			7	87,51	1	12,5
31.03.2011	8	0–21 (7,25)	16	27,59	35	60,34	7	12,07	2	0						

чественных их характеристиках. Так, моллюски из Кременчугского водохранилища имеют молодь синхронных стадий при несколько меньших размерах материнских особей. Кроме того, среди молодежи в этой популяции доминируют представители одного размерного класса (не двух, как в других популяциях), причем в ноябре — среднего, а в декабре — третьего, т. е. самые крупные, практически готовые к рождению.

Наблюдения в период ноябрь–март показывают, что плодовитость (т. е. суммарное количество вынашиваемой молодежи) у обоих обсуждаемых видов *V. viviparus* и *V. sphaeridius* с увеличением размеров раковины материнской особи постепенно возрастает. При этом количество молодежи не остается постоянным и сильно варьирует (см. табл. 1), что соответствует наблюдениям в другие сезоны [4, 5, 9] (также наши неопубликованные данные).

На наш взгляд, особый интерес для оценки динамики онтогенеза (размеров и количества эмбрионов) в течение зимних месяцев имеет такой показатель, как количество молодежи синхронных стадий развития. Мы классифицировали молодь со сформированной раковинкой на три размерные группы (см. табл. 1), изменения в которых по месяцам наблюдений принимаются за отражение процессов роста эмбрионов. Видно, что в зимние месяцы (от декабря к февралю) соотношение количества эмбрионов разных возрастных классов заметно меняется. Вероятно, это означает, что в зимний период происходит подрожждение молодежи, т. е. ее выход в воду. Косвенным свидетельством служит наличие в изученных популяциях во все зимние месяцы особей с высотой раковины 4,25 и 4,5 оборота, т. е. сравнительно недавно перешедших к самостоятельному существованию. К сожалению, более молодые моллюски в выборках за декабрь–февраль нами не зарегистрированы и прямых доказательств их рождения зимой пока нет. Правда, следует отметить, что облов площади в зимующих популяциях был небольшой и, возможно, только что родившиеся особи просто не попали в пробы.

Таким образом, итоги наблюдений за состоянием репродуктивной активности живородок в зимние месяцы убеждают в наличии у них значительного количества молодежи всех размерно-возрастных классов. Это первые прямые доказательства круглогодичного (без зимней диапаузы) вынашивания молодежи у моллюсков рода *Viviparus*.

Известно, что у *Viviparus* молодь из половых путей материнской особи выходит в воду постепенно, с достижением соответствующих размерно-возрастных характеристик. Зимняя динамика численности молодежи на синхронных стадиях развития рассматривается нами как возможное свидетельство роста и порционного рождения молодежи и, следовательно, доказательство круглогодичного цикла размножения. Однако, происходит ли пополнение популяций живородок молодежью в зимние месяцы, пока сказать уверенно нельзя. Для этого потребуются сравнительный анализ сопоставимых данных по всем остальным сегментам жизненного цикла живородок.

Авторы выражают благодарность Н. Н. Барцевской (Институт зоологии НАН Украины, Киев) и Е. В. Дегтяренко (НУБиП Украины, Киев) за содействие при сборе моллюсков в зимние месяцы 2010/2011 гг.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы совместных проектов НАН Украины и РФФИ, грант № 08-04-12 (У).

1. Березкина Г. В., Аракелова Е. С. Жизненные циклы и рост некоторых гребнежаберных моллюсков (Gastropoda: Pectinibranchia) в водоемах европейской части России // Тр. Зоол. ин-та РАН. – 2010. – 314. – № 1. – С. 80–92.

2. Жадін В. И. Исследования по экологии и изменчивости *Vivipara fasciata* Müll. – Монографии Волжской биологической станции. – № 3. – Саратов, 1928. – 94 с.
3. Левина О. В. Биотопическое распределение и возрастная структура речной живородки в Киевском водохранилище // Моллюски. Систематика, экология и закономерности распространения. VII Всесоюз. совещ. по изучению моллюсков: Автореф. докл. – Ленинград: Наука, 1983. – С. 200–201.
4. Мирошниченко А. З. Плодовитость пресноводного моллюска *Viviparus viviparus* L. // Зоол. журн. – 1958. – **37**, вып. 11. – С. 1635–1644.
5. Павлюченкова О. В. Физиология размножения и жизненные циклы моллюсков семейства Viviparidae (Gastropoda Pectinibranchia) // Сб. докл. по материалам II науч. конф. “Чтения памяти проф. В. В. Станчинского”. – Смоленск: Смоленск. гос. педагогич. ун-т, 1995. – С. 175–178.
6. Павлюченкова О. В. Морфо-функциональный и кариологический анализ моллюсков надсемейства Viviparoidea (Gastropoda, Pectinibranchia) фауны России и сопредельных территорий: Автореф. дис. ... канд. биол. наук / ЗИН РАН. – Ст.-Петербург, 1997. – 19 с.
7. Bernardi R. de, Ravera O., Oregioni B. Demographic structure and biometric characteristics of *Viviparus ater* Cristofori and Jan (Gastropoda: Prosobranchia) from Lake Alserio (Northern Italy) // J. Molluscan Studies. – 1976. – **42**, No 3. – P. 310–318.
8. Calow P. The relationship between fecundity, phenology and longevity: a systems approach // Amer. Natur. – 1973. – **107**. – No 956. – P. 559–574.
9. Jakubik B. Reproductive pattern of *Viviparus viviparus* (Linnaeus 1758) (Gastropoda, Viviparidae) from littoral aggregations in a through-flow reservoir (Central Poland) // Polish J. Ecol. – 2006. – **54**, No 1. – P. 39–55.
10. Bandel K. Morphologie und Bildung der frühontogenetischen Gehäuse bei conchiferen Mollusken // Facies (Erlangen). – 1982. – **7**. – S. 1–198.
11. Riedel F. Early ontogenetic shell formation in some freshwater gastropods and taxonomic implications of the protoconch // Limnologia. – 1993. – **23**. – P. 349–368.
12. Рябцева Ю. С., Аністратенко О. Ю., Аністратенко В. В. Морфологія ембріональної черепашки та мінливість телеоконха черевонігих молюсків роду *Viviparus* фауни України // Наук. зап. Терноп. нац. пед. ун-ту. Сер. Біол. – 2010. – № 2(43). – С. 430–434.

Институт зоологии им. И. И. Шмальгаузена
НАН Украины, Киев
Черкасский национальный университет
им. Богдана Хмельницкого

Поступило в редакцию 29.02.2012

В. В. Аністратенко, Ю. С. Рябцева, З. В. Цегельник

Репродуктивні характеристики моллюсків роду *Viviparus* (Gastropoda: Viviparidae) в зимовий період на прикладі українських популяцій

Анатомічне вивчення статевозрілих самок *Viviparus viviparus* та *V. sphaeridius* з трьох популяцій в Україні в період листопад–березень 2010/2011 рр. продемонструвало наявність у них ембріонів в усі зимові місяці. Цей факт трактується нами як перше пряме свідчення про цілорічне (без зимової діапаузи) виношування молоді у моллюсків роду *Viviparus*. Наявність ембріонів на різних стадіях розвитку, а також динаміка розмірів їхньої черепашки дозволяють припустити, що ріст та розвиток молоді взимку не припиняється. Виявлено певну різницю між кількістю та розмірно-віковими характеристиками молоді у двох вивчених видів живородок.

V. V. Anistratenko, Yu. S. Ryabceva, Z. V. Tsehelnik

Reproductive characteristics of *Viviparus* (Gastropoda: Viviparidae) in winter time exemplified on the Ukrainian populations

*Anatomical study of mature females of *Viviparus viviparus* and *V. sphaeridius* from three populations in Ukraine during November–March of 2010/2011 reveals that they had the embryos all over winter time. This is treated here as a first direct evidence of the all-year brooding period without a winter break in *Viviparus* snails. The presence of embryos at different stages of development, as well as their shell size dynamics, suggests that the youth is still growing and developing in winter time. Some differences on the quantitative and age-size characteristics between the youth of two species studied are discovered.*

О. А. Федоренко, С. М. Марченко

Потенціалзалежність активності внутрішньоклітинних іонних каналів нейронів — новий механізм регуляції кальцієвого сигналу

(Представлено академіком НАН України І. С. Магурою)

В основі внутрішньоклітинних Ca^{2+} сигналів лежать локальні короткі вивільнення кальцію з ендоплазматичного ретикулула. Досліджено вплив зміни мембранного потенціалу на активність інозитол-1,4,5-трифосфатних рецепторів (IP_3Rs) і катіонних каналів великої провідності. З використанням ізольованих ядер нейронів Пуркін'є мозочка та пірамідних нейронів ділянки CA1 гіпокампа як моделі ендоплазматичного ретикулула цих клітин показано, що активність IP_3Rs та катіонних каналів великої провідності, які є основними типами іонних каналів у ядерних мембранах обох типів клітин, потенціалзалежна. Ці канали активуються позитивними потенціалами та блокуються негативними потенціалами у люмені ядерної оболонки. Таке блокування IP_3Rs запобігає подальшому вивільненню Ca^{2+} . Ми вважаємо, що ці два типи іонних каналів беруть участь у регуляції Ca^{2+} сигналу.

Ca^{2+} — важливий вторинний посередник, який регулює численні клітинні процеси [1, 2]. У внутрішньоклітинній регуляції концентрації Ca^{2+} велике значення відіграють інозитол-1,4,5-трифосфатні рецептори (IP_3Rs), які необхідні для вивільнення Ca^{2+} з клітинних депо [3, 4]. Порушення IP_3Rs -опосередкованої кальцієвої сигналізації спостерігаються при хворобах Альцгеймера [5] і Хантінгтона [6]. У разі апоптотичних змін білки IP_3Rs “розрізаються” каспазою-3, що призводить до неконтрольованого вивільнення Ca^{2+} з кальцієвих депо [7]. Шури з нокаутом гена $\text{IP}_3\text{R1}$ є маложиттєздатними: якщо такі тварини і виживають, то страждають на серйозні неврологічні розлади [8]. Очевидно, що вивчення функціональних властивостей IP_3R є дуже актуальним та перспективним напрямом досліджень.

З літературних джерел відомо, що внутрішньоклітинні кальцієві сигнали складаються з елементарних подій: так званих бліпів (blip), якщо спрацьовує один IP_3R , або пафів (puff), при одночасному відкритті групи близько розташованих IP_3Rs [9, 10]. Механізми активації IP_3Rs їх агоністами (IP_3 та Ca^{2+}) добре досліджені, проте механізми термінації кальцієвого сигналу залишаються не до кінця з'ясованими. Є декілька гіпотез щодо припинення вивільнення Ca^{2+} з внутрішньоклітинних депо. По-перше, блокування руху Ca^{2+} може відбуватися внаслідок зменшення електрохімічного градієнта для нього за рахунок спустошення кальцієвого депо. По-друге, є припущення, що інгібування IP_3Rs відбувається завдяки підвищенню концентрації Ca^{2+} біля зовнішньої частини рецептора, де, як вважають, знаходиться його інгібуючий центр [4]. Ми не відкидаємо можливість того, що ці явища дійсно мають місце у регуляції кальцієвого сигналу. Крім того, у даній роботі на підставі результатів дослідження впливу зміни мембранного потенціалу на активність IP_3Rs і катіонних каналів великої провідності ми зробили припущення про ще один можливий механізм термінації вивільнення Ca^{2+} .

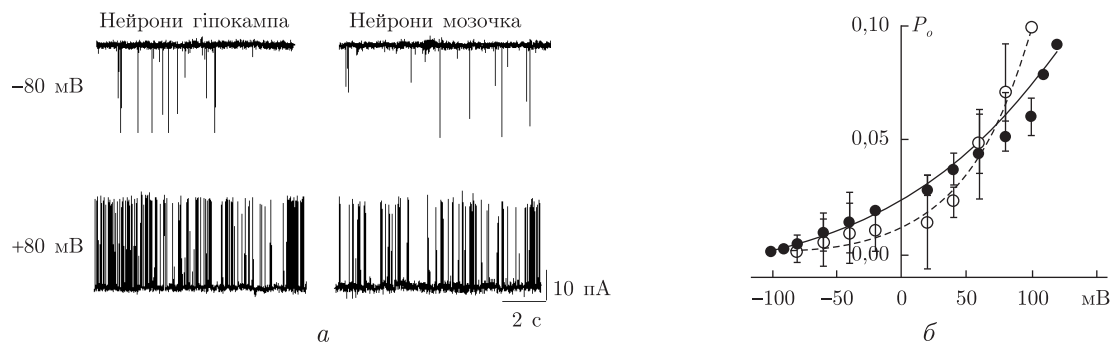


Рис. 1. Залежність активності IP_3Rs від потенціалу: оригінальні записи активності каналів (а) та залежність вірогідності відкритого стану (P_o) IP_3Rs ядерної оболонки нейронів Пуркінє (1) та пірамідних нейронів (2) від мембранного потенціалу (б)

В експериментах ми використовували описані раніше [11, 12] методи ізоляції ядер нейронів та петч-клемп у конфігурації “nucleus-attached” або “excised patches” у режимі фіксації потенціалу.

З наших попередніх робіт відомо, що IP_3Rs ядерної оболонки нейронів Пуркінє мозочка та пірамідних нейронів ділянки СА1 гіпокампа знаходяться лише на внутрішній мембрані [11–13]. IP_3Rs ядерної оболонки нейронів цих двох типів мали однакові провідність, селективність, характер роботи та кінетику активації, тому можна стверджувати, що в обох випадках ми мали справу з одним і тим самим типом іонних каналів, а саме з IP_3Rs I типу [4].

У своїх попередніх дослідженнях на мембранах ядерної оболонки пірамідних нейронів ділянки СА1 гіпокампа [12, 13] ми помітили, що вірогідність відкритого стану IP_3Rs (P_o) залежить від потенціалу. Зокрема, на позитивних потенціалах активність каналів була значно вищою, а на негативних вона значно зменшувалася. Цілковито ідентичну картину ми спостерігали й у випадку IP_3Rs нейронів Пуркінє (рис. 1, а). Зменшення P_o було зумовлено як зміною частоти спрацьовувань каналу, так і тривалістю його відкритого стану. Характер потенціалзалежності роботи IP_3Rs обох типів нейронів був однаковий (див. рис. 1, б), проте для каналів пірамідних нейронів він був більш виражений. На потенціалах ≤ -80 мВ IP_3Rs гіпокампа повністю, але зворотно блокувалися, чого не спостерігалося у випадку з нейронами Пуркінє.

Крім IP_3Rs на внутрішній мембрані ядерної оболонки пірамідних нейронів ділянки СА1 гіпокампа і нейронів Пуркінє мозочка у великій кількості були виявлені іонні канали, селективні до моновалентних катіонів з провідністю близько 200 пСм [14]. Катіонні канали, які були зареєстровані на внутрішній ядерній мембрані нейронів Пуркінє мозочка та пірамідних нейронів ділянки СА1 гіпокампа, мали подібні основні біофізичні властивості [11, 14].

Досі відсутні наочні результати дослідження функцій катіонних каналів великої провідності, але ми припускаємо, що вони необхідні для регуляції тривалості активності IP_3Rs . Струм одновалентних катіонів, який спрямований в протилежний бік від струму іонів Ca^{2+} при вивільненні з депо, перешкоджає дуже різкому зниженню потенціалу в люмені і таким чином збільшує тривалість кальцієвого сигналу.

У наших дослідках ми помітили, що катіонні канали великої провідності у більшості випадків знаходяться поруч з IP_3Rs і можна спостерігати роботу цих двох типів іонних

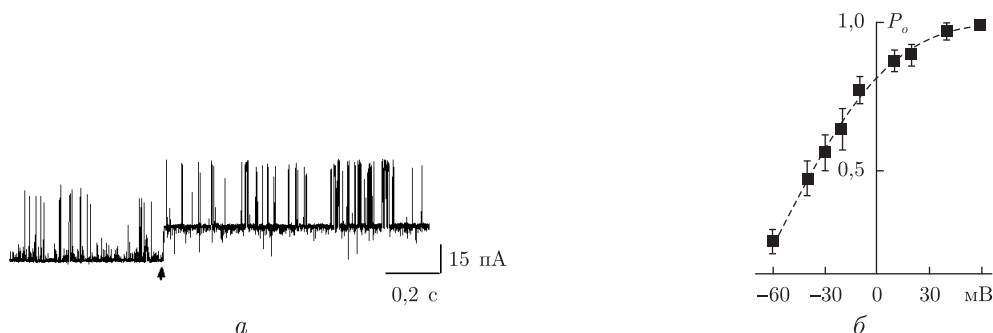


Рис. 2. Активність IP_3 -рецептора та катіонного каналу великої провідності у внутрішній ядерній мембрані пірамідних нейронів CA1 ділянки гіпокампа при потенціалі +60 мВ у симетричному розчині KCl (стрілка вказує на відкриття катіонного каналу) (а) та залежність вірогідності відкритого стану (P_o) катіонного каналу великої провідності ядерної оболонки нейронів Пуркінє від мембранного потенціалу (б)

каналів одночасно (рис. 2, а). Крім того, активність катіонних каналів також залежала від потенціалу і на негативних його значеннях вона істотно зменшувалась (див. рис. 2, б). Ці канали були майже весь час відкритими ($P_o > 0,8$) при позитивних потенціалах. У випадку негативних значень потенціалу, а саме ≤ -40 мВ для нейронів ділянки CA1 гіпокампа та ≤ -60 мВ для нейронів Пуркінє мозочка, ці канали повністю та зворотно блокувались.

Отже, проведені дослідження показали, що катіонні канали великої провідності та IP_3Rs , які були зареєстровані у внутрішній мембрані ядерних оболонок нейронів Пуркінє мозочка та пірамідних нейронів ділянки CA1 гіпокампа, мають чітку потенціалзалежність ідентичного характеру. При негативних потенціалах активність обох типів каналів істотно зменшується. Цей факт, а також колокалізація іонних каналів даних двох типів дають підставу вважати, що катіонні канали великої провідності та IP_3Rs можуть мати спільну функцію, а саме — вивільнення Ca^{2+} з ядерної оболонки.

Ми припускаємо, що потенціалзалежне інгібування IP_3Rs може бути одним з механізмів обмеження тривалості Ca^{2+} сигналу в ядрі. Вивільнення Ca^{2+} із внутрішньоклітинних депо, наприклад ядерної оболонки, спряжене з перенесенням великого електричного заряду крізь її мембрану та спричиняє появу негативного потенціалу в перинуклеарному просторі. Як показали наші дослідження, при негативних потенціалах активність катіонних каналів великої провідності у внутрішній мембрані ядер пірамідних нейронів гіпокампа та нейронів Пуркінє мозочка значно зменшується, і вони поступово інгібуються.

Блокування негативним потенціалом струму K^+ призводить до ще більшого зниження потенціалу в перинуклеарному просторі. При досягненні значних негативних значень мембранного потенціалу починається зниження активності з поступовим повним блокуванням IP_3Rs і припиняється вивільнення Ca^{2+} з депо.

Таким чином, можна припустити, що IP_3Rs та малоселективні катіонні канали великої провідності утворюють мінімальну систему для функціонування ядерної оболонки як кальцієвого депо та відіграють важливу роль у регуляції тривалості Ca^{2+} сигналу всередині ядра.

Робота виконана за фінансової підтримки ДФФД, грант F46.2/001.

1. Berridge M. J., Bootman M. D., Roderick H. L. Calcium signalling: dynamics, homeostasis and remodeling // Nature Rev. Mol. Cell Biol. – 2003. – 4. – P. 517–529.

2. Clapham D. E. Calcium signalling // Cell. – 2007. – **131**. – P. 1047–1058.
3. Iino M. Identification of new functions of Ca²⁺ release from intracellular stores in central nervous system // Biochem. Biophys. Res. Commun. – 2008. – **369**. – P. 220–224.
4. Bezprozvanny I. The inositol 1,4,5-trisphosphate receptors // Cell Calcium. – 2005. – **38**. – P. 261–272.
5. LaFerla F. M. Calcium dyshomeostasis and intracellular signaling in Alzheimer's disease // Nat. Rev. Neurosci. – 2002. – **3**. – P. 862–872.
6. Bezprozvanny I., Hayden M. R. Deranged neuronal calcium signaling and Huntington disease // Biochem. Biophys. Res. Commun. – 2004. – **322**. – P. 1310–1317.
7. Assefa Z., Bultynck G., Szlufcik K. et al. Caspase-3-induced truncation of type 1 inositol trisphosphate receptor accelerates apoptotic cell death and induces inositol trisphosphate-independent calcium release during apoptosis // J. Biol. Chem. – 2004. – **279**. – P. 43227–43236.
8. Kume S. Role of the inositol 1,4,5-trisphosphate receptor in early embryonic development // Cell Mol. Life Sci. – 1999. – **56**, No 3/4. – P. 296–304.
9. Bootman M. D., Lipp P., Berridge M. J. The organization and functions of local Ca²⁺ signals // J. Cell Sci. – 2001. – **114**. – P. 2213–2222.
10. Berridge M. J. Elementary and global aspects of calcium signaling // J. Exp. Biol. – 1997. – **200**. – P. 315–319.
11. Marchenko S. M., Yarotsky V. V., Kovalenko T. N. et al. Spontaneously active and InsP₃-activated ion channels in cell nuclei from rat cerebellar Purkinje and granule neurones // J. Physiol. – 2005. – **15**, No 565. – P. 897–910.
12. Fedorenko O. A., Duzhy D. E., Marchenko S. M. Calcium channels in the nuclear envelope of pyramidal neurons of the hippocampus // Neurophysiology. – 2008. – **40**, No 4. – P. 238–242.
13. Fedorenko O. A., Duzhy D. E., Marchenko S. M. Ca²⁺ channels in the nuclear membrane of hippocampal pyramidal neurons // Acta Physiol. – 2006. – **186**. – P. 183.
14. Fedorenko O. A., Marchenko S. M. Spontaneously Active Ion Channels of the Nuclear Envelope Membrane // Intern. J. Physiol. & Pathophysiol. – 2011. – **2**, No 2. – P. 183–195.

Інститут фізіології ім. О. О. Богомольця
 НАН України, Київ
 Державна ключова лабораторія молекулярної
 та клітинної біології, Київ

Надійшло до редакції 13.02.2012

Е. А. Федоренко, С. М. Марченко

Потенциалозависимость активности внутриклеточных ионных каналов нейронов — новый механизм регуляции кальциевого сигнала

В основе внутриклеточных Ca²⁺ сигналов лежат локальные короткие выделения кальция из эндоплазматического ретикулума. Исследовано влияние изменения мембранного потенциала на активность инозитол-1,4,5-трифосфатных рецепторов (IP₃Rs) и катионных каналов большой проводимости. С использованием изолированных ядер нейронов Пуркинье мозжечка и пирамидных нейронов области CA1 гиппокампа как модели эндоплазматического ретикулума этих клеток показано, что активность IP₃Rs и катионных каналов большой проводимости, которые являются основными типами ионных каналов в ядерных мембранах обоих типов клеток, потенциалозависима. Эти каналы активируются позитивными потенциалами и блокируются негативными потенциалами в люмене ядерной оболочки. Такое блокирование IP₃Rs предотвращает дальнейшее выделение Ca²⁺. Мы считаем, что эти два типа ионных каналов принимают участие в регуляции Ca²⁺ сигнала.

O. A. Fedorenko, S. M. Marchenko

**The voltage-dependence of the intracellular ion channels of neurons —
a new mechanism of Ca²⁺ signal regulation**

Intracellular IP₃-activated Ca²⁺ signals consist of local short releases of Ca²⁺ from endoplasmic reticulum. The mechanism of activation of these events is well studied, but much less is known about ways of its inactivation. We used the nuclear envelopes isolated from Purkinje neurons of cerebellum and pyramidal neurons from area CA1 of hippocampus as a model of the endoplasmic reticulum of these cells. Our data demonstrate that the activity of IP₃-activated Ca²⁺ and large conductance cationic channels, which are the major types of ion channels in the nuclear membrane of both types of cells, is voltage-dependent. These ion channels are activated by positive potentials and inhibited by negative potentials in the nuclear envelope lumen. This voltage-dependent inhibition of IP₃ receptors prevents any further Ca²⁺ release. We suggest that these two types of ion channels take part in the regulation of Ca²⁺ signals.

І. В. Харчук, В. К. Рибальченко, О. Андрухов

Вплив АТФ-конкурентних інгібіторів тирозинкіназ похідних малеїміду і дигідропіролу на життєздатність та апоптоз клітин ротової порожнини

(Представлено членом-кореспондентом НАН України М. Ю. Євтушенком)

Для АТФ-конкурентних інгібіторів тирозинкіназ похідного малеїміду MI-1 та похідного дигідропіролу Д-1 встановлена здатність пригнічувати життєздатність первинних фібробластів періодонтальної зв'язки та альвеолярних остеобластів людини. Апоптоз є основною формою загибелі клітин під дією обох сполук. Д-1 є більш цитотоксичним, ніж MI-1, щодо клітин обох ліній, що вказує на можливість порушень процесів регенерації кісткової та сполучної тканини ротової порожнини після його застосування. Незначна токсичність сполуки MI-1 свідчить про перспективність її подальших досліджень.

Рак уражає людей усіх вікових груп і є причиною смерті близько 7 млн чоловік щорічно в світі [1]. Завдяки змінам у генетичному апараті злоякісні клітини здатні до постійної проліферації і міграції в суміжні тканини, що є рушійною силою росту пухлин і їх метастазування. Однією з основних стратегій у протипухлинній терапії залишається пригнічення проліферативної активності злоякісних клітин [2]. Проте більшість протипухлинних засобів, крім злоякісних клітин, уражують також швидкопроліферуючі клітини організму. Саме тому хіміотерапія завжди асоційована з численними побічними ефектами.

Загальним ускладненням протипухлинної терапії є запальні процеси та погіршення репараційної здатності сполучної і кісткової тканини ротової порожнини внаслідок цитотоксичності препаратів [3] та підвищеної вразливості клітин і тканин до дії мікробного агенту [4]. Тому велика увага у пошуку нових ліків приділяється селективним хіміотерапевтичним засобам. АТФ-конкурентні інгібітори тирозинкіназ похідне малеїміду 1-(4-СІ-бензил)-3-СІ-4-(СF₃-феніламіно)-1Н-пірол-2,5-діон (MI-1) і похідне дигідропіролу 1,4-заміщений 5-аміно-1,2-дигідропірол-3-он (Д-1) виявляють незначну токсичність порівняно з іншими цитостатиками щодо епітелію кишечника [5, 6], нирок [7], печінки [8] та ін.

Наша мета — дослідження впливу MI-1 та Д-1 на життєздатність і клітинну загибель нормальних фібробластів періодонтальної зв'язки (PDL) та альвеолярних остеобластів (АОВ) для встановлення ймовірності ускладнень з боку ротової порожнини при їх застосуванні.

У дослідженнях використані первинні культури нормальних клітин PDL та АОВ, що були ізольовані із здорових пацієнтів при видаленні зубів (пацієнти були інформовані перед хірургічним втручанням, давали письмову згоду, що узгоджено з етичним комітетом Віденського медичного університету, протокол № 400/2004).

PDL є унікальними клітинами сполучної тканини, які, подібно фібробластам, синтезують позаклітинний матрикс [9], і одночасно, подібно остеобластам, беруть участь у відновленні та ремоделюванні сусідньої кісткової тканини [10]. АОВ відіграють важливу роль

у репаративній регенерації кісткової тканини [11, 12]. Обидва типи клітин були культивовані в середовищі DMEM (Dulbecco's modified Eagle medium) з додаванням 10% ембріональної бичачої сироватки (FBS), стрептоміцину і пеніциліну при 37 °С в атмосфері, що містить 5% CO₂. Усі експерименти здійснювали на 3–6 пасажі.

Визначення життєздатності клітин проводили за допомогою колориметричного методу з використанням 3,4,5-диметилтіазол-2-іл-2,5-дифеніл-тетразоліум бромід (МТТ)-тесту, в основі якого лежить здатність мітохондрій живих клітин відновлювати тетразолієву сіль МТТ до МТТ-формаану [13]. Клітини були культивовані в 500 мл DMEM з 10% FBS зі щільністю $2 \cdot 10^4$ на лунку в 24-лункових планшетах. Після 24 год середовище в експериментальних лунках було замінено на відповідне з 1% FBS та МІ-1 і Д-1 у концентраціях 1 та 10 мкмоль/л (контрольні лунки не містили досліджуваних речовин). Кожна група клітин складалась із 6 окремих проб. Після 4 і 24 год культивування життєдіяльність клітин оцінювали за допомогою МТТ-тесту, який проводили згідно з інструкцією виробника (Sigma, США). Клітини, які не піддавали впливу сполук, були взяті за контроль. Значення оптичної густини (od) при різних концентраціях були нормалізовані із середнім значенням контролю (= 1). Дані представлені як $M \pm SD$, де M — середнє значення трьох незалежних експериментів, SD — стандартне відхилення. Після підтвердження нормального розподілу всіх даних за допомогою тесту Колмогорова–Смірнова статистично значуща різниця між дослідними групами і контролем була проаналізована з використанням t -критерію Стьюдента. Аналіз даних проведений з використанням статистичної програми SPSS 14.0 (SPSS Inc, США). Різниця між дослідними групами і контролем вважалась статистично значущою при $P < 0,05$.

Вивчення шляхів клітинної загибелі здійснювали після фарбування клітин специфічними антитілами з флуоресцентною міткою до анексину V, що зв'язується з фосфатидилсерином на клітинній поверхні, та після фарбування пропідіум йодидом, який є маркером мертвих клітин. Транслокація фосфатидилсерину з цитоплазматичного моношару плазматичної мембрани на зовнішній є однією з найбільш ранніх подій апоптозу. Клітини розсіювали в 6-лункові планшети в кількості $0,7 \cdot 10^6$ на лунку в 3 мл середовища без сироватки. Дослідження апоптозу клітин проводили після 24 год впливу речовин у раніше встановлених концентраціях за допомогою проточної цитометрії (FACS Calibur, Becton Dickinson, США) з використанням CellQuest Software (BD Biosciences), що застосовується для встановлення процентного співвідношення апоптотичних і некротичних клітин. Результати представлені розподілом на чотири популяції (у % від загальної кількості клітин): живі клітини; клітини на ранній стадії апоптозу; клітини, що загинули шляхом апоптозу; клітини, що загинули шляхом некрозу.

За результатами МТТ-тесту для клітин PDL характерний відносно високий ступінь виживання під дією МІ-1: при концентрації 1 мкмоль/л за умови 4-годинного впливу він становить 90%, за умови 24-годинного впливу — 75%; при концентрації 10 мкмоль/л кількість життєздатних клітин дещо нижча — 75% при 4 год і 40% при 24 год (рис. 1, а). Сполука Д-1 пригнічує життєздатність клітин лінії PDL як за 4-годинного, так і за 24-годинного впливу без чіткої залежності від дози — виживання клітин становить 37–27% за обох термінів впливу (див. рис. 1, б).

Клітини АОВ виявились чутливішими до дії МІ-1 протягом 4 год: при концентрації 1 мкмоль/л виживання клітин становить 65%, а при 10 мкмоль/л — 38%. Після 24-годинного впливу виживання клітин під дією МІ-1 в обох концентраціях становить 32 і 25% відповідно (рис. 2, а). Д-1 пригнічує проліферацію і життєздатність клітин лінії АОВ за обох термінів

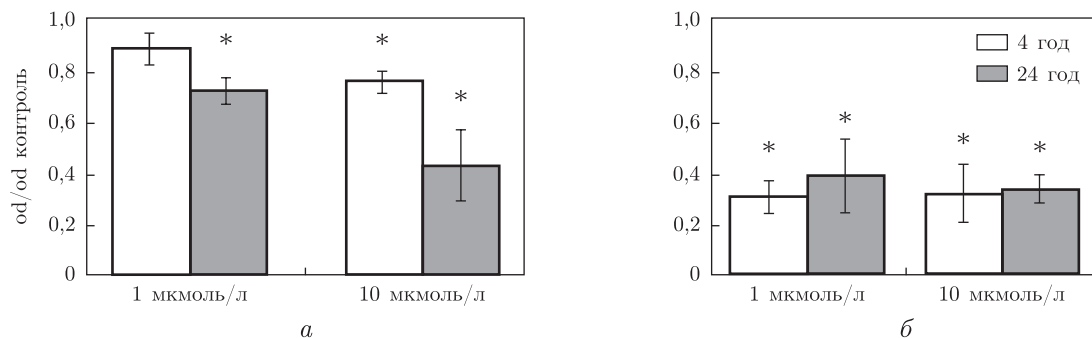


Рис. 1. Ефект MI-1 (а) та D-1 (б) на життєздатність клітин первинної лінії PDL після 4 та 24 год впливу, визначений за допомогою МТТ-тесту. * — $P < 0,05$ по відношенню до контролю

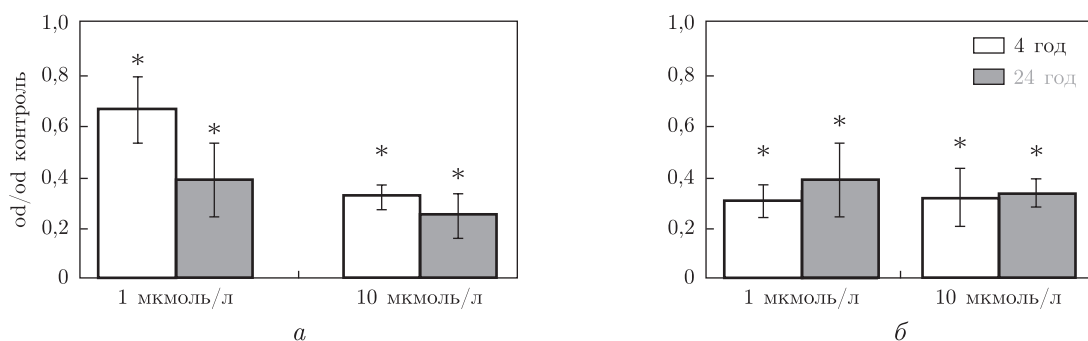


Рис. 2. Ефект MI-1 (а) та D-1 (б) на життєздатність клітин первинної лінії АОВ після 4 та 24 год впливу, визначений за допомогою МТТ-тесту. * — $P < 0,05$ по відношенню до контролю

впливу, так само, як це має місце для лінії PDL. Вживання клітин становить 33–30% (див. рис. 2, б). Отже, сполука MI-1 є значно менш цитотоксичною порівняно з D-1 для нормальних фіброblastів та остеобlastів, присутніх у ротовій порожнині.

Дослідження шляхів клітинної загибелі клітин обох ліній також показало, що для первинної культури клітин PDL сполука D-1 в концентрації 1 мкмоль/л є більш токсичною, ніж MI-1, оскільки кількість життєздатних клітин при дії D-1 становить лише 8%, а при дії MI-1 — близько 30% (рис. 3). Однак кількість клітин у ранній стадії апоптозу і некротичних клітин приблизно однакова для обох сполук при даній концентрації. Стосовно загиблих клітин, що пройшли стадію апоптозу, то їх більше при дії D-1. За умов дії речовин у більшій концентрації кількість живих клітин і у ранньому апоптозі близька для обох речовин. При дії MI-1 кількість клітин, що загинули шляхом некрозу і апоптозу, дещо більша порівняно з такою при дії MI-1 у попередній концентрації і D-1 у цій же концентрації. Для D-1 ці показники залишились близькими до таких при його дії у попередній концентрації. Тобто сполука D-1 пригнічує життєздатність PDL-клітини більшою мірою, ніж MI-1.

АОВ на відміну від PDL за даними тесту на апоптоз виявляють більшу стійкість до дії MI-1: при обох досліджуваних концентраціях співвідношення клітин не відрізняється істотно від контролю, де частка живих клітин становить 85–90%. D-1 спричиняє зменшення кількості життєздатних клітин до 36% при 1 мкмоль/л та 20% при 10 мкмоль/л і збільшення загиблих клітин шляхом апоптозу з 8% у контролі до 50 та 66% при дії речовини у відповідних концентраціях. Крім того, кількість клітин в ранній стадії апоптозу зростає

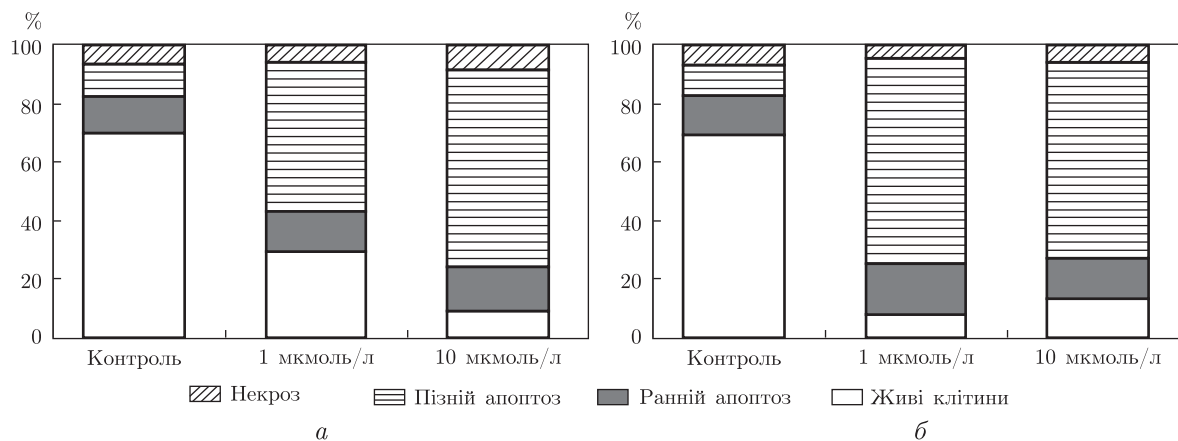


Рис. 3. Співвідношення живих клітин, клітин на ранній стадії апоптозу, загиблих шляхом апоптозу і некрозу первинної лінії PDL після впливу MI-1 (а) та D-1 (б) протягом 24 год

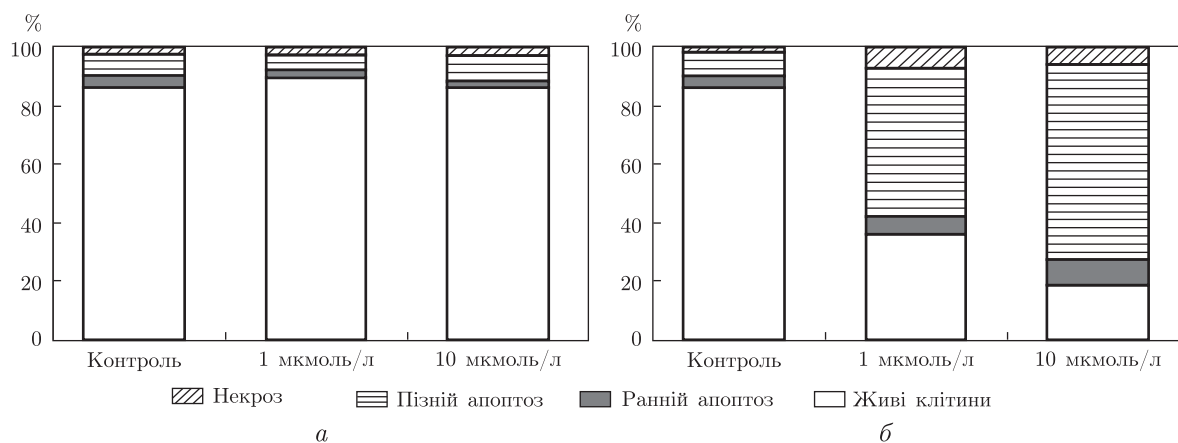


Рис. 4. Співвідношення живих клітин, клітин на ранній стадії апоптозу, загиблих шляхом апоптозу і некрозу первинної лінії АОВ після впливу MI-1 (а) та D-1 (б) протягом 24 год

приблизно в 2 рази, а кількість некротизованих клітин — у 3 рази порівняно з контролем при дії D-1 в обох концентраціях (рис. 4).

Таким чином, апоптоз є основною формою загибелі клітин під дією обох сполук. D-1 є більш токсичним, ніж MI-1, щодо PDL та АОВ, що вказує на можливість порушень процесів регенерації і ремоделювання кісткової та сполучної тканини ротової порожнини після застосування даної сполуки. Незначна токсичність сполуки MI-1 свідчить про перспективність подальших її досліджень.

Робота виконана спільно з підрозділом ортодонтології Стоматологічної школи ім. Бернарда Готліба Віденського медичного університету в рамках програми з наукового співробітництва між Україною і Республікою Австрія на 2011–2012 рр. та є фрагментом НДР “Молекулярні механізми протипухлинної активності нового похідного малеїміду”.

1. Wu H.-Ch., Chang D.-K., Huang Ch.-T. Targeted Therapy for Cancer // J. Cancer Mol. – 2006. – 2, No 2. – P. 57–66.
2. Hirsch J. An anniversary for cancer chemotherapy // JAMA. – 2006. – 296. – P. 1518–1520.

3. *Watters A. L., Epstein J. B., Agulnik M.* Oral complications of targeted cancer therapies: A narrative literature review // *Oral Oncol.* – 2011. – **47**. – P. 441–448.
4. *Raber-Durlacher J., Epstein J., Raber J. et al.* Periodontal infection in cancer patients treated with high-dose chemotherapy // *Support Care Cancer.* – 2002. – **10**. – P. 466–473.
5. *Кузнецова Г. М., Островська Г. В., Рыбальченко В. К.* Порівняння впливу цитостатичних сполук похідного дигідропіролу і 5-фторурацилу на слизову оболонку кишечника щурів // *Соврем. проблемы токсикологии.* – 2011. – № 1–2. – С. 47–51.
6. *Линчак О. В., Харчук І. В., Карнезо Н. О., Островська Г. В., Рыбальченко В. К.* Морфо-функціональний стан органів шлунково-кишкового тракту після впливу похідного малеїміду МІ-1 протягом місяця // *Там же.* – 2011. – № 1–2(52). – С. 52–55.
7. *Харчук І. В., Карнезо Н. О., Островська Г. В та ін.* Особливості морфофункціонального стану нирок під впливом різних доз та тривалості дії потенційного цитостатика похідного малеїміду 1-(4-СІ-бензил)-3-СІ-4-(СF₃-феніламіно)-1Н-пірол-2,5-діону // *Доп. НАН України.* – 2009. – № 10. – С. 185–188.
8. *Яблонська С. В., Філінська О. М., Островська Г. В., Рыбальченко В. К.* Оцінка гепатотоксичності нового похідного малеїміду з цитостатичною активністю і його вплив на перекисне окислення та антиоксидантну систему печінки // *Укр. біохім. журн.* – 2009. – **81**, № 3. – С. 83–92.
9. *Beertsen W., McCulloch C. A., Sodek J.* The periodontal ligament: a unique, multifunctional connective tissue // *Periodontology, 2000.* – 1997. – **13**. – P. 20–40.
10. *Shimono M., Ishikawa T., Ishikawa H. et al.* Regulatory mechanisms of periodontal regeneration // *Microsc. Res. Tech.* – 2003. – **60**. – P. 491–502.
11. *Qu Z., Laky M., Rausch-Fan X.* Effect of Emdogain on proliferation and migration of different periodontal tissue-associated cells // *Oral. Surg. Oral. Med. Oral. Pathol. Oral. Radi.* – 2010. – **109**, No 6. – P. 924 – 931.
12. *Zhang Yu., Schedle A., Matejka M., Rausch-Fan X., Andrukhov O.* The proliferation and differentiation of osteoblasts in co-culture with human umbilical vein endothelial cells: An improved analysis using fluorescence-activated cell sorting // *Cell. Mol. Biol. Lett.* – 2010. – **15**, No 4. – P. 517–529.
13. *Mosmann T.* Rapid colorimetric assay for cellular growth and survival: application to proliferation and cytotoxicity assays // *J. Immunol. Meth.* – 1983. – **65**. – P. 55–63.

ННЦ “Інститут біології”
 Київського національного університету
 ім. Тараса Шевченка
 Віденський медичний університет, Австрія

Надійшло до редакції 29.02.2012

И. В. Харчук, В. К. Рыбальченко, О. Андрухов

Влияние АТФ-конкурентных ингибиторов тирозинкиназ производных малеимида и дигидропирола на жизнеспособность и апоптоз клеток ротовой полости

Для АТФ-конкурентных ингибиторов тирозинкиназ производного малеимида МІ-1 и производного дигидропирола Д-1 установлена способность угнетать жизнеспособность первичных фибробластов периодонтальной связки и альвеолярных остеобластов человека. Апоптоз является основной формой клеточной смерти под влиянием обох соединений. Д-1 более цитотоксичный, чем МІ-1, по отношению к клеткам обеих линий, что указывает на возможность нарушений процессов регенерации костной и соединительной тканей ротовой полости после его применения. Незначительная токсичность соединения МІ-1 свидетельствует о перспективности его дальнейших исследований.

I. V. Kharchuk, V. K. Rybalchenko, O. Andrukhov

The effects of ATP-competitive tyrosine kinase inhibitors, maleimide and dihydropyrrol derivatives, on viability and apoptosis of oral cavity cells

The capacity to decrease the viability of primary human periodontal ligament fibroblasts and alveolar osteoblasts is revealed for ATP-competitive tyrosine kinase inhibitors, maleimide derivate MI-1 and dihydropyrrol derivative D-1. Apoptosis is the main form of cells death upon the stimulation with both compounds. D-1 is more cytotoxic than MI-1 for both cell lines. This indicates possible disorders in bone and connective tissues reparation of the oral cavity following the administration of D-1. The low toxicity of MI-1 indicates that further investigations are needed.



УДК 612.35:616.36

© 2012

Н. С. Весельська, П. І. Янчук, В. А. Барановський,
М. Ю. Макарчук

Особливості жовчоутворення при зміні функціонального стану ендотелінових рецепторів

(Представлено членом-кореспондентом НАН України С. О. Костеріним)

За умов гострого дослідження на щурах вивчено вплив ендотеліну-1 та BQ-123 на зовнішньо-секреторну функцію печінки та співвідношення вільних і кон'югованих жовчних кислот у жовчі. Виявлено гальмівну дію апробованих доз препаратів на холерез і різнонаправлений вплив на біосинтез окремих жовчних кислот. Показано, що ендотелін-1 підсилює біосинтез тригідроксихоланових кислот, а BQ-123 сприяє зростанню рівня як вільних, так і кон'югованих дигідроксихоланових кислот у жовчі.

Ендотелінові рецептори за своєю хімічною будовою є глікопротеїдами. Гідрофобна білкова частина молекули рецептора перетинає біліпідний шар мембрани клітини 7 разів, відповідно, у внутрішньоклітинному та позаклітинному просторі залишаються петлі пептидних ділянок, які утворені переважно гідрофільними амінокислотами. Саме такі позаклітинні ланки пептидних ланцюгів разом із вуглеводневою складовою формують сайти для зв'язування з певними регуляторними чинниками, зокрема з ендотеліном. Взаємодія останнього з відповідним сайтом рецептора викликає характерні конформаційні зміни самого рецептора та ініціює за участю G-білків зрушення рівня внутрішньоклітинних посередників. Саме через них реалізуються метаболічні перебудови на дію даного регуляторного сигналу [1–3].

Ендотелінові рецептори підтипу A (ET_A) виявлені не лише на клітинах ендотелію судин печінки, але й безпосередньо на гепатоцитах та міоцитах жовчного міхура [4, 5]. Локалізація даних рецепторів вказує на широкі можливості різнопланового впливу при їх активації на перебіг фізіолого-біохімічних процесів у печінці, в тому числі і тісно пов'язаних з жовчоутворенням. Зокрема, поодинокі дані літератури свідчать про те, що взаємодія агоністів та антагоністів з ендотеліновими рецепторами викликає неоднозначні холеретичні реакції печінки. При цьому одні дослідники реєструють стимуляцію, а інші — пригнічення жовчоутворення за дії одних і тих же чинників [6, 7]. Загалом, результати таких досліджень поки що не дозволяють скласти певного уявлення щодо участі ендотелінових рецепторів у складному нейрогуморальному механізмі регуляції жовчоутворення та формуванні якісного складу жовчі.

З метою з'ясування ролі ендотелінових рецепторів у регуляції секреції жовчі нами було досліджено вплив ендотеліну-1 та блокатора ЕТ_A-рецепторів ВQ-123 на інтенсивність холерезу і органічний склад жовчі у щурів.

Дослідження проведені за умов гострого досліду на 35 білих лабораторних щурах масою 180–250 г під уретановим наркозом (1 г/кг). У тварин здійснювали лапаротомію та канюлювали жовчну протоку для реєстрації холесекреції. Ендотелін-1 (1 мкг/кг) і ВQ-123 (60 мкг/кг) вводили внутрішньопортально. Контролем були тварини, яким аналогічним чином вводили фізіологічний розчин.

Інтенсивність секреції жовчі у щурів визначали кожні 10 хв протягом 3 год. Об'ємну швидкість секреції жовчі розраховували в мкл/г маси тіла тварин (та маси печінки). За час проведення експерименту збирали шість півгодинних проб жовчі, в кожній з яких за допомогою тонкошарової хроматографії [8] визначали концентрацію вільних та кон'югованих жовчних кислот (на пластинах Silufol). Вміст окремих жовчних кислот визначали безпосередньо на хроматограмах, використовуючи денситометр ДО-1 м. Статистичну обробку результатів здійснювали за допомогою аналітичного пакета Statistica, використовуючи *t*-критерій Стьюдента, оскільки дані мали нормальний розподіл при перевірці їх за тестом Шапіро–Уїлка. Статистично вірогідними вважалися відмінності між контролем і дослідом при $p < 0,05$.

Проведені контрольні досліди з введенням фізіологічного розчину показали, що після півгодинної стабілізації холерезу об'ємна швидкість секреції жовчі в ході експерименту поступово зменшувалася. Так, середня величина об'ємної швидкості секреції жовчі першого 10-хвилинного проміжку становила $(0,298 \pm 0,09)$ мкл/г маси тіла, а кінцевої проби — $(0,258 \pm 0,11)$ мкл/г. Це свідчить про зниження об'ємної швидкості холесекреції у контрольних тварин на 13,4% за 3 год досліду.

Більш виразно особливості впливу досліджуваних препаратів на холерез виявляються при порівняльному аналізі даних з використанням відносних величин, за яких вихідним рівнем є середня величина перших трьох 10-хвилинних проміжків, яка приймається за 100%.

Результати дослідження показали, що жовчосекреторна функція печінки щурів досить чутлива до дії як агоністів, так і антагоністів ендотелінових рецепторів. Зокрема, при одnorазовому внутрішньопортальному введенні ендотеліну-1 в дозі 0,1 мкг/100 г, яка викликає помітні судинорухові реакції у печінці [9], спостерігалось гальмування холерезу. Максимальне зниження холерезу на 15,6% ($p < 0,05$) порівняно з контролем реєстрували на 40–50-й хвилині після введення препарату. В подальшому відбувалося поступове відновлення жовчоутворення і через 2 год експерименту його рівень сягав контрольних величин, але був нижчим за вихідний рівень на 8,6%, тоді як у контрольних дослідах холесекреція знизилася на 10,8% (рис. 1).

Хроматографічний аналіз півгодинних проб жовчі засвідчив, що ЕТ-1 неоднаково впливав на вміст окремих жовчних кислот протягом усього досліду. Так, незважаючи на те, що концентрація таурохолевої кислоти (ТХК) протягом 3-годинного досліду поступово знижувалась як у жовчі контрольних тварин, так і тих, яким вводили ЕТ-1, наприкінці експерименту її рівень у останніх був на 9,3% ($p < 0,05$) вищим і становив $(154,7 \pm 2,8)$ мкг · %, а в контрольній жовчі — $(141,5 \pm 2,3)$ мкг · %. Загальний рівень суми таурохенодезоксихолевої та тауродезоксихолевої (ТХДХК + ТДХК) кислот у більшості проб жовчі тварин, які отримували ЕТ-1, був дещо вищим, ніж у контрольних щурів.

Найістотніше при введенні ЕТ-1 змінювався вміст глікохолевої кислоти (ГХК). Так, якщо у жовчі контрольних тварин її концентрація протягом досліду поступово зменшувалась,

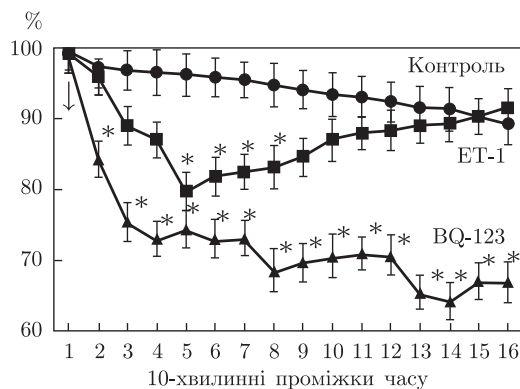


Рис. 1. Відносні зміни холерезу у щурів при дії ендотеліну-1 (0,1 мкг/100 г) та BQ-123 (6 мкг/100 г) ($M \pm m$). * — $p < 0,05$ щодо контролю (вірогідність змін розрахована за абсолютними значеннями показника); ↓ — момент введення препарату

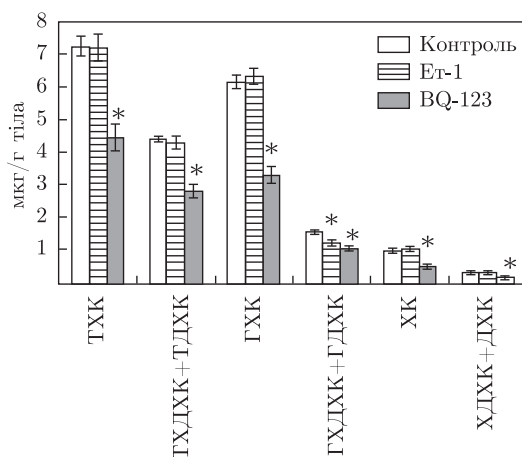


Рис. 2. Дебіт жовчних кислот у контрольних дослідках та при введенні ендотеліну-1 (0,1 мкг/100 г) і BQ-123 (6 мкг/100 г) ($M \pm m$). * — $p < 0,05$ щодо контролю

лася, то при застосуванні ET-1 вона вірогідно перевищувала контрольні значення в другій половині дослідку. Зокрема, концентрація її підвищилась у 4-й пробі на 12,3% ($p < 0,01$), у 5-й на 19,7% ($p < 0,01$) і у 6-й на 16,3% ($p < 0,01$). При цьому спостерігалась лише тенденція до зниження рівня глікоцидгидроксихоланових кислот (ГХДХК + ГДХК) у жовчі піддослідних щурів.

Ендотелін-1 зумовлював хвилеподібні зміни в бік підвищення концентрації вільної жовчої кислоти (ХК) з максимумом змін у 3-й півгодинній пробі на 20,6% та у 6-й — на 19,8% порівняно з відповідними пробами жовчі в контролі. Концентрація вільних хенодезоксиколевої та дезоксиколевої кислот (ХДХК та ДХК) у жовчі піддослідних щурів була близькою до контрольних значень (рис. 2).

Непередбачувані зміни в процесі жовчоутворення виявились за умов блокування ендотелінових рецепторів підтипу А антагоністом BQ-123, який виключає дію як ендогенних, так і екзогенних ендотелінів через даний підтип рецепторів. Така зміна стану ET_A-рецепторів призвела до більш істотного та пролонгованого в часі гальмування холерезу в піддослідних

тварин. Так, вже за перший 10-хвилинний проміжок після внутрішньопортального введення ВQ-123 (6 мкг/100 г) секреція жовчі знизилась на 15,7% ($p < 0,05$). В наступних двох 10-хвилинних проміжках спостерігалось подальше гальмування холерезу і на 30-й хвилині після введення препарату реєструвалось його зменшення на 26,9% ($p < 0,05$) порівняно з вихідним рівнем та на 24,2% ($p < 0,05$) відносно контрольних величин. Максимальне уповільнення холерезу відносно вихідного рівня було зареєстроване на 140-й хвилині після введення ВQ-123 і становило 35,6% ($p < 0,05$) (рис. 1).

Хроматографічний аналіз виявив значні зміни якісного складу і кількісного вмісту жовчних кислот у пробах жовчі, отриманих при введенні даного препарату. Зокрема, найбільш істотно підвищувалася концентрація глікодигідроксихоланових кислот (ГХДХК + ГДХК) у жовчі 5-ї та 6-ї півгодинних проб, у яких вона перевищувала контрольні значення на 56% ($p < 0,05$) і 60,6% ($p < 0,05$) відповідно. Водночас концентрація ГКХ майже не змінювалася порівняно з контролем. Рівень таурокон'югатів жовчних кислот характеризувався певними фазовими коливаннями протягом експерименту, але вірогідним було лише їх зростання. Так, концентрація ТХК зростала у 5-й та 6-й півгодинних пробах на 17,5 та 25,3% ($p < 0,05$). А рівень ТХДХК + ТДХК у ці ж часові проміжки підвищувався на 26,9% ($p < 0,05$) та 35,5% ($p < 0,05$) відносно відповідних контрольних значень. Разом з тим спостерігалася обернена залежність між рівнем таурокон'югатів і вмістом вільних жовчних кислот.

Важливим моментом для з'ясування особливостей жовчоутворення є оцінка ефективності роботи певних поліферментних систем у тканині печінки, які забезпечують гідроксилювання та кон'югацію жовчних кислот з відповідними амінокислотами, що в результаті змінює властивості колоїдної системи жовчі. Розрахунки та аналіз відмінностей коефіцієнтів гідроксилювання, кон'югації та дебіту окремих жовчних кислот за умов зміни стану ендотелінових рецепторів, викликаного ендотеліном-1 та ВQ-123, вказують на значні зрушення в процесах жовчоутворення у піддослідних тварин. Ендотелін-1 викликав підсилення біосинтезу як вільних, так і кон'югованих з гліцином тригідроксихоланових кислот, синтез яких тісно пов'язаний з активністю ферментів мітросомального окислення, так званим нейтральним шляхом, яке залежить від забезпечення тканини киснем [10, 11]. Останнє деякою мірою узгоджується з раніше встановленим фактом зниження споживання кисню тканиною печінки при введенні даної дози ендотеліну-1 [9, 12].

При дії ВQ-123 коефіцієнт гідроксилювання жовчних кислот знизився протягом досліду від 2,21 до 1,95, тоді як у контролі він підвищився від 2,2 до 2,5, що свідчить про більшу вираженість біосинтезу дигідроксихоланових кислот і знаходить своє відображення у встановленому вірогідному зростанні концентрації їх кон'югатів як з гліцином, так і з таурином. Відомо, що біосинтез первинної хенодезоксихолевої кислоти в печінці відбувається за активної участі мітохондріальних ферментів, що певною мірою підтверджується і виявленим нами значним зростанням її кон'югатів у жовчі піддослідних тварин. Отже, блокування ЕТ_A рецепторів даним препаратом вказує на важливу роль ендогенного ендотеліну-1 в нейрогуморальній регуляції процесів жовчоутворення в печінці.

Вивчення ефективності біосинтезу окремих жовчних кислот у печінці піддослідних щурів, опираючись на розрахунки дебіту даних метаболітів як в окремі півгодинні проміжки, так і, особливо, за весь період досліду, переконливо свідчить про різницю в цих характеристиках, виявлену за дії ендотеліну-1 та ВQ-123 (див. рис. 2). Так, наприклад, якщо застосована нами доза ендотеліну-1 сприяла вірогідному підвищенню продуктивних можливостей печінки щодо біосинтезу ГКХ і в сумі за дослід по більшості жовчних кислот показники були вищими, ніж у контролі, то застосування блокатора ендотелінових рецепторів ВQ-123

зумовило істотне зниження дебіту більшості жовчних кислот порівняно з контрольними величинами.

Не виключено, що виявлене нами істотне і тривале гальмування холерезу у щурів при дії ВQ-123 зумовлюється частковим виключенням жовчних кислот з осмотично-дифузних процесів при формуванні жовчі внаслідок значного зниження їх синтезу гепатоцитами.

Таким чином, активація ендотелінових рецепторів екзогенним ендотеліном-1 спричиняє короткотермінове зниження холерезу з одночасним посиленням синтезу жовчних кислот “нейтральним шляхом” за участю ферментів мікросомального окислення, про що свідчать зміни співвідношення тригідроксихоланових до дигідроксихоланових кислот і зростання рівня глікохолевої кислоти. Блокада ЕТ_A рецепторів ВQ-123, що виключає можливість регуляторної дії ендогенних ендотелінів, викликає різке і довготривале зменшення жовчоутворення з одночасною зміною синтезу жовчних кислот переважно мітохондріальними ферментами “кислим шляхом”, на що вказує зростання у жовчі як вільних, так і кон’югованих дигідроксихоланових кислот та зниження дебіту жовчних кислот.

1. Hope S. I., na Schmitta J., Rossi A. H. et al. Regulation of the neuronal norepinephrine transporter by endothelin – 1 and – 3 in the rat anterior and posterior hypothalamus // *Neurochem. Intern.* – 2008. – **53**. – P. 207–213.
2. Ballinger M. L., Ivey M. E., Osman N. et al. Endothelin-1 activates ETA receptors on human vascular smooth muscle cells to yield proteoglycans with increased binding to LDL // *Atherosclerosis.* – 2009. – **205**. – P. 451–457.
3. Shao R., Shi Z., Gotwals P. J. et al. Cell and molecular regulation of endothelin-1 production during hepatic wound healing // *Mol. Biol. Cell.* – 2003. – **14**, No 6. – P. 2327–2341.
4. Патарая С., Преображенский Д., Сидоренко Б., Масенко В. Биохимия и физиология семейства эндотелинов // *Кардиология.* – 2000. – № 6. – С. 78–85.
5. Huang S. C. Endothelin ET(A) but not ET(B) receptors mediate contraction of common bile duct // *Regul. Pept.* – 2003. – **15**. – P. 131–138.
6. Isales C. M., Nathanson M. H., Bruck R. Endothelin-1 induces cholestasis which is mediated by an increase in portal pressure // *Biochem. Biophys. Res. Commun.* – 1993. – **191**, No 3. – P. 1244–1251.
7. Tanaka A., Katagiri K., Hoshino M. et al. Endothelin-1 stimulates bile acid secretion and vesicular transport in the isolated perfused rat liver // *Amer. J. Physiol.* – 1994. – **266**. – P. 324–329.
8. А. с. 4411066/14 СССР, МБИ G 01 № 33/50. Способ определения желчных кислот в биологической жидкости / С.П. Весельский, П.С. Лященко, И.А. Лукьяненко. – № 1624322; Заявл. 25.01.1988; Опубл. 30.01.1991, Бюл. № 4.
9. Янчук П. І., Комаренко В. І., Русінчук Я. І., Терехов А. Участь ендотеліну-1 у регуляції кровообігу, кисневого балансу та жовчосекреторної функції печінки // *Вісн. Київ. нац. ун-ту ім. Тараса Шевченка: Проблеми регуляції фізіол. функцій.* – 2006. – Вип. 1. – С. 8–10.
10. Vlahcevic Z. R., Stravitz R. T., Heuman D. M. Regulation of sterol 27-hydroxylase (S27-H) and the acidic pathway of bile acid synthesis // *XIV Intern. Bile Acids Meeting. Bile Acids in Hepatobiliary Diseases – Basic Research and Clinical Application.* – Freiburg (Germany), 1996. – P. 11.
11. Hofmann A. F. Bile acids: The good, the bad, and the ugly // *News Physiol. Sci.* – 1999. – **14**. – P. 24–29.
12. Янчук П. І., Русінчук Я. І., Терехов А. А. Вплив ендотеліну-1 на кисневий баланс і теплотворення печінки // *Фізіол. журн.* – 2008. – **54**, № 6. – С. 38–41.

НДІ фізіології ім. академіка Петра Богача
ННЦ “Інститут біології” Київського
національного університету ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 18.04.2012

Н. С. Весельская, П. И. Янчук, В. А. Барановский, М. Ю. Макаrchук

Особенности желчеобразования при изменении функционального состояния эндотелиновых рецепторов

В условиях острого опыта на крысах изучено влияние эндотелина-1 и BQ-123 на внешне-секреторную функцию печени и соотношение свободных и конъюгированных желчных кислот в желчи. Обнаружено тормозное действие апробированных доз препаратов на холерез и разнонаправленное влияние на биосинтез отдельных желчных кислот. Показано, что эндотелин-1 усиливает биосинтез тригидроксихолановых кислот, а BQ-123 способствует возрастанию уровня как свободных, так и конъюгированных дигидроксихолановых кислот в желчи.

N. S. Veselska, P. I. Yanchuk, V. A. Baranovsky, M. Yu. Makarchuk

Some peculiarities of bile formation under changes of a functional of endothelin receptors

Influences of endothelin-1 and its antagonist BQ-123 on both choleresis and quantitative correlation of free and conjugated bile acids in bile have been studied in sharp experiments on rats. The inhibitory action of these preparations on choleresis at the doses tested and the differently directed influences on the biosynthesis of separate bile acids are revealed. Endothelin-1 intensifies the biosynthesis of trihydroxycholic acids, while BQ-123 promotes increasing the levels of both free and conjugated dihydroxycholic acids in bile.

Т. Ю. Сабирова, О. Й. Лозовая, Л. В. Юзвенко, Н. В. Жидкевич,
Л. Ф. Диденко, член-корреспондент НАН Украины Н. Я. Спивак

Фиторабдовирусы как регрессирующий фактор растительной опухоли

*При инкубировании растительных опухолей, индуцированных *Agrobacterium tumefaciens*, с различными рабдовирусами — вирусом кучерявой карликовости картофеля (ВККК), вирусом ожога гречихи (ВОГ) и вирусом везикулярного стоматита (ВВС), отмечена регрессия опухолей на 58, 44 и 74,5% соответственно.*

Опухоли растений, индуцированные *Agrobacterium tumefaciens*, представляют особый интерес, поскольку они характеризуются основными свойствами, присущими злокачественным новообразованиям человека и животных, такими как агрессивность, автономный нерегулируемый рост и трансплантабельность [1]. Поэтому растительные опухоли используют в качестве экспериментальной модели с целью выявления определенных фундаментальных биологических концепций, которые являются основой для понимания онкогенеза в целом и изучения противоопухолевого действия препаратов [2]. Противоопухолевые препараты, используемые в терапии заболеваний человека и животных, ингибируют и опухоли растений, вызывая в оптимальных дозах их полную регрессию. Кроме того, показано, что индуцированные опухоли растений развиваются по тем же кинетическим законам, что и опухоли человека и животных [3].

Терапия, основанная на способности избирательного лизиса злокачественных клеток онколитическими вирусами, в том числе и рабдовирусом — вирусом везикулярного стоматита человека (ВВС), является прогрессивным направлением в расширении возможностей лечения и профилактики онкологических заболеваний [4].

Фиторабдовирус вирус ожога гречихи (ВОГ) по своей структурной и функциональной организации имеет много общих свойств с представителем семейства *Rhabdoviridae* — ВВС [5]. И свидетельством тому является то, что ВОГ вызывает индукцию апоптоза злокачественных клеток саркомы 37 [6].

Известно, что каланхое служит в качестве модельного растения для изучения опухолевого процесса, индуцируемого *A. tumefaciens*. Исходя из этого, представляло интерес исследовать влияние рабдовируса на развитие растительной опухоли, индуцируемой *A. tumefaciens*. С целью индуцированного онкогенеза в центральную жилку листа растения каланхое вводили 0,05 мл двухсуточной культуры бактерий высоковирулентного штамма 8628 *A. tumefaciens*, содержащей $1 \cdot 10^8$ клеток/мл.

На опытных растениях первичные симптомы опухолей, индуцируемые *A. tumefaciens*, появлялись на 10–30-е сутки. Размеры опухоли определяли по формуле $P = \pi abc/4$, где π — удельная масса опухолевой ткани; a , b , c — соответственно ширина, длина, высота опухоли. Удельная масса опухолевой ткани приближается к единице, поэтому количественная масса опухоли приравнивается к ее объему [2].

Проведенные исследования показали, что вирусные препараты ВККК (вирус кучерявой карликовости картофеля), ВОГ и ВВС при инкубировании с растительной опухолью вызывают регрессию опухолей с последующей ее некротизацией (рис. 1). В опухолях, кон-

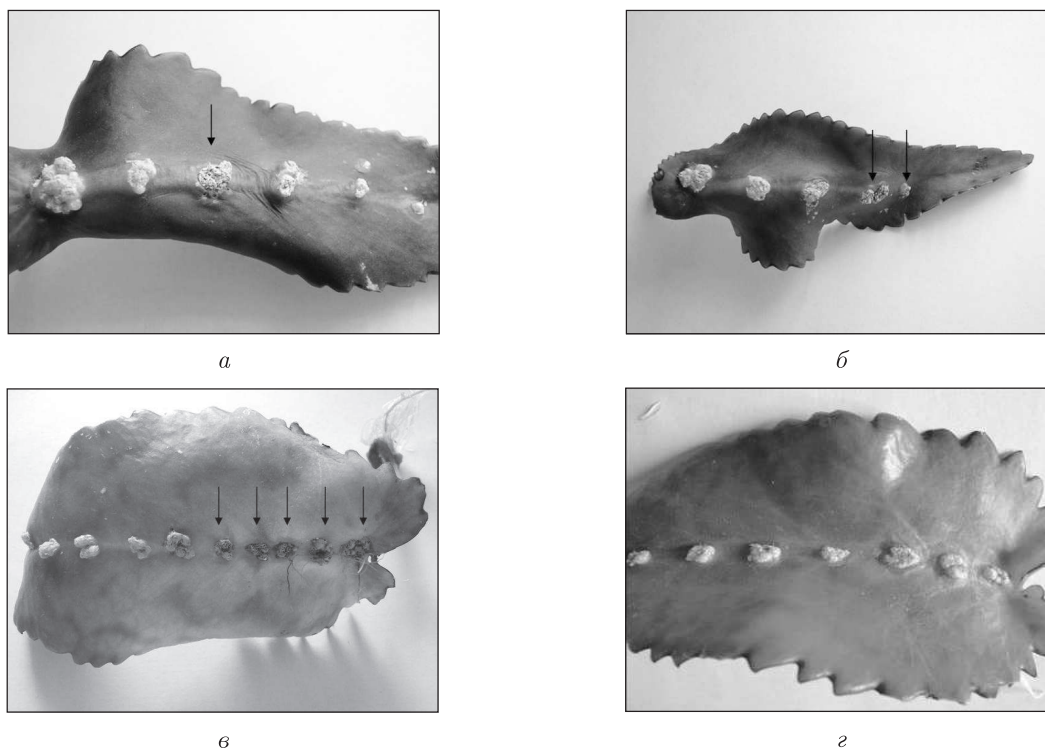


Рис. 1. Листья каланхое с опухолями (стрелкой показана опухоль, которая контактировала с вирусным препаратом): *а* – ВККК; *б* – ВОГ; *в* – ВВС; *г* – контроль

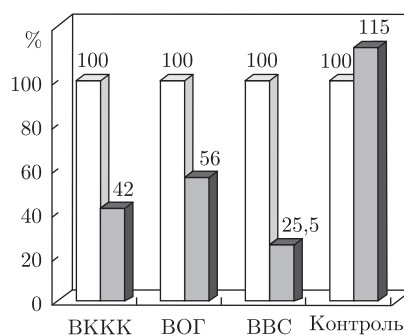


Рис. 2. Процентное соотношение массы опухолей до инкубации с вирусами (светлые столбики) и через 2 недели после инкубации (затемненные столбики)

тактируемых с ВККК и ВОГ, через неделю наблюдалось потемнение их поверхности и замедление роста в результате образования на них некрозов. При длительном контакте с ВВС также произошла деструкция опухолей в результате их некротизации.

В контрольных растениях, с развитой опухолью, которые обрабатывали буферным раствором без вируса, наблюдали слабое потемнение раневой поверхности опухоли и незначительное торможение ее роста. Через некоторое время рост опухоли в контрольных растениях возобновился. В целом, растительные опухоли, контактируемые с вирусными препаратами ВККК, ВОГ и ВВС, через 2 недели уменьшились в размерах на 58, 44 и 74,5% соответственно (рис. 2).

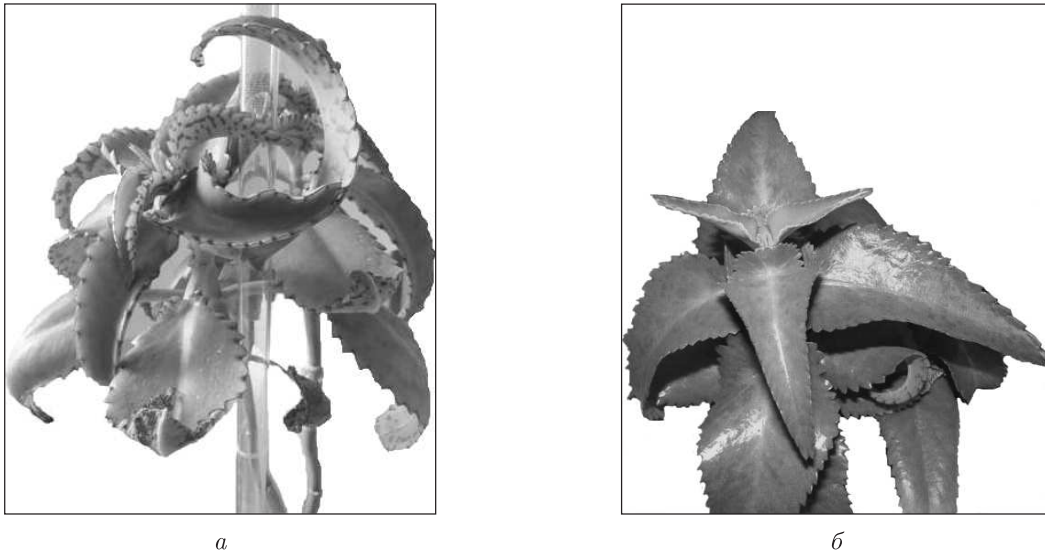


Рис. 3. Симптомы заболевания каланхое, инфицированного ВОГ: *а* — инфицированное ВОГ растение; *б* — контрольное растение

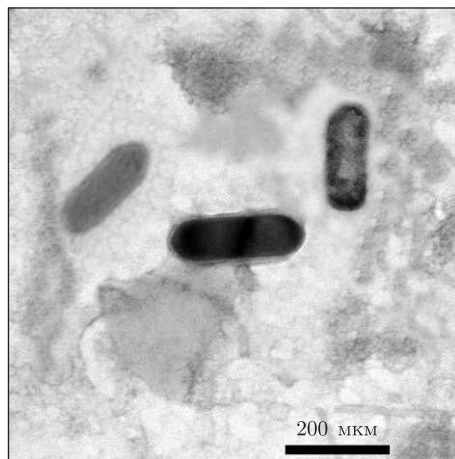


Рис. 4. Электронная микроскопия вирусных частиц ВОГ

Вместе с тем представляло интерес исследовать влияние репродукции ВОГ в растениях каланхое на онкогенез, индуцированный *A. tumefaciens*. С этой целью листья растений каланхое инфицировали ВОГ, которому присуща способность поражать многие виды растений из многочисленных семейств [7]. Инфицирование проводили механическим способом с использованием целлита. Симптомы вирусного заболевания, вызванного ВОГ, на растениях каланхое проявились в деформации нижних листьев с последующим их засыханием, а на верхушках инфицированных растений появлялась кучерявость и мелколистность (рис. 3). Репродукция ВОГ подтверждена и электронномикроскопическим методом, посредством которого в соке инфицированных растений выявлены вирусные частицы (рис. 4).

Инфицированные ВОГ растения каланхое инокулировали *A. tumefaciens* с целью образования на них опухолевого процесса. Однако на листьях каланхое, инфицированных рабдовирусом, не отмечалось развитие опухолей, индуцированных *A. tumefaciens*.

Полученные данные свидетельствуют о том, что фиторабдовирусы ВОГ и ВККК и зоорабдовирус ВВС ингибируют развитие растительных опухолей.

Таким образом, растительные опухоли в будущем можно использовать в качестве экспериментальной модели для изучения процессов растительного онкогенеза и противоопухолевого действия различных биопрепаратов.

1. Braun A. C. A history of the crown gall problem // Molecular biology of plant tumors/ Ed. G. Kahl, J. Schell. – New York; London: Acad. Press., 1982. – P. 155–209.
2. Потопальський А. І., Ткачук З. Ю. Пухлини і нарости у рослин. – Київ: Вища шк., 1985. – 184 с.
3. Зоз Н. М., Серебряный Л. М., Колоденков П. В. и др. Ингибирование роста опухолей растений N-нитро-N-метил мочевиной. Опухоли растений // Докл. АН СССР. – 1977. – **233**, – № 1. – С. 242–244.
4. Balachandran S., Porosnicu M., Barber G. N. Oncolytic activity of vesicular stomatitis virus is effective against tumors exhibiting aberrant p 53, Ras. Or myc function and involves the induction of apoptosis // J. Virol. – 2001. – **75**. – P. 3474–3479.
5. Юзвенко Л. В., Серденко О. Б., Діденко Л. Ф., Варбанець Л. Д., Шевчук В. К., Співак М. Я. Фізико-хімічні властивості вірусного опіку гречки // Доп. НАН України. – 2010. – № 1. – С. 170–174.
6. Spivak N. Ya., Yuzvenko L. V., Lozova O. J., Levchuk O. B., Didenko L. F. et al. Induction of apoptosis of malignant cells of the sarcoma 37 by phytorabdovirus BBV // Вісн. Ужгород. ун-ту. Сер. Біологія. – 2010. – No 27. – С. 40–41.
7. Шевчук В. К., Довгань С. В., Діденко Л. Ф., Демченко О. А., Юзвенко Л. В., Серденко О. Б., Співак М. Я. Вірусний опік гречки в Україні // Карантин і захист рослин. – 2008. – № 11. – С. 13–15.

Институт микробиологии и вирусологии
им. Д. К. Заболотного НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 01.03.2012

**Т. Ю. Сабірова, О. Й. Лозова, Л. В. Юзвенко, Н. В. Жидкевич,
Л. Ф. Діденко, член-кореспондент НАН України Н. Я. Співак**

Фіторабдовируси як регресуючий фактор рослинної пухлини

*При інкубації рослинних пухлин, індукованих *Agrobacterium tumefaciens*, з різними рабдовирусами – вірусом кучерявої карликовості картоплі (ВККК), вірусом опіку гречки (ВОГ) і вірусом везикулярного стоматиту (ВВС), виявлено регресію пухлин на 58, 44 і 74,5% відповідно.*

**T. Yu. Sabirova, O. Yo. Lozova, L. V. Yuzvenko, N. V. Zhitkevich,
L. F. Didenko, Corresponding Member of the NAS of Ukraine N. Ya. Spivak**

Phytorhabdoviruses as a regressive factor of plant tumors

*During the incubation of *Agrobacterium tumefaciens*-induced plant tumors with different rhabdoviruses (potato curly dwarf virus (PCDV), viral burn of buckwheat (VBB), and vesicular stomatitis virus (VSV)), the regression of tumors by 58, 44, and 74.5%, respectively, is revealed.*



УДК 577.2:577.3

© 2012

Е. А. Гребнева

Природа и механизмы образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В. Н. Варюхиным)

В настоящее время не ясна природа и механизмы образования горячих и холодных пятен мишеных мутаций, которые образуются после облучения молекулы ДНК ультрафиолетовым светом. Разрабатывается полимеразно-таутомерная модель ультрафиолетового мутагенеза. Предлагается модель образования таких горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза, которые образуются напротив цис-син циклобутановых пиримидиновых димеров. Показано, что горячими пятнами ультрафиолетового мутагенеза являются такие цис-син циклобутановые цитозин-тиминовые, тимин-цитозиновые и цитозин-цитозиновые димеры, на которые переходит больше энергии, чем на такие же циклобутановые цитозин-тиминовые, тимин-цитозиновые и цитозин-цитозиновые димеры, являющиеся холодными пятнами ультрафиолетового мутагенеза. Причины образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза — это соотношение между синглетными и триплетными уровнями оснований ДНК и процессы распространения энергии по молекуле ДНК. Добавочная энергия может приводить к изменению таутомерных состояний оснований ДНК, таких, которые входят в состав цис-син циклобутановых пиримидиновых димеров. Это может вызвать мишеные мутации.

После облучения молекулы ДНК ультрафиолетовым светом в ней образуются циклобутановые пиримидиновые димеры и (6–4) аддукты. В процессах репликации или репарации они могут приводить к мутациям. Мутации, вызванные УФ-светом, распределены по молекуле ДНК неравномерно. Большая их часть сосредоточена в так называемых горячих пятнах. На некоторых участках их никогда не бывает — это холодные пятна ультрафиолетового мутагенеза [1, 2]. Цитозиновые циклобутановые димеры чаще приводят к мутациям, чем тиминовые. А горячие пятна ультрафиолетового мутагенеза, чаще всего, совпадают с циклобутановыми димерами, состоящими из молекул цитозина и тимина (СТ). Как показывает эксперимент, на цитозин-тиминовых сайтах фотопродукты образуются довольно часто [1, 2]. Общепринятая теория ультрафиолетового мутагенеза опирается на гипотезу о том, что мутации обусловлены исключительно случайными ошибками ДНК-полимераз, а циклобутановые пиримидиновые димеры, приводящие к мутациям, и немутационные циклобутановые

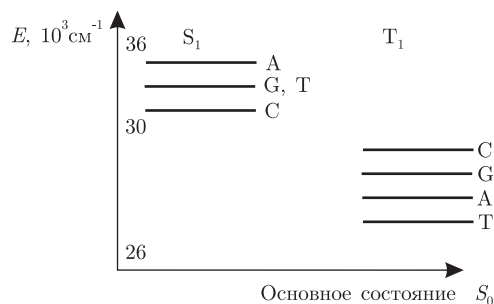


Рис. 1. Диаграмма энергетических уровней различных оснований ДНК [12]: S_1 — нижний синглетный уровень; T_1 — нижний триплетный уровень; S_0 — основное состояние

пиримидиновые димеры, состоящие из таких же оснований ДНК, ничем между собой не различаются [3, 4]. В рамках этой парадигмы и даются современные объяснения природы горячих и холодных точек мутагенеза. Предполагается, что участки с определенным нуклеотидным составом лучше (или хуже) репарируются, чем другие и т. д. Однако общепризнанно, что в настоящее время нет удовлетворительного объяснения этого явления [2].

При облучении молекулы ДНК ультрафиолетовым светом может изменяться таутомерное состояние входящих в молекулу ДНК оснований. Автором была разработана полимеразно-таутомерная модель ультрафиолетового мутагенеза [5–10]. Было показано, что такие изменения таутомерных состояний могут происходить при образовании *цис-син* циклобутановых пиримидиновых димеров [5–10]. Оказалось, что возможно образование семи новых редких таутомерных состояний для гуанина и цитозина и пяти — для тимина и аденина [5–10]. Они устойчивы, если соответствующие основания входят в состав димеров или находятся в небольшой окрестности от димера. *Цис-син* циклобутановые пиримидиновые димеры, основания которых находятся в канонических таутомерных формах, не могут приводить к мутациям. Следовательно, холодные пятна ультрафиолетового мутагенеза — это циклобутановые пиримидиновые димеры, основания которых находятся в канонических таутомерных формах. А горячие пятна ультрафиолетового мутагенеза — это циклобутановые пиримидиновые димеры, основания которых находятся в редких таутомерных формах. Значит, нам необходимо понять, почему при образовании одних димеров происходит изменение таутомерных состояний входящих в них оснований ДНК, а при образовании других, точно таких же, таутомерные состояния входящих в них оснований не изменяются.

Особенности тепловой релаксации энергии возбуждения. Попробуем с позиций нашей полимеразно-таутомерной модели ультрафиолетового мутагенеза объяснить некоторые особенности образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза. Для этого рассмотрим, что происходит при поглощении молекулой ДНК ультрафиолетового кванта энергии. Энергия возбуждения, как правило, локализуется на одном из оснований, что приводит к возбуждению электронно-колебательных состояний [11]. Эта энергия может перейти в тепло или излучиться на данном основании, а может перейти на соседние основания с синглетного уровня на синглетный или с триплетного уровня на триплетный, высветив разность энергии [11]. Для того чтобы изучить судьбу этого возбужденного состояния, нам необходимо знать соотношение между энергиями синглетного и триплетного уровней энергии различных оснований ДНК. Они приведены на рис. 1 [12].

Синглетный (разрешенный) уровень энергии имеет время жизни порядка 10^{-12} с. Для него наиболее вероятным процессом является излучение энергии. Ясно, что никаких изме-

нений структуры ДНК при этом произойти не может. Время жизни триплетного (запрещенного) уровня энергии порядка 10^{-6} с. Для него наиболее вероятным процессом будет превращение энергии возбуждения в энергию колебаний соседних атомов [13]. Происходящие при этом сильные вынужденные колебания являются первым этапом образования пиримидиновых циклобутановых димеров и изменения таутомерного состояния входящих в них оснований. Тепловая релаксация возбуждения с триплетного уровня энергии является основной причиной повреждений молекулы ДНК при облучении ее ультрафиолетовым светом [5–10]. Была высказана идея, что причиной образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза являются особенности процессов распространения энергии возбуждения по молекуле ДНК [14]. Посмотрим, почему некоторые циклобутановые пиримидиновые димеры часто приводят к мутациям, а другие, точно такие же, очень редко или никогда.

Почему циклобутановый димер C₁₅₀T₁₅₁ в *supF* [1] является холодным пятном ультрафиолетового мутагенеза? Рассмотрим нить участка ДНК, кодирующей супрессорную транспортную РНК *supF* [1]. На нем было обнаружено сильное горячее пятно — циклобутановый димер C₁₅₆T₁₅₇, который генерировал 11% всех мутаций на изучавшемся участке ДНК (№№ 100–180) и вызвал 14 транзиций G-C → A-T. В то же время точно такой же циклобутановый димер C₁₅₀T₁₅₁ не дал ни одной мутации. Этот сайт был назван холодным пятном ультрафиолетового мутагенеза [1].

Предмутагенные изменения структуры ДНК происходят в процессе тепловой релаксации возбуждения с синглетного или триплетного уровня энергии одного из оснований [5, 7]. Поэтому рассмотрим уровни энергии данного основания и соседних оснований. Возбуждение после поглощения энергии ультрафиолетового кванта всегда находится на синглетном уровне энергии. С некоторой, отличной от нуля вероятностью, энергия возбуждения с синглетного уровня может перейти на триплетный, высветив разность энергии (запрещенный переход). Это основной механизм заселения триплетного уровня. Кроме того, возможна передача энергии с синглетного (триплетного) уровня данного основания на синглетные (триплетные) уровни соседних оснований, если они имеют более низкий уровень энергии. При этом излучается разность энергии. Такие переходы являются разрешенными, а переходы с синглетного уровня на триплетные являются запрещенными переходами, поэтому в данном расчете мы должны ими пренебречь.

Цитозин C₁₅₀ и тимин T₁₅₁ образуют *цис-син* циклобутановый пиримидиновый димер, который на участке ДНК, представленном на рис. 2, является холодным пятном ультрафиолетового мутагенеза. Посмотрим, какая энергия возбуждения может передаваться на синглетный уровень цитозина C₁₅₀. Обозначим через E_C^S энергию нижнего синглетного уровня цитозина. Пусть цитозин C₁₅₀ поглотил энергию ультрафиолетового кванта. Тогда энергия его нижнего синглетного уровня составит E_C^S . Пусть гуанин G₁₄₉ поглотил энергию ультрафиолетового кванта. Если эта энергия возбуждения не излучится, то она передастся на синглетный уровень цитозина C₁₅₀, высветив разность энергии.

Пусть аденин A₁₄₈ поглотил энергию ультрафиолетового кванта. Эта энергия возбуждения может передаваться на синглетный уровень цитозина C₁₅₀ с вероятностью 1/2, высветив разность энергии. И с вероятностью 1/2 она передастся на синглетный уровень тимина T₁₄₇, высветив разность энергии. Пусть тимин T₁₅₁ поглотил энергию ультрафиолетового кванта. Эта энергия возбуждения может передаваться на синглетный уровень цитозина C₁₅₀, высветив разность энергии. Пусть гуанин G₁₅₂ поглотил энергию ультрафиолетового кванта. Эта энергия возбуждения может передаваться на синглетный уровень гуанина C₁₅₀, высветив разность энергии.

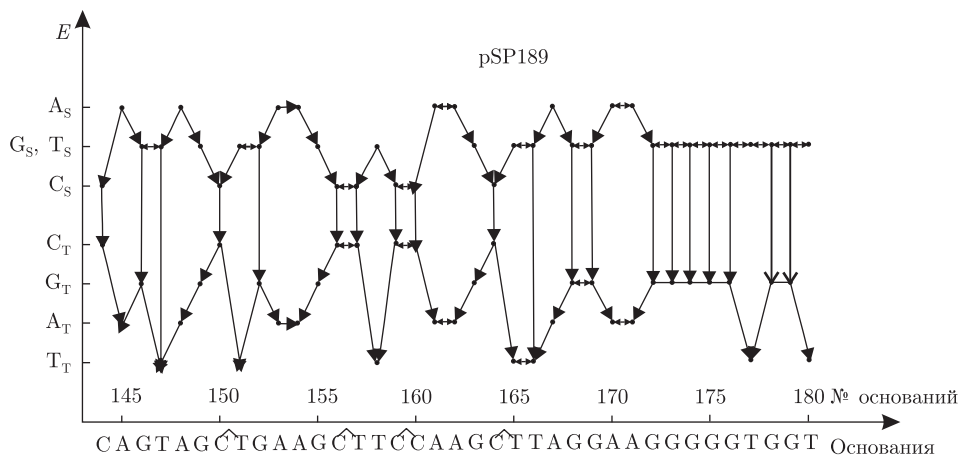


Рис. 2. Диаграмма, описывающая распространение энергии возбуждения по участку ДНК *supF* гена. По оси абсцисс отложены основания и их номера, а по оси ординат — их триплетные и синглетные уровни энергии

Пусть аденин A_{153} поглотил энергию ультрафиолетового кванта. Эта энергия возбуждения может передаться на синглетный уровень цитозина C_{150} с вероятностью $1/2$. И с вероятностью $1/2$ она передастся на синглетный уровень гуанина G_{155} . Пусть аденин A_{154} поглотил энергию ультрафиолетового кванта. Эта энергия возбуждения может передаться на синглетный уровень цитозина C_{150} с вероятностью $1/2$. И с вероятностью $1/2$ она передастся на синглетный уровень гуанина G_{155} .

Обозначим через $W(C_{150}^C)$ количество энергии, которое может передаться на синглетный уровень цитозина C_{150} , тогда

$$W(C_{150}^C) = E_C^C \left[1(C_{150}) + 1(G_{149}) + \frac{1}{2}(A_{148}) + 1(T_{151}) + 1(G_{152}) + \frac{1}{2}(A_{153}) + \frac{1}{2}(A_{154}) \right] = 5,5E_C^C.$$

В скобках указаны основания ДНК, с которых передается соответствующая энергия возбуждения. Таким образом, на синглетный уровень цитозина C_{150} может передаться, энергия, равная $5,5E_C^C$. Эта энергия может передаться на триплетный уровень цитозина C_{150} (обозначим его энергию как E_T^C) и передаться на триплетный уровень тимина T_{151} с вероятностью $1/2$. На триплетный уровень тимина T_{151} передастся энергия, равная $2,75E_T^T$. В результате образования эксимера и тепловой релаксации энергии возбуждения может образоваться циклобутановый димер $C_{150}T_{151}$. Этот димер является холодным пятном ультрафиолетового мутагена.

Для того чтобы оценить значение полученных чисел, мы должны сравнить их с теми же показателями, полученными по той же методике для горячего пятна точно такого же *цис-син* циклобутанового димера СТ.

Почему циклобутановый димер $C_{156}T_{157}$ на участке ДНК, кодирующем *supF* [1], является горячим пятном ультрафиолетового мутагена? Попробуем понять, почему циклобутановый димер $C_{156}T_{157}$ мог привести к образованию 14-ти трансверсий. Чем он отличается от немутагенного циклобутанового димера $C_{150}T_{151}$? Посмотрим, какая возможная энергия возбуждения может передаться на синглетный уровень цитозина C_{156} . Используя предыдущую методику, получим, что на синглетный уровень цитозина C_{156}

может передаваться энергия, равная $4E_C^C$. Эта энергия может передаваться на триплетный уровень цитозина C_{156} , выветив разность энергии. Энергия, равная энергии триплетного уровня цитозина, может передаваться на триплетный уровень тимина T_{157} с вероятностью $1/2$, выветив разность энергии. На триплетный уровень тимина T_{157} может передаваться энергия, равная $2E_T^T$, где через E_T^T обозначена энергия триплетного уровня тимина.

Горячим пятном ультрафиолетового мутагенеза является димер $C_{156}T_{157}$. Поэтому важно узнать, какая энергия может передаваться на основания C_{156} и T_{157} . Посмотрим, какая возможная энергия возбуждения может передаваться на триплетный уровень тимина T_{157} кроме той энергии, которая может передаваться на него с цитозина C_{156} . Можно показать, что энергию, которая может передаваться на триплетный уровень тимина T_{157} , надо дополнить величиной, равной $2E_T^T$.

В результате образования эксимера и тепловой релаксации энергии возбуждения может образоваться циклобутановый димер $C_{156}T_{157}$. На него, как показывает наша оценка, может передаваться энергия возбуждения, равная $4,0 E_T^T$. А на холодное пятно димер $C_{150}T_{151}$ может передаваться энергия возбуждения, равная $2,75 E_T^T$. Как видим, на участок ДНК $C_{156}T_{157}$ может передаваться больше энергии, чем на участок ДНК $C_{150}T_{151}$. Часть энергии пойдет на образование циклобутанового димера, а добавочная энергия может привести к изменениям таутомерных состояний цитозина C_{156} , что может привести к мутациям. Поэтому участок ДНК $C_{156}T_{157}$ и является горячим пятном ультрафиолетового мутагенеза.

Поскольку это вероятностные процессы, посмотрим, какая максимальная суммарная энергия может передаваться на основания C_{150} и T_{151} . Видно, что на цитозин C_{150} и тимин T_{151} может передаваться энергия с семи оснований, а на цитозин C_{156} и тимин T_{157} — с десяти оснований. Мы видим, что хотя и холодное, и горячее пятна — это участки ДНК цитозин и тимин (СТ), но при образовании циклобутанового димера $C_{156}T_{157}$ на входящие в него основания может передаваться гораздо больше энергии, чем на основания, входящие в состав циклобутанового димера $C_{150}T_{151}$. А поскольку остальные, описанные выше, свойства у них одинаковые, то именно это обстоятельство и объясняет “эффект соседа”, т. е. влияние соседних оснований на вероятность мутирования данного основания. Точно так же можно показать, почему циклобутановые пиримидиновые димеры $C_{164}T_{165}$, и $C_{159}C_{160}$ являются горячими пятнами ультрафиолетового мутагенеза. Результаты приведены в табл. 1.

Чаще всего ошибочные основания встраиваются напротив цитозина, а не тимина, хотя горячие пятна УФ-мутагенеза обычно совпадают с циклобутановыми димерами, содержащими и тимин, и цитозин [1, 2]. Было показано, что основной причиной предмутагенных изменений в ДНК является способность оснований ДНК изменять свое таутомерное состоя-

Таблица 1. Горячие и холодные пятна ультрафиолетового мутагенеза, образующиеся на нити участка ДНК, кодирующей супрессорную транспортную РНК *supF* [1] (энергия дается в величинах энергии триплетного уровня тимина E_T^T или в величинах энергии синглетного уровня цитозина E_C^C)

Участок ДНК (циклобутановый димер)	Пятно	Энергия, которая может передаваться на данный сайт ДНК	Количество оснований, с которых энергия может передаваться на данный сайт ДНК	Количество мутаций, образующихся на данном сайте
$C_{150}T_{151}$	холодное	$2,75 E_T^T$	7	0
$C_{156}T_{157}$	горячее	$4,0 E_T^T$	10	14
$C_{164}T_{165}$	горячее	$3,625 E_T^T$	6	8
$C_{159}C_{160}$	горячее	$4 E_C^C$	9	8

ние [5–10]. Известно, что в парах G-C гораздо легче происходит изменение таутомерного состояния, чем в парах A-T [15]. Кроме того, анализ различных предмутагенных таутомерных состояний для пар A-T и G-C показывает, что в парах G-C существенно больший процент возможных новых таутомерных состояний приводит к мутациям замены оснований, чем в парах A-T [6, 8, 10].

Таким образом, анализ горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза показал, что горячими пятнами ультрафиолетового мутагенеза являются те *цис-син* циклобутановые цитозин-тимин, тимин-цитозин или цитозин-цитозиновые димеры, на которые передается больше энергии, чем на такие же *цис-син* циклобутановые димеры цитозин-тимин, тимин-цитозин или цитозин-цитозин. Причиной этого являются соотношение синглетных и триплетных уровней различных оснований и процессы распространения энергии по молекуле ДНК. Добавочная энергия может вызывать изменения таутомерных состояний в основаниях ДНК, входящих в *цис-син* циклобутановые димеры, что, в свою очередь, может быть источником мутаций.

1. Parris C. N., Levy D. D., Jessee J., Seidman M. M. Proximal and distal effects of sequence context on ultraviolet mutational hotspots in a shuttle vector replicated in xeroderma cells // J. Mol. Biol. – 1994. – **236**. – P. 491–502.
2. Canella K. A., Seidman M. M. Mutation spectra in supF: approaches to elucidating sequence context effects // Mutat. Res. – 2000. – **450**. – P. 61–73.
3. Tang M., Shen X., Frank E. G., O'Donnell M., Woodgate R., Goodman M. F. UmuD'(2)C is an error-prone DNA polymerase. *Escherichia coli* pol V // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1999. – **96**. – P. 8919–8924.
4. Tang M., Pham P., Shen X., Taylor J.-S., O'Donnell M., Woodgate R., Goodman M. Roles of *Escherichia coli* DNA polymerase IV and V in lesion-targeted and untargeted SOS mutagenesis // Nature. – 2000. – **404**. – P. 1014–1018.
5. Гребнева Е. А. Механизмы образования потенциальных мутаций при формировании цитозинового димера в результате облучения двухцепочечной ДНК ультрафиолетовым светом // Доп. НАН України. – 2001. – № 7. – С. 165–169.
6. Гребнева Е. А. Мишеный мутагенез, вызванный цитозиновыми димерами и механизм образования мутаций замены оснований при SOS-репликации после облучения двухцепочечной ДНК ультрафиолетовым светом // Докл. НАН Украины. – 2001. – № 8. – С. 183–189.
7. Гребнева Е. А. Природа и возможные механизмы образования потенциальных мутаций, возникающих при появлении тиминовых димеров после облучения двухцепочечной ДНК ультрафиолетовым светом // Биополимеры и клетка. – 2002. – **18**, № 1. – С. 205–218.
8. Гребнева Е. А. Молекулярные механизмы образования мутаций замены оснований при пострепликативной SOS-репарации двухцепочечной ДНК, содержащей тиминовые димеры // Там же. – 2001. – **17**, № 6. – С. 487–500.
9. Grebneva H. A. Nature and possible mechanisms formation of potential mutations arising at emerging of thymine dimers after irradiation of double-stranded DNA by ultraviolet light // J. Mol. Struct. – 2003. – **645**. – P. 133–143.
10. Grebneva H. A. One of mechanisms of targeted substitution mutations formation at SOS-replication of double-stranded DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers // Environ. Mol. Mutagen. – 2006. – **47**. – P. 733–745.
11. Векшин Н. Л. Перенос возбуждения в макромолекулах: критическое рассмотрение вопроса. – Москва: ВИНТИ, 2007. – 174 с.
12. Lamola A. A., Gamane T. Sensitized photodimerization of thymine in DNA // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1967. – **58**, No 2. – P. 443–446.
13. Бартлорп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. – Москва: Мир, 1978. – 446 с.
14. Гребнева Е. А. Модель механизма образования горячих и холодных пятен ультрафиолетовых мишеных мутаций: Материалы V Междунар. науч. конф. “Физико-химические основы формирования и модификации микро- и наноструктур”, 12–14 окт. 2011 г. – Харьков: Науч. физ.-технол. центр МОНМС та НАН України, 2011. – С. 333–337.

15. Novak M. J., Lapinski L., Kwiatkowski J. S., Leszczynski J. Molecular structure and infrared spectra of the DNA bases and their derivatives: theory and experiment // Computational chemistry: reviews of current trends / J. Leszczynski (Ed). – River Edge, NJ: World Scientific, 1997. – 2. – P. 140–182.

Донецкий физико-технический институт
и.м. А. А. Галкина НАН Украины

Поступило в редакцию 26.03.2012

О. А. Гребнева

Природа і механізми формування гарячих і холодних плям ультрафіолетового мутагенезу

На сьогодні немає пояснення природи та механізмів утворення гарячих і холодних плям мішенних мутацій, що утворюються після опромінювання молекули ДНК ультрафіолетовим промінням. Розроблюється полімеразно-таутомерна модель ультрафіолетового мутагенезу. Запропоновано модель механізму утворення таких гарячих і холодних плям ультрафіолетового мутагенезу, що утворюються навпроти цис-син циклобутанових пиримидинових димерів. Показано, що гарячими плямами ультрафіолетового мутагенезу є такі цис-син циклобутанові цитозин-тимин, тимин-цитозинові і цитозин-цитозинові димери, на які переходить більше енергії, ніж на такі цис-син циклобутанові цитозин-тимин, тимин-цитозинові і цитозин-цитозинові димери, які є холодними плямами ультрафіолетового мутагенезу. Причиною утворення гарячих і холодних плям ультрафіолетового мутагенезу є співвідношення між синглетними і триплетними рівнями основ ДНК та процеси поширення енергії в молекулі ДНК. Додаткова енергія може призвести до зміни таутомерних станів в основі ДНК, таких, які є частиною цис-син циклобутанових пиримидинових димерів. Це може викликати мішенні мутації.

H. A. Grebneva

Nature and mechanisms of formation of hot and cold spots of ultraviolet mutagenesis

The nature of hot and cold spots of ultraviolet mutagenesis has not been yet explained satisfactorily. A polymerase – tautomer model of ultraviolet mutagenesis is developed, and a model of formation of hot and cold spots of ultraviolet mutagenesis is proposed. It is shown that the hot spots of ultraviolet mutagenesis are those cis-syn cyclobutane cytosine-thymine and thymine-cytosine dimers, on which a more energy is transferred than that on such cis-syn cyclobutane cytosine-thymine and thymine-cytosine dimers that are cold spots of ultraviolet mutagenesis. The causes for the formation of hot and cold spots of ultraviolet mutagenesis are the correlation between singlet and triplet energy levels of the DNA bases and the energy transfer in DNA molecules. The extra energy can result in the tautomer change of DNA bases that are a part of the cis-syn cyclobutane pyrimidine dimers. This can be a source of targeted mutations.

Інформація для авторів журналу «Доповіді Національної академії наук України»

Редакція журналу приймає для публікації повідомлення, що мають *мотивоване представлення* дійсного члена або члена-кореспондента НАН України з відповідної спеціальності. До статті додається супровідний лист організації, в якій виконано дослідження.

Журнал друкує не більше *трьох повідомлень одного автора* на рік. Повідомлення дійсних членів та членів-кореспондентів НАН України друкуються без обмежень.

У разі додаткового рецензування та переробки статті датою надходження вважається дата одержання редакцією її остаточного тексту. Прохання редакції про переробку не означає, що стаття прийнята до друку; після переробки вона знову розглядається редколегією. При відмові в публікації роботи редколегія залишає за собою право не повертати автору один екземпляр статті.

Повідомлення публікуються українською *або* російською мовою. Автор зазначає рубрику, в якій має публікуватися повідомлення, індекс за Універсальною десятковою класифікацією; в кінці повідомлення наводить повну назву організації, де виконане дослідження, свою поштову і *електронну* адресу та номер телефону. Кожний примірник повідомлення має бути підписаний автором.

Обсяг повідомлення не повинен перевищувати *шести сторінок журналу* (включаючи список літератури — до 15 поз., таблиці, рисунки — до 4).

Фізичні величини наводяться в одиницях СІ.

Наукова термінологія повинна відповідати «Російсько-українському словнику наукової термінології» (Київ: Наук. думка. — Т. 1–3. — 1994, 1996, 1998).

Резюме українською, російською та англійською мовами *подаються на окремій сторінці* (обов'язково вказати написання прізвищ та назву статті трьома мовами).

Рукопис та рисунки (*на окремій сторінці*) слід надсилати у *двох* екземплярах. Текст має бути підготовлений методом комп'ютерного набору та роздрукований на білому папері через 1,5 інтервала на одній стороні аркуша, розмір шрифту 14 пт.

Електронну версію статті автор надсилає на вимогу редакції безпосередньо при підготовці відповідного номеру журналу до друку (термін узгоджується в редакції). Файл статті подається у форматі **LaTeX2ε** та з результатом трансляції у dvi- чи pdf-файл. Текст у файлі повинен точно відповідати надрукованому тексту. Рисунки потрібно записувати окремими файлами у вихідному форматі та у форматі .eps. Для імен файлів використовувати зрозумілі короткі назви, набрані *латинськими* літерами (для статті — прізвище першого автора, для рисунків — gys1, gys2 і т.д.). Статті, що не містять математичних формул, можна подавати в форматі **Word**.

Список літератури складається в порядку посилання в тексті; оформлення літературних джерел повинно відповідати вимогам журналу (див. списки літератури в останніх номерах журналу).

Коректура статей авторам не надсилається.

Адреса редакції: Україна, 01601, Київ, вул. Терещенківська, 3, тел. (044) 235-12-16

Автор може передплатити номер журналу, в якому надруковано його статтю, у відділенні зв'язку «Укрпошти». Наш індекс 74137.