



**SHEVCHENKO SCIENTIFIC SOCIETY
DEPARTMENT OF IVANO-FRANKIVSK**

**PRECARPATHIAN BULLETIN
OF THE SHEVCHENKO
SCIENTIFIC SOCIETY**

Number

1(13)-2011

Ivano-Frankivsk
2011

**НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО ім. ШЕВЧЕНКА
ІВАНО-ФРАНКІВСЬКИЙ ОСЕРЕДОК**

**ПРИКАРПАТСЬКИЙ
ВІСНИК НТШ**

Число

1(13)-2011

Івано-Франківськ
2011

ПРИКАРПАТСЬКИЙ ВІСНИК НТШ

Головний редактор – д.т.н. В. М. Мойсишин

Число

У випусках серії «Число» публікуються наукові матеріали за напрямками:

- Математика та механіка
- Фізика і хімія твердого тіла
- Нафтогазова справа
- Інформаційні технології
- Економіка та організація виробництва

Редактори: д.т.н., чл.-кор. НАНУ Є.І.Крижанівський, д.ф.-м.н, акад. НАНУ А.А.Мартинюк (Київ), д.ф.-м.н, чл.-кор. НАНУ Б.К.Остафійчук, д.х.н. Д.М.Фреїк

Відповідальні секретарі: к.ф.-м.н. М.М.Осипчук, к.е.н. Т.М.Орищин, О.Л.Соколов

Редакційна колегія:

к.ф.-м.н. С.І.Гургула, д.ф.-м.н. А.Ю.Лучка (Київ), д.ф.-м.н., акад. НАНУ М.О.Перестюк (Київ), д.ф.-м.н., чл.-кор. НАНУ Б.Й.Пташник (Львів), д.ф.-м.н. О.М.Станжицький (Київ), д.ф.-м.н. С.І.Трофимчук (Талька, Чилі);

д.ф.-м.н. Д.І.Боднар (Тернопіль), д.ф.-м.н. А.В.Загороднюк, д.ф.-м.н. О.В.Лопушанський (Львів), д.ф.-м.н. А.М.Плічко (Кіровоград), к.ф.-м.н. Я.І.Савчук, д.ф.-м.н., чл.-кор. НАНУ Ю.С.Самойленко (Київ);

д.ф.-м.н. О.Д.Артемович, д.ф.-м.н. Т.О.Банах (Львів), д.ф.-м.н. Р.І.Григорчук (Техас, США), д.ф.-м.н. Ю.В.Дрозд (Київ), д.ф.-м.н. М.М.Зарічний (Львів), д.ф.-м.н. В.К.Маслюченко (Чернівці), к.ф.-м.н. О.Р.Никифорчин, д.т.н. Ю.Є.Обжерін (Севастополь), д.ф.-м.н. А.П.Петравчук (Київ), д.ф.-м.н. А.Н.Хомченко (Херсон), д.ф.-м.н., чл.-кор. НАНУ В.В.Шарко (Київ);

д.ф.-м.н. Ю.В.Козаченко (Київ), д.ф.-м.н. Б.І.Копитко (Львів), д.ф.-м.н. М.М.Леоненко (Кардіф, Великобританія), д.ф.-м.н. В.І.Масол (Київ), д.ф.-м.н., чл.-кор. НАНУ М.О.Портенко (Київ);

д.т.н. В.І.Векерик, д.т.н. І.В.Кузьо (Львів), д.т.н. М.В.Лисканич, д.ф.-м.н. Н.В.Нікітіна (Київ), д.ф.-м.н. Г.Т. Сулим (Львів), к.ф.-м.н. І.В.Цідило;

д.ф.-м.н. М.О.Галушак, д.ф.-м.н. Г.А.Ільчик (Львів), д.ф.-м.н. І.А.Климишин, д.ф.-м.н. Ю.А.Куницький (Київ), д.т.н. П.І.Мельник, д.ф.-м.н. М.А.Рувінський, д.ф.-м.н., чл.-кор. НАНУ І.В.Стасюк (Львів), д.ф.-м.н. З.В.Стасюк (Львів), д.ф.-м.н. В.О.Шендеровський (Київ);

д.х.н. О.І.Аксментьева (Львів), д.х.н. В.В.Лобанов (Київ), д.х.н. І.Ф.Миронюк, д.т.н. Г.О.Сіренко, д.х.н. В.М.Томашик (Київ), д.х.н. О.В.Шийчук;

д.т.н. О.О.Акульшин (Київ), д.т.н. В.С.Бойко, д.т.н. В.М. Дорошенко (Київ), д.т.н. Ю.О.Зарубін (Київ), д.т.н. Р.М.Кондраг, д.т.н. Я.С.Коцкулич, д.т.н. М.А.Мислюк, д.т.н. Б.І.Навроцький, д.т.н. В.М.Світлицький (Київ), д.т.н. Б.О.Чернов, д.т.н. Р.С.Яремійчук;

д.т.н. Р.М.Говдяк (Київ), д.т.н. В.Я.Грудз, д.т.н. О.Т.Драганчук (Київ), д.т.н. О.М.Карпаш, д.т.н. Б.В.Копей, д.т.н. Ю.Д.Петрина, д.т.н. М.Д.Середюк, д.т.н. Д.Ф.Тимків, д.т.н. Л.С.Шлапак;

д.т.н. Б.І.Адасовський, д.т.н. М.І.Горбійчук, д.т.н. Л.М.Заміховський, д.т.н. В.П.Калявін (Санкт-Петербург, Росія), д.т.н. І.С.Кісіль, д.т.н. В.С.Костишин, д.т.н. Л.С.Петришин, д.т.н. Г.Н.Семенцов, д.т.н. С.Ф.Теленик (Київ), д.т.н. В.М.Юрчишин;

д.е.н. І.Ф.Баланюк, д.е.н. І.С.Благуно, д.е.н. М.О.Данилюк, д.е.н. О.О.Лапко (Київ), д.е.н. М.Д.Романюк, д.е.н. В.І.Савич, д.е.н. І.Г.Ткачук.

ПРИКАРПАТСЬКИЙ
ВІСНИК
НАУКОВОГО
ТОВАРИСТВА
ім. ШЕВЧЕНКА
1(13)-2011

Науковий журнал
Видається у чотирьох
серіях
**ЧИСЛО, СЛОВО,
ДУМКА, ПУЛЬС**
(по одному випуску
кожної серії щороку)

Заснований у 2008 році
Реєстраційне свідоцтво
КВ № 14628-3599
від 10 жовтня 2008 р.
видане Міністерством
юстиції України

ЗАСНОВНИКИ:

Івано-Франківський
осередок Наукового
товариства ім. Шевченка

Прикарпатський
національний університет
імені Василя Стефаника

Івано-Франківський
національний технічний
університет нафти і газу

Івано-Франківський
національний медичний
університет

ЗМІСТ

МАТЕМАТИКА ТА МЕХАНІКА

- І. Д. Пукальський, І. М. Ісарюк**
Крайова задача з нелокальною умовою
та задача оптимального керування для
лінійних параболічних рівнянь з
виродженням 9
- В. М. Лучко, М. І. Матійчук**
Задача Коші для параболічної системи
псевдодиференціальних рівнянь з
імпульсним впливом 23
- С. І. Горгула, Р. І. Собкович**
Стійкість розв'язків систем з імпульсним
збуренням 30
- І. В. Федак**
Про один апроксимаційний метод
наближеного розв'язування лінійних
інтегральних рівнянь Вольтерра 36
- А. М. Краснодембський**
Періодичність розв'язків системи двох
нелінійних диференціальних рівнянь
третього порядку 39
- Я. І. Савчук**
Побудова приєднаної цілої кривої з
наперед заданою множиною дефектних
векторів 43
- A. I. Bandura**
The properties of entire functions of bound-
ed value L -distribution in direction 50

АДРЕСА РЕДАКЦІЇ

76025
м. Івано-Франківськ,
вул. Шевченка, 79
Івано-Франківський
осередок Наукового
товариства ім. Шевченка
тел. (380-3422) 4-21-23
e-mail: math@nung.edu.ua

Відповідальність за
достовірність наведених
у статтях даних несуть
автори публікацій

Передрук – тільки
з дозволу редакції

Друкується за ухвалою
Президії Івано-
Франківського осередку
Наукового товариства
ім. Шевченка

© Івано-Франківський
осередок НТШ, 2011

© Видавництво “Плай”
ЦІТ Прикарпатського
національного універ-
ситету імені Василя
Стефаніка

В. М. Мойсишин, В. І. Векерик
Повна система рівнянь умовної
рівноваги ділянок бурильної колони
у свердловині орієнтованій довільно
у просторі 56

М. І. Сєров, М. М. Сєрова
Симетрійні методи в математичній
фізиці 87

ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА

**Д. М. Фреїк, М. А. Лоп’янок,
І. К. Юрчишин, Ю. В. Лисюк,
О. Л. Соколов**
Наноструктуровані термоелектричні
матеріали (огляд) 105

**Д. М. Фреїк, М. О. Галушак,
А. І. Ткачук, Ю. В. Лисюк,
О. С. Криницький**
Методи діагностики термоелектричних
параметрів твердих тіл (огляд) 137

П. І. Мельник
Роль $\alpha \leftrightarrow \gamma$ перетворень в залізі у форму-
ванні на ньому поверхневого шару ... 180

**В. М. Чобанюк, Т. О. Паращук,
Г. Я. Гургула, Н. Д. Фреїк**
Власні точкові дефекти і фізико-хімічні
властивості цинк телуриду 193

Л. В. Туровська
Кристалохімія дефектної підсистеми нес-
техіометричного плюмбум телуриду .211

НАФТОГАЗОВА СПРАВА

В. С. Бойко, Б. М. Міщук, Т. С. Веклин

Узгодження роботи нафтового покладу і свердловини в часі за умов газліфтного фонтанування при проектуванні та експлуатації свердловини 230

С. І. Криштопа, Л. І. Криштопа

Дослідження надійності турбокомпресорів дизельних двигунів нафтогазового технологічного транспорту та бурових установок за низьких температур навколишнього середовища 237

І. М. Дмитрах, Б. І. Колодій, О. Л. Білий, Р. Л. Лещак

Оцінка кінетики локалізованих корозійних пошкоджень зварних з'єднань труб елементів пароводяного тракту 243

Р. М. Матвієнко

Класифікація типів відмов газоперекачувального обладнання на компресорних станціях “ДК Укртрансгаз” 251

О. Л. Білий, Р. Л. Лещак

Чисельна оцінка густини корозійного струму на внутрішній поверхні трубчастих зварних з'єднань сталей 12Х1МФ–Х18Н10Т 256

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ

М. П. Возняк, Г. М. Кривенко, Л. В. Возняк

Прогнозування об'ємів втрат нафти у випадку виникнення аварійної ситуації 264

Р. Й. Ріпецький, В. М. Сеничак

Інтерполяції просторових даних на основі поверхонь для програмних засобів геоінформаційних систем (ГІС) 273

Л. О. Сав'юк

Системні підходи та шляхи оптимального впровадження систем
дистанційного навчання у вищу освіту України 280

І. М. Гураль, М. М. Осипчук, Л. Р. Смолівик

Дослідження зв'язку між академічною успішністю студентів
ІФНТУНГ та результатами вступної кампанії 2010 року 285

ІНФОРМАЦІЯ

Відомості про авторів 290

Математика та механіка

УДК 517.956

КРАЙОВА ЗАДАЧА З НЕЛОКАЛЬНОЮ УМОВОЮ ТА ЗАДАЧА ОПТИМАЛЬНОГО КЕРУВАННЯ ДЛЯ ЛІНІЙНИХ ПАРАБОЛІЧНИХ РІВНЯНЬ З ВИРОДЖЕННЯМ

І. Д. Пукальський, І. М. Ісарюк

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича;
58012, м. Чернівці, вул. Коцюбинського, 2; тел. +380 (372) 58-48-64;
e-mail: difeg@chnu.cv.u; kafedra_DR@mail.ru*

У просторах класичних функцій зі степеневою вагою доведено існування та єдиність розв'язку першої параболічної крайової задачі з інтегральною умовою за часовою змінною для лінійного диференціального рівняння із степеневими особливостями на координатних площинах. Одержаний результат використано для дослідження задач оптимального керування.

Ключові слова: *нелокальна крайова задача, послідовні наближення, резольвента, оптимальне керування, лінійне параболічне рівняння з виродженням.*

Вивчення крайових задач для лінійних рівнянь із частинними похідними та задач керування систем, що описуються крайовими задачами з нелокальними умовами для лінійних рівнянь із частинними похідними проводилося багатьма авторами. Зокрема, дослідженню таких задач присвячені праці [1-11].

Нелокальним крайовим задачам присвячено праці [12-17]. Необхідність вивчення крайових задач для диференціальних рівнянь з нелокальними умовами стимулювалася різними обставинами, зокрема розв'язання зворотних задач для рівнянь теплопровідності [16], задач із теорії фізики плазми [17].

У цій статті розглядається параболічна крайова задача з інтегральною умовою за часовою змінною для лінійного диференціального рівняння із степеневими особливостями на координатних площинах $x_i = 0$, $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, довільного порядку. Одержаний результат використано для дослідження задач оптимального керування із внутрішнім і фінальним керуваннями. Критерій якості задається сумою інтегралів.

Постановка задачі та основні обмеження. Нехай (x_1, \dots, x_n) координати точки x простору \mathbb{R}^n , $\Omega_j \equiv \{x, x \in \mathbb{R}^n, x_j = 0\}$, D обмежена область з множини $\{x \in \mathbb{R}^n | x_j \geq 0, j \in \{1, \dots, n\}\}$ з межею ∂D така, що $\partial D \cap \Omega_j \neq \emptyset, j \in \{1, \dots, n\}$, t_0 , T – довільно фіксовані додатні числа, $t_0 < T$. Розглянемо в області $Q = [0, T] \times D$ задачу знаходження функцій (u, p, q) , на яких функціонал

$$I(p, q) = \int_0^T dt \int_D F_1(t, x; u(t, x; p(t, x), q(x)), p(t, x)) dx + \int_D F_2(x; u(T, x; p(T, x), q(x)), q(x)) dx \quad (1)$$

досягає мінімуму в класі обмежених функцій $(p, q) \in V, V = \{(p, q), p \in C^\alpha(Q) | p_1(t, x) \leq p \leq p_2(t, x); q \in C^{2+\alpha}(D), q_1(x) \leq q(x) \leq q_2(x), \alpha \in (0, 1)\}$, із яких $u(t, x; p(t, x), q(x))$ задовольняє при $(t, x) \in Q^{(0)} = Q \setminus Q_{(0)}$, $Q_{(0)} = \{(t, x) \in Q, |t = t_0, x \in D\}$ рівняння

$$(Lu)(t, x) \equiv \left[\partial_t - \sum_{ij=1}^n A_{ij}(t, x) \partial_{x_i} \partial_{x_j} - \sum_{i=1}^n A_i(t, x) \partial_{x_i} - A_0(t, x) \right] u = f(t, x; p(t, x)), \quad (2)$$

нелокальну умову за часовою змінною

$$u(0, x; p(0, x), q(x)) + \int_0^T b(\tau, x) u(\tau, x; p(\tau, x), q(x)) d\tau = \varphi(x; q(x)) \quad (3)$$

і на бічній межі $\Gamma = [0, T] \times \partial D$ крайову умову

$$\lim_{x \rightarrow z \in \partial D} [u(t, x; p(t, x), q(t)) - \psi(t, x)] = 0. \quad (4)$$

Нехай $a^{(1)}, a^{(2)}$ – довільні фіксовані дійсні числа. Позначимо через $s_1(a^{(1)}, t) = |t - t_0|^{a^{(1)}}$ при $|t - t_0| \leq 1, t \in [0, T]$; $s_1(a^{(1)}, t) = 1$ при $|t - t_0| \geq 1$; $s_2(a^{(2)}, x_i) = x_i^{a^{(2)}}$ при $0 \leq x_i \leq 1$; $s_2(a^{(2)}, x_i) = 1$ при $x_i \geq 1$; $p(a^{(2)}, x) = \min\{s_2(a^{(2)}, x_1), \dots, s_2(a^{(2)}, x_n)\}$; $s(a; P) = s_1(a^{(1)}, t) p(a^{(2)}, x)$, $a = (a^{(1)}, a^{(2)})$. Нехай $(x_1^{(1)}, \dots, x_i^{(1)}, \dots, x_n^{(1)})$ – координати точки $x^{(1)}$ області $\bar{D} \equiv D \cup \partial D$, $(x_1^{(1)}, \dots, x_{i-1}^{(1)}, x_i^{(1)}, x_{i+1}^{(1)}, \dots, x_n^{(1)})$ – координати точки $x^{(2)}$ області \bar{D} , $P(t, x)$, $P_1(t^{(1)}, x^{(1)})$, $P_2(t^{(2)}, x^{(2)})$, $H_i(t^{(1)}, x^{(2)})$ довільні точки із $\bar{Q} = [0, T] \times \bar{D}$, $\beta_i^{(1)}, \beta_i^{(2)}$ – довільні фіксовані дійсні числа, $\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}, l$ – додатні фіксовані дійсні числа.

Визначимо функціональні простори, в яких буде вивчатися задача (1)-(4).

$C^l(\gamma, \beta, a; Q)$ – множина функцій $u: (t, x) \in \bar{Q}$, які мають неперервні частинні похідні в області $Q^{(0)}$ вигляду $\partial_i^j \partial_x^k u$, $2j + |k| \leq [l]$, для

яких скінченна норма $\|u; \gamma, \beta; a; Q\|_l = \|u; \gamma, \beta; a; Q\|_{[l]} + \langle u; \gamma, \beta; a; Q \rangle_l$, де, наприклад,

$$\begin{aligned} \|u; \gamma, \beta; a; Q\|_0 &= \sup_Q |u| \equiv \|u; Q\|_0, \\ \langle u; \gamma, \beta; a; Q \rangle_l &= \sum_{2j+|k|=|l|} \sum_{i=1}^n \sup_{(P_i, H_i) \in \bar{Q}} |x_i^{(1)} - x_i^{(2)}|^{-\{l\}} \times \\ &\times |\partial_i^j \partial_x^k u(P_1) - \partial_i^j \partial_x^k u(H_i)| s((2j+|k|+a+\{l\})\gamma; \tilde{P}_1) s_2(-\{l\}\beta_i^{(2)}, \tilde{x}_i) \times \\ &\times \prod_{m=1}^n s_2(-k_m \beta_m^{(2)}, \tilde{x}_m) + \sum_{2j+|k|=|l|} \sum_{i=1}^n \sup_{(P_2, H_i) \in \bar{Q}} |t^{(1)} - t^{(2)}|^{-\{\frac{l}{2}\}} \times \\ &\times |\partial_i^j \partial_x^k u(H_i) - \partial_i^j \partial_x^k u(P_2)| s((2j+|k|+a+\{l\})\gamma; \tilde{P}_2) \prod_{m=1}^n s_2(-k_m \beta_m^{(2)}, \tilde{x}_m) \end{aligned}$$

Тут позначено $s_2(a, \tilde{x}_i) = \min \{s_2(a, x_i^{(1)}), s_1(a, x_i^{(2)})\}$,
 $s(a, \tilde{P}_v) = \min \{s(a, P_v), s(a, H_i)\}$, $v \in \{1, 2\}$.

Щодо задачі (1)–(4) вважаємо виконаними умови:

1. Для довільного вектора $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ виконується нерівність

$$\pi_1 |\xi|^2 \leq \sum_{ij=1}^n s_1(\beta_i^{(1)} + \beta_j^{(1)}; t) s_2(\beta_i^{(2)}; x_i) s_2(\beta_j^{(2)}; x_j) A_{ij}(P) \xi_i \xi_j \leq \pi_2 |\xi|^2, \quad (5)$$

π_1, π_2 – фіксовані додатні сталі і $s_1(\beta_i^{(1)} + \beta_j^{(1)}; t) s_2(\beta_i^{(2)}; x_i) s_2(\beta_j^{(2)}; x_j) A_{ij} \in C^\alpha(\gamma, \beta; 0; Q)$,
 $s_1(\mu_i^{(1)}; t) s_2(\mu_i^{(2)}; x_i) A_i \in C^\alpha(\gamma, \beta; 0; Q)$, $\rho(\mu_0^{(2)}; x) s_1(\mu_0^{(1)}; t) A_0 \in C^\alpha(\gamma, \beta; 0; Q)$, $\mu_i^{(v)} \geq 0$, $v \in \{1, 2\}$, $i \in \{0, 1, \dots, n\}$ і виконуються нерівності

$$\int_0^T |b(\tau, x)| e^{-\lambda \tau} d\tau \leq \lambda_0 < 1, \quad A_0(t, x) + \lambda < 0 \quad \text{для } (t, x) \in \bar{Q}.$$

2. Функції $p_v \in C^\alpha(Q)$, $q_v \in C^{2+\alpha}(D)$, $v \in \{1, 2\}$, $b \in C^{2+\alpha}(D)$,
 $f \in C^\alpha(\gamma, \beta; \mu_0; Q)$, $\varphi \in C^{2+\alpha}(\tilde{\gamma}, \tilde{\beta}; 0; D)$, $\tilde{\gamma} = (0, \gamma^{(2)})$, $\psi(t, x) \in C^{2+\alpha}(\gamma, \beta; 0; Q)$,
 $\gamma^{(v)} = \max \left(\max_i (1 + \beta_i^{(v)}), \max_i (\mu_i^{(v)} - \beta_i^{(v)}), \frac{\mu_0^{(v)}}{2} \right)$, межа $\partial D \in C^{2+\alpha}$, $\psi(0, x) +$

$$\int_0^T b(\tau, x) \psi(\tau, x) d\tau = \varphi(x, q(x)) \quad \text{для } x \in \partial D, \quad \alpha \in (0, 1), \quad \gamma = (\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}),$$

$$\mu_i = (\mu_i^{(1)}, \mu_i^{(2)}), \quad \mu_0 = (\mu_0^{(1)}, \mu_0^{(2)}).$$

3. Функції $F_1(t, x; u(t, x; p(t, x), q(x)), p(t, x))$,
 $F_2(x; u(T, x; p(T, x), q(x)), q(x))$ як складені функції змінних (t, x) та x належать відповідно до просторів $C^\alpha(Q)$, $C^\alpha(D)$. Крім того, функції $f(t, x; p(t, x))$, $F_1(t, x; u(t, x; p(t, x), q(x)), p(t, x))$, $\varphi(x, q(x))$,
 $F_2(x; u(T, x; p(T, x), q(x)), q(x))$ мають гельдерові похідні другого порядку за аргументами (u, p, q) , неперервні як складені функції змінних (t, x) та x .

Правильна така теорема.

Теорема 1. Нехай виконані умови 1, 2. тоді для довільних $(p, q) \in V$ існує єдиний розв'язок задачі (2)-(4) із простору $C^{2+\alpha}(\gamma, \beta; 0; Q)$ і справеджується оцінка

$$\|u; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} \leq c \left(\|\varphi; \bar{\gamma}, \bar{\beta}; 0; D\|_{2+\alpha} + \|f; \gamma, \beta; \mu_0; Q\|_{\alpha} + \|\psi; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} \right). \quad (6)$$

Для дослідження задачі (2)-(4) встановимо спочатку коректну розв'язність послідовності допоміжних крайових задач з гладкими коефіцієнтами, граничним значенням послідовності розв'язків яких буде розв'язок задачі (2)-(4).

Оцінка розв'язків крайових задач з гладкими коефіцієнтами

Нехай $Q_m = Q \cap \{(t, x) \in Q | s_1(1, t) \geq m_1^{-1}, s_2(1, x_i) \geq m_2^{-1}\}$, $m = (m_1, m_2)$, $m_1 \geq 1$, $m_2 \geq 1$ – послідовність областей, яка при $m_1 \rightarrow \infty$, $m_2 \rightarrow \infty$ збігається до $Q^{(0)}$. Розглянемо в області Q задачу знаходження розв'язків рівняння

$$\begin{aligned} (L_1 u_m)(t, x) &= \left[\partial_t - \sum_{ij=1}^n a_{ij}(t, x) \partial_{x_i} \partial_{x_j} - \sum_{i=1}^n a_i(t, x) \partial_{x_i} - a_0(t, x) \right] u_m(t, x) = \\ &= f_m(t, x, p(x)), \end{aligned} \quad (7)$$

які задовольняють нелокальну умову

$$u_m(0, x) + \int_0^T b(\tau, x) u_m(\tau, x) d\tau = \varphi(x, q(x)) \quad (8)$$

і крайову умову

$$\lim_{x \rightarrow z \in \partial D} [u_m(t, x) - \psi_m(t, x)] = 0. \quad (9)$$

Тут коефіцієнти a_{ij} , a_i , a_0 і функції f_m , φ_m , ψ_m при $(t, x) \in Q_m$ співпадають з A_{ij} , A_i , A_0 і f , φ , ψ відповідно, а при $(t, x) \in Q \setminus Q_m$ є продовженням зі збереженням норми і гладкості [18, ст.82].

Встановимо оцінку розв'язків допоміжних крайових задач. розглянемо крайову задачу

$$((L_1 - \lambda)v_m)(t, x) = f_m e^{\lambda t}, \quad (10)$$

$$v_m(0, x) = \varphi_m, \quad \lim_{x \rightarrow z \in \partial D} [v_m(t, x) - \psi_m(t, x) e^{\lambda t}] = 0, \quad (11)$$

де λ задовольняє умову 1.

Знайдемо оцінку похідних розв'язку $v_m(t, x)$. Введемо в просторі $C^{2+\alpha}(Q)$ норму $\|v_m; \gamma, \beta; a; Q\|_{2+\alpha}$, еквівалентну при кожному фіксованому (m_1, m_2) гельдеровій нормі, яка визначається так само, як і $\|u; \gamma, \beta; a; Q\|_{2+\alpha}$, тільки замість функції $s_1(a^{(1)}, t)$, $s_2(a^{(2)}, x_i)$, $p(a^{(2)}, x)$ беремо відповідно $d_1(a^{(1)}, t)$, $d_2(a^{(2)}, x_i)$, $d_3(a^{(2)}, x)$, де $d_1(a^{(1)}, t) = \max(s_1(a^{(1)}, t), m_1^{-a^{(1)}})$ при $a^{(1)} \geq 0$ і $d_1(a^{(1)}, t) = \min(s_1(a^{(1)}, t), m_1^{-a^{(1)}})$ при

$a^{(1)} < 0$; $d_2(a^{(2)}, x_i) = \max(s_2(a^{(2)}, x_i), m_2^{-a^{(2)}})$ при $a^{(2)} \geq 0$ і $d_2(a^{(2)}, x_i) = \min(s_2(a^{(2)}, x_i), m_2^{-a^{(2)}})$ при $a^{(2)} < 0$; $d_3(a^{(2)}, x) = \min(\rho(a^{(2)}, x), m_2^{-a^{(2)}})$ при $a^{(2)} < 0$ і $d_3(a^{(2)}, x) = \max(\rho(a^{(2)}, x), m_2^{-a^{(2)}})$ при $a^{(2)} \geq 0$; $d(\gamma; P) = d_1(\gamma^{(1)}; t)d_3(\gamma^{(2)}; x)$.

Правильна теорема.

Теорема 2. Нехай v_m – класичний розв’язок задачі (10), (11) в області Q і виконані умови 1, 2. Тоді для v_m правильна нерівність

$$|v_m| \leq \max\{\|\varphi_m; D\|_0, \|f_m e^{\lambda t} (-\lambda - a_0)^{-1}; Q\|_0, \|\psi_m e^{\lambda t}; Q\|_0\}. \quad (12)$$

Доводиться ця теорема за схемою доведення теореми 2.1 із [19, ст.22], тобто береться функція $v_m(t, x)$ і аналізуються всі можливі розміщення її додатного максимуму і від’ємного мінімуму.

Позначимо через $Z_m(t, x, \tau, \xi)$ функцію Гріна першої крайової задачі [19, ст.469]

$$((L_1 - \lambda)v_m)(t, x) = 0, \quad v_m(0, x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow z \in \partial D} v_m(t, x) = 0, \quad (13)$$

Правильна така теорема.

Теорема 3. Якщо виконані умови 1, 2, то існує єдиний розв’язок задачі (7)-(9) в просторі $C^{2+\alpha}(Q)$ для якого правильна оцінка

$$|u_m| \leq c(\|\varphi_m; D\|_0, \|f_m e^{\lambda t}; Q\|_0, \|\psi_m e^{\lambda t}; Q\|_0). \quad (14)$$

Доведення. Зробимо в задачі (7)-(9) заміну

$$u_m(t, x) = v_m(t, x)e^{-\lambda t},$$

де λ задовольняє умову 2. Одержимо задачу знаходження розв’язків рівняння (10), які задовольняють нелокальну умову

$$v_m(0, x) + \int_0^T b(\tau, x)e^{-\lambda\tau} v_m(\tau, x) d\tau = \varphi_m(x) \quad (15)$$

і крайову умову

$$\lim_{x \rightarrow z \in \partial D} [v_m(t, x) - \psi_m(t, x)e^{\lambda t}] = 0. \quad (16)$$

Розв’язок задачі (10), (15), (16) шукаємо у вигляді

$$v_m(t, x) = \omega_m(t, x) + \int_D Z_m(t, x, 0, \xi) v_m(0, \xi) d\xi, \quad (17)$$

де $\omega_m(t, x)$ – розв’язок задачі (10), (11). Задовольняючи нелокальну умову (15), маємо

$$\begin{aligned} v_m(0, x) &= \int_0^T b(\tau, x)e^{-\lambda\tau} d\tau \int_D Z_m(\tau, x, 0, \xi) v_m(0, \xi) d\xi = \\ &= - \int_0^T b(\tau, x) \omega_m(\tau, x) e^{-\lambda\tau} d\tau \equiv F(x). \end{aligned} \quad (18)$$

Розв’язок інтегрального рівняння (18) шукаємо методом послідовних наближень. Рекурентні співвідношення для послідовних наближень мають вигляд

$$v_m^{(k)}(0, x) + \int_0^T b(\tau, x) e^{-\lambda\tau} d\tau \int_D Z_m(\tau, x, 0, \xi) v_m^{(k-1)}(0, \xi) d\xi = F(x),$$

$$v_m^{(0)}(0, x) = F(x), \quad k \in \{1, 2, \dots\}.$$

Оскільки $Z_m(\tau, x, 0, \xi) \geq 0$ і $\int_D Z_m(t, x, 0, \xi) d\xi \leq 1$, то

$$\int_0^T |b(\tau, x)| e^{-\lambda\tau} d\tau \int_D Z_m(\tau, x, 0, \xi) d\xi \leq \lambda_0 < 1.$$

Оцінюючи різниці між послідовними наближеннями, одержимо

$$|v_m^{(k)}(0, x) - v_m^{(k-1)}(0, x)| \leq \lambda_0^k \|F; D\|_0.$$

Отже, розв'язок інтегрального рівняння зображується функціональним рядом

$$v_m(0, x) = F(x) + \sum_{k=1}^{\infty} (v_m^{(k)}(0, x) - v_m^{(k-1)}(0, x))$$

і для нього правильна оцінка

$$|v_m(0, x)| \leq \frac{\lambda_0}{1 - \lambda_0} \|F; Q\|_0. \quad (19)$$

Враховуючи властивості функції Гріна $Z_m(t, x, 0, \xi)$, умови 1, 2 і рівність (18), при кожному фіксованому (m_1, m_2) , одержуємо $v_m(0, x) \in C^{2+\alpha}(D)$. Враховуючи зображення (17), маємо $v_m(t, x) \in C^{2+\alpha}(Q)$.

Запишемо розв'язок інтегрального рівняння (17) у вигляді

$$v_m(0, x) = F(x) + \int_D G_m(x, y) F(y) dy, \quad (20)$$

де $G_m(x, y)$ – резольвента, яка задовольняє інтегральне рівняння

$$G_m(x, \xi) = \int_0^T b(\tau, x) e^{-\lambda\tau} Z_m(\tau, x, 0, \xi) d\tau + \int_0^T b(\tau, x) e^{-\lambda\tau} d\tau \times$$

$$\times \int_D Z_m(\tau, x, 0, y) G_m(y, \xi) dy, \quad (21)$$

звідки випливає оцінка

$$\left| \int_D G_m(x, \xi) d\xi \right| \leq \frac{\lambda_0}{1 - \lambda_0}.$$

Встановимо формулу для зображення розв'язку задачі (10), (15), (16).

Теорема 4. Нехай виконані умови теореми 3 і $\psi(t, x) \equiv 0$. Тоді існує функція Гріна однорідної задачі (10), (15), (16) (Z_m, Γ_m, E_m), і правильна формула

$$v_m(t, x) = \int_0^t d\tau \int_D Z_m(t, x, \tau, \xi) f_m(\tau, \xi) e^{\lambda\tau} d\xi + \int_0^T d\tau \int_D \Gamma_m(T, t, x, \tau, \xi) f_m(\tau, \xi) e^{\lambda\tau} d\xi +$$

$$+ \int_D E_m(T, t, x, 0, \xi) \varphi_m(\xi) d\xi. \quad (21)$$

Доведення. Підставляючи в рівність (20) замість $F(x)$ значення

$$F(x) = \int_0^T b(\tau, x) e^{-\lambda\tau} \left[\int_D Z_m(\tau, x, 0, \xi) \varphi_m(\xi) d\xi + \int_0^\tau d\beta \int_D Z_m(\tau, x, \beta, y) f_m(\beta, y) e^{\lambda\tau} dy \right] d\tau,$$

і змінюючи порядок інтегрування, отримуємо

$$v_m(0, x) = \int_0^T d\beta \int_D \Phi_m(T, x, \beta, y) f_m(\beta, y) e^{\lambda\beta} dy + \int_D \Phi_m(T, x, 0, y) \varphi_m(y) dy, \quad (22)$$

де

$$\begin{aligned} \Phi_m(T, x, \beta, y) &= - \int_\beta^T b(\tau, x) e^{-\lambda\tau} Z_m(\tau, x, 0, y) d\tau - \\ &- \int_\beta^T b(\tau, x) e^{-\lambda\tau} d\tau \int_D G_m(x, \xi) Z_m(\tau, \xi, 0, y) d\xi. \end{aligned}$$

Підставляючи (22) у інтеграл з рівності (17) і помінявши порядок інтегрування, одержимо зображення (21), де

$$\begin{aligned} \Gamma_m(T, t, x, \tau, y) &= \int_D Z_m(t, x, 0, \xi) \Phi_m(T, \xi, \tau, y) d\xi, \\ E_m(T, t, x, 0, y) &= Z_m(t, x, 0, y) + \Gamma_m(T, t, x, 0, y). \end{aligned}$$

В задачі (7)-(9) зробимо заміну $u_m(t, x) = v_m(t, x) e^{-\lambda t} + \psi_m(t, x)$, де λ задовольняє умову 2. Одержимо задачу знаходження розв'язків рівняння

$$((L_1 - \lambda)v_m)(t, x) = f_m(t, x) e^{\lambda t} + (L_1\psi_m)(t, x) \equiv F_m(t, x), \quad (23)$$

які задовольняють нелокальну умову

$$\begin{aligned} v_m(0, x) + \int_0^T b(\tau, x) e^{-\lambda\tau} v_m(\tau, x) d\tau &= \varphi_m(x) - \\ - \int_0^T b(\tau, x) \psi_m(\tau, x) d\tau - \psi_m(0, x) &\equiv \Phi_m(x). \end{aligned} \quad (24)$$

і крайову умову

$$\lim_{x \rightarrow z \in \partial D} v_m(t, x) = 0. \quad (25)$$

Правильна така теорема.

Теорема 5. Нехай виконані умови 1, 2. Тоді для розв'язку задачі (23)-(25) правильна оцінка

$$\|v_m; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} \leq c \left(\|F_m; \gamma, \beta; \mu_0; Q\|_\alpha + \|\Phi_m; \tilde{\gamma}, \tilde{\beta}; 0; D\|_{2+\alpha} + \|v_m; Q\|_0 \right). \quad (26)$$

Доведення. Використовуючи означення норми та інтерполяційні нерівності із [14] маємо

$$\|v_m; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} \leq (1 + \varepsilon^\alpha) \|v_m; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} + c(\varepsilon) \|v_m; Q\|_0,$$

де $(\varepsilon \in 0,1)$, ε – довільне дійсне число. Тому досить оцінити пів норму $\langle v_m; \gamma, \beta; 0; Q \rangle_{2+\alpha}$. Із визначення норми випливає існування в Q точок P_1, H_i, P_2 , для яких правильна одна з нерівностей:

$$\begin{aligned} \mu \|v_m; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} &\leq E_m, \quad k \in \{1, 2, 3, 4\}, \quad (27) \\ E_1 &= \sum_{i,j,l=1}^n |x_i^{(1)} - x_i^{(2)}| t \left| \partial_{x_i} \partial_{x_l} v_m(P_1) - \partial_{x_i} \partial_{x_l} v_m(H_i) \right| d_1((2+\alpha)\gamma; \tilde{P}_1) \times \\ &\times d_2(-\beta_i^{(2)}; \tilde{x}_j) d_2(-\beta_l^{(2)}; \tilde{x}_l) d_2(-\alpha; \tilde{x}_i); \\ E_2 &= \sum_{i,j,l=1}^n |t_1 - t_2|^{-\alpha} \left| \partial_{x_j} \partial_{x_l} v_m(H_i) - \partial_{x_j} \partial_{x_l} v_m(P_2) \right| d_1((2+\alpha)\gamma; \tilde{P}_2) \times \\ &\times d_2(-\beta_j^{(2)}; \tilde{x}_j) d_2(-\beta_l^{(2)}; \tilde{x}_l); \\ E_3 &= \sum_{i=1}^n |x_i^{(1)} - x_i^{(2)}|^{-\alpha} d((2+\alpha)\gamma; \tilde{P}) d_2(-\alpha; x_i) \left| \partial_t v_m(H_i) - \partial_t v_m(P_1) \right|; \\ E_4 &= \sum_{i=1}^n |t_1 - t_2|^{-\alpha} \left| \partial_t v_m(H_i) - \partial_t v_m(P_2) \right| d((2+\alpha)\gamma; \tilde{P}_2); \\ \mu &\in \left(\frac{1+\lambda_0}{2}, 1 \right), d(a, \tilde{P}_v) \equiv \min\{d(a, P_v), d(a, H_i)\}, v \in \{1, 2\}. \end{aligned}$$

Розглянемо випадки $|x_j^{(1)} - x_j^{(2)}| \leq n^{-1} d(\gamma; \tilde{P}_v) d_2(-\beta_j^{(2)}; \tilde{x}_j) \frac{r}{4} \equiv T_2$, або

$|t^{(1)} - t^{(2)}| \leq d(2\gamma; \tilde{P}_v) \frac{r^2}{16} \equiv T_1$, r – довільна стала, $r \in (0,1)$. Вважаємо, що

$\tilde{P}_v = P_1$. Запишемо задачу (23)-(25) у вигляді

$$\begin{aligned} (L_2 v_m)(t, x) &= \left[\partial_t - \sum_{ij=1}^n a_{ij}(P_1) \partial_{x_i} \partial_{x_j} \right] v_m = \sum_{ij=1}^n [a_{ij}(P) - a_{ij}(P_1)] \partial_{x_i} \partial_{x_j} v_m + \\ &+ \sum_{i=1}^n a_i(P) \partial_{x_i} v_m + (a_0(P) - \lambda) v_m + F_m(P) \equiv F(t, x, v_m), \quad (28) \end{aligned}$$

$$v_m(0, x) = \Phi_m(x) - \int_0^T b(\tau, x) v_m(\tau, x) e^{-\lambda\tau} d\tau = g_m(x). \quad (29)$$

$$v_m|_{\Gamma} = 0. \quad (30)$$

Нехай V_δ – куб з центром в точці P_1 , $V_\delta = \{(t, x) \in Q, 0 \leq |t - t_1| \leq \delta^2 T_1, |x_j - x_j^{(1)}| \leq \delta T_2, j \in \{1, \dots, n\}\}$. Зробимо в задачі (28)-(30) заміну $v_m(t, x) = \omega_m(t, z)$, $z_i = d_2(\beta_i^{(2)}; x_i^{(1)}) d_1(\beta_i^{(1)}; t^{(1)}) x_i$,

$$\begin{aligned} (L_3 \omega_m)(t, z) &= \left[\partial_t - \sum_{ij=1}^n a_{ij}(P_1) d_1(\beta_i^{(1)} + \beta_j^{(1)}; t) \times \right. \\ &\times d_2(\beta_i^{(2)}; x_i^{(1)}) d_2(\beta_j^{(2)}; x_j^{(1)}) \partial_{z_i} \partial_{z_j} \left. \right] \omega_m \equiv F(t, Z, \omega_m), \\ \omega_m(0, z) &= g_m(Z), \quad \omega_m|_{\Gamma} = 0, \end{aligned}$$

де $Z = (z_1, \dots, z_n) = (d_1(\beta_i^{(1)}; t^{(1)})d_2(\beta_j^{(2)}; x_i^{(1)})x_1, \dots, d_1(\beta_n^{(1)}; t^{(1)})d_2(\beta_n^{(2)}; x_n^{(1)})x_n)$.

Позначимо через $z_i^{(1)} = d_1(\beta_i^{(1)}; t^{(1)})d_2(\beta_j^{(2)}; x_i^{(1)})x_i$, $H_\delta^{(1)} = \{(t, \tau); |t - \tau| \leq \delta\}$, $\left|z_i - z_i^{(1)}\right| \leq \delta n^{-1} d(\gamma; P_1) \frac{r}{4} T_2, i \in \{1, 2, \dots, n\}$ і візьмемо тричі диференційовану функцію $\eta(t, z)$, яка задовольняє умови

$$\eta(\tau, y) = \begin{cases} 1, & (t, z) \in H_{1/4}^{(1)}, \quad 0 \leq \eta(t, z) \leq 1; \\ 0, & (t, z) \notin H_{3/4}^{(1)}, \quad |\partial_t^k \partial_z^l \eta| \leq c_{kl} d(-(2k + |l|)\gamma; P_1). \end{cases}$$

Тоді функція $W_m(t, z) = \omega(t, z)\eta(t, z)$ буде розв'язком задачі

$$\begin{aligned} (L_3 W_m)(t, z) &= \omega_m \partial_t \eta - \sum_{ij=1}^n a_{ij}(P_1) d_1(\beta_i^{(1)} + \beta_j^{(1)}; t) d_2(\beta_i^{(2)}; x_i^{(1)}) d_2(\beta_j^{(2)}; x_j^{(1)}) \times \\ &\times [\partial_{z_i} \omega_m \partial_{z_j} \eta + \partial_{z_j} \omega_m \partial_{z_i} \eta + \omega_m \partial_{z_i} \partial_{z_j} \eta] + F(t, Z, \omega_m) \eta(t, z) \equiv F(t, z, \omega_m), \\ W_m(0, z) &= g_m(Z) \eta(0, z) \equiv g_m^{(1)}(t, z), \quad W_m(t, z)|_\Gamma = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

На підставі теореми 5.2 із [19, с.364] для розв'язку задачі (31) і довільних точок M_1 та $M_2 \in H_{1/4}^{(1)}$ правильна нерівність

$$d^{-\alpha}(M_1, M_2) |\partial_t^k \partial_z^j \omega_m(M_1) - \partial_t^k \partial_z^j \omega_m(M_2)| \leq c \left(|F_1|_{C^\alpha(H_{3/4}^{(1)})} + |g_m^{(1)}|_{C^{2+\alpha}(H_{3/4}^{(1)})} \right), \quad (32)$$

$d(M_1, M_2)$ – параболічна відстань між точками M_1 і M_2 .

Враховуючи властивості функції $\eta(t, z)$, знаходимо

$$\begin{aligned} |F_1|_{C^\alpha(H_{3/4}^{(1)})} &\leq cd(-(2 + \alpha)\gamma; P_1) \left(\|F; \gamma, 0; 2\gamma; H_{3/4}^{(1)}\|_\alpha + \right. \\ &\quad \left. + \|\omega_m; \gamma, 0; 0; H_{3/4}^{(1)}\|_2 + \|\omega_m; H_{3/4}^{(1)}\|_0 \right), \\ |g_m^{(1)}|_{C^{2+\alpha}(H_{3/4}^{(1)})} &\leq cd(-(2 + \alpha)\gamma; P_1) \|g_m; \gamma, 0; 0; H_{3/4}\|_{2+\alpha}. \end{aligned} \quad (33)$$

Підставляючи (33) в (32) і повертаючись до змінних (t, x) , одержимо

$$E_k \leq c \left(\|F_m; \gamma, \beta; 2\gamma; V_{3/4}\|_\alpha + \|v_m; \gamma, \beta; 0; V_{3/4}\|_2 + \|v_m; V_{3/4}\| + \|g_m; \gamma, \beta; 0; V_{3/4}\|_{2+\alpha} \right). \quad (34)$$

Знайдемо оцінки норм виразів F і g_m . Враховуючи інтерполяційні нерівності, досить оцінити пів норму кожного доданка. Наприклад,

$$\begin{aligned} < a_0 v_m; \gamma, \beta; 2\gamma, V_{3/4} >_\alpha \leq \sum_{j=1}^n \sup_{\{A_1, B_j, A_2\} \subset V_{3/4}} \left\{ |v_m| \left[|\tau^{(1)} - \tau^{(2)}|^{-\frac{\alpha}{2}} d((2 + \alpha)\gamma; \tilde{A}_1) \times \right. \right. \\ &\times |a_0(A_2) - a_0(B_j)| + \sum_{l=1}^n d(2\gamma; \tilde{A}) d_1(\alpha\gamma^{(1)}; \tilde{\tau}) d_2(\alpha(\gamma^{(2)} - \beta_l^{(2)}); \tilde{\xi}_l) |\xi_l^{(1)} - \xi_l^{(2)}|^{-\alpha} \times \\ &\times |a_0(A_2) - a_0(B_l)| \left. \right\} + \sum_{j=1}^n \sup_{\{A_1, B_j, A_2\} \subset V_{3/4}} d(2\gamma; \tilde{A}_2) |a_0(A_2)| \left[|\tau^{(1)} - \tau^{(1)}|^{-\frac{\alpha}{2}} \times \right. \\ &\times |v_m(A_2) - v_m(B_j)| d(\alpha\gamma; \tilde{A}_2) + \sum_{l=1}^n d_1(\alpha\gamma^{(1)}; \tilde{\tau}) d_2(\alpha(\gamma^{(2)} - \beta_l^{(2)}); \tilde{\xi}_l) \times \\ &\times |\xi_l^{(1)} - \xi_l^{(2)}|^{-\alpha} |v_m(A_1) - v_m(B_l)| \left. \right] \leq c \left(\|v_m; \gamma, \beta; 0, V_{3/4}\|_1 + \|v_m; V_{3/4}\|_0 \right) \end{aligned}$$

Аналогічно одержуються оцінки інших доданків функцій F і g_m .

Отже, для F і g_m отримаємо оцінки

$$\begin{aligned} \|F; \gamma, \beta; 2\gamma; V_{3/4}\|_{\alpha} &\leq c(\|F_m; \gamma, \beta; \mu_0; Q\|_{\alpha} + \|v_m; Q\|_0) + \varepsilon_1 \|v_m; \gamma, \beta; 0; V_{3/4}\|_{2+\alpha}, \\ \|g_m; \gamma, \beta; 0; V_{3/4}\|_{2+\alpha} &\leq c\|\Phi_m; \tilde{\gamma}, \tilde{\beta}; 0; D\|_{2+\alpha} + (\lambda + \varepsilon^{\alpha}) \|v_m; \gamma, \beta; 0; V_{3/4}\|_{2+\alpha} + \\ &+ c(\varepsilon) \|v_m; V_{3/4}\|_0, \end{aligned} \quad (35)$$

де $\varepsilon_1 = n^2 r^2 + \varepsilon^{\alpha} + nr$.

Підставляючи (35) в (34), одержимо

$$\begin{aligned} E_k &\leq c(\|F_m; \gamma, \beta; \mu_0; Q\|_{\alpha} + \|\Phi_m; \tilde{\gamma}, \tilde{\beta}; 0; D\|_{2+\alpha} + \|v_m; Q\|_0) + \\ &+ (\lambda_0 + \varepsilon_1 + \varepsilon^{\alpha}) \|v_m; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha}. \end{aligned} \quad (36)$$

Якщо $|x_i^{(1)} - x_i^{(2)}| \geq T_2$, то використовуючи інтерполяційні нерівності для $k \in \{1, 3\}$, маємо

$$E_k \leq \varepsilon^{\alpha} \|v_m; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} + c(\varepsilon) \|v_m; Q\|_0. \quad (37)$$

Якщо $|t^{(1)} - t^{(2)}| \geq T_1$, то використовуючи інтерполяційні нерівності для $k \in \{2, 4\}$, маємо

$$E_k \leq \varepsilon^{\alpha} \|v_m; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} + c(\varepsilon) \|v_m; Q\|_0. \quad (38)$$

Скориставшись нерівностями (27), (36)-(38) і вибравши r та ε досить малими, одержуємо нерівність (26).

Доведення теореми 1. Враховуючи нерівності (14) і (26) маємо нерівність

$$\|u_m; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} \leq c_1(\|f; \gamma, \beta; \mu_0; Q\|_{\alpha} + \|\varphi; \tilde{\gamma}, \tilde{\beta}; 0; D\|_{2+\alpha} + \|\psi; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha}), \quad (39)$$

права частина якої не залежить від m . Крім того, послідовності $\{W_m^{(0)}\} = \{u_m(P)\}$, $\{W_m^{(1)}\} = \{d_1(\gamma^{(1)} - \beta_i^{(1)}; t)d_2(\gamma^{(2)} - \beta_i^{(2)}; x_i)\partial_{x_i} u_m(P)\}$, $\{W_m^{(2)}\} = \{d(2\gamma; P) \times \partial_i u_m(P)\}$, $\{W_m^{(3)}\} = \{d_1(2\gamma^{(1)} - \beta_i^{(1)} - \beta_j^{(1)}; t)d_2(\gamma^{(2)} - \beta_i^{(2)}; x_i)d_2(\gamma^{(2)} - \beta_j^{(2)}; x_j) \times \partial_{x_i} \partial_{x_j} u_m(P)\}$ рівномірно обмежені і рівностепенно неперервні в області \bar{Q} . За теоремою Арчела існують послідовності $\{W_{m_k}^{(v)}\}$, рівномірно збіжні в \bar{Q} до $W^{(v)}$, $v \in \{0, 1, 2, 3\}$. Переходячи до границі при $m_k \rightarrow \infty$ в задачі (7)-(9) одержуємо, що $u(t, x) = W^{(0)}$ єдиний розв'язок задачі (2)-(4), $u \in C^{2+\alpha}(\gamma; \beta; 0; Q)$.

Теорема 6. Якщо $f \in C^{\alpha}(\gamma; \beta; 0; Q)$ і виконані умови 1, 2, то єдиний розв'язок задачі (2)-(4) в просторі $C^{2+\alpha}(\gamma; \beta; 0; Q)$ визначається інтегралом Стілтєса з борелівською мірою

$$u(t, x) = \int_Q E_1(t, x; d\tau, d\xi) f(\tau, \xi) + \int_D E_2(t, x; d\xi) \varphi(\xi) + \int_\Gamma E_3(t, x; d\tau; d_\xi S) \psi(\tau, \xi). \quad (40)$$

Доведення. Оскільки $C^\alpha(\gamma; \beta; 0; Q) \subset C^\alpha(\gamma; \beta; \mu_0; Q)$, то для $f \in C^\alpha(\gamma; \beta; \mu_0; Q)$ правильна нерівність $\|f; \gamma; \beta; \mu_0; Q\|_\alpha \leq c \|f; \gamma; \beta; \mu_0; Q\|_\alpha$. За умов теореми 1 для розв'язку задачі (2)-(4), маємо

$$\|u; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} \leq c \left(\|f; \gamma, \beta; 0; Q\|_\alpha + \|\varphi; \tilde{\gamma}, \tilde{\beta}; 0; D\|_{2+\alpha} + \|\psi; \gamma, \beta; 0; Q\|_{2+\alpha} \right). \quad (41)$$

Розглядаючи $u(t, x)$ при фіксованих (t, x) як лінійний неперервний функціонал $\Phi(f, \varphi, \psi)$ на нормованому просторі $C^{2+\alpha}(\gamma; \beta; 0; Q)$ з нормою, що дорівнює правій частині нерівності (41), згідно з теоремою Ріса, оскільки $C^{2+\alpha}(\gamma; \beta; 0; Q) \subset C(Q)$, можна вважати, що $u(t, x)$ породжує борелівську міру $E(t, x; Z)$, яка визначена на σ -алгебрі множин Z області \overline{Q} , включаючи Q і всі її відкриті підмножини такі, що значення функціоналу визначається формулою (41).

Задача оптимального керування. Для встановлення існування розв'язку задачі (1)-(4) потрібно встановити розв'язність допоміжних задач з гладкими коефіцієнтами. Розглянемо в області Q задачу знаходження функцій (u_m, p, q) , на яких функціонал

$$I(p, q) = \int_0^T dt \int_D F_1(t, x; u_m(t, x; p(t, x), q(x)), p(t, x)) dx + \int_D F_2(x; u_m(T, x; p(T, x), q(x)), q(x)) dx \quad (42)$$

досягає мінімуму в класі функцій $(p, q) \in V$, із яких u_m є розв'язком задачі

$$(L_1 u_m)(t, x) = f_m(t, x, p(t, x)), \quad (43)$$

$$u_m(0, x; p(0, x), q(x)) + \int_0^T b(\tau, x) u_m(\tau, x; p(\tau, x), q(x)) d\tau = \varphi_m(x, q(x)), \quad (44)$$

$$\lim_{x \rightarrow z \in \partial D} [u_m(t, x; p(t, x), q(x)) - \psi_m(t, x)] = 0. \quad (45)$$

При обмеженнях 1, 2 для будь-яких $(p, q) \in V$ існує єдиний розв'язок задачі (43) і для нього правильна оцінка (39).

Позначимо

$$\mu(\tau, \xi) = \int_\tau^T d\beta \int_D Z_m(\beta, x, 0, \xi) \frac{\partial F_1(\beta, x, u_m, p)}{\partial u_m} e^{-\lambda(\beta-\tau)} dx + \int_0^T d\beta \int_D \Gamma_m(T, \beta, x, \tau, \xi) \frac{\partial F_1(\beta, x, u_m, p)}{\partial u_m} e^{-\lambda(\beta-\tau)} dx + \int_D E_m(T, \tau, x, 0, \xi) \frac{\partial F_2(x; u_m, q)}{\partial u_m} dx,$$

$$\begin{aligned} \eta(\xi) &= \int_0^T dt \int_D E_m(T, t, x, 0, \xi) \frac{\partial F_1(t, x; u_m, p)}{\partial u_m} dx + \\ &+ \int_D E_m(T, T, x, 0, \xi) \frac{\partial F_2(x; u_m, q)}{\partial u_m} dx, \\ H_1(\mu; u_m, p) &= F_1(t, x; u_m, p) + \mu(t, x) f_m(t, x, p), \\ H_2(\eta; u_m, q) &= F_2(x; u_m, q) + \eta(x) \varphi_m(x, q). \end{aligned}$$

Правильні такі теореми.

Теорема 7. Якщо $\partial_p H_1(\mu; u_m, p) > 0$ і $\partial_2 H_2(\eta; u_m, q) > 0$, то оптимальним є керування (p_2, q_2) , а оптимальним розв'язком задачі (42), (43) є $u_m^{(0)}(t, x; p, q) = u_m(t, x; p_2, q_2)$.

Якщо $\partial_p H_1(\mu; u_m, p) < 0$ і $\partial_2 H_2(\eta; u_m, q) > 0$, то оптимальним є керування (p_1, q_2) , а оптимальним розв'язком задачі (42), (43) є $u_m(t, x; p_1, q_2)$.

Якщо $\partial_p H_1(\mu; u_m, p) > 0$ і $\partial_2 H_2(\eta; u_m, q) < 0$, то оптимальним є керування (p_2, q_1) , а оптимальним розв'язком задачі (42), (43) є $u_m(t, x; p_2, q_1)$.

Якщо $\partial_p H_1(\mu; u_m, p) < 0$ і $\partial_2 H_2(\eta; u_m, q) < 0$, то оптимальним є керування (p_1, q_1) , а оптимальним розв'язком задачі (42), (43) є $u_m(t, x; p_1, q_1)$.

Нехай умови теореми 7 не виконані. Тоді правильна така теорема.

Теорема 8. Для того, щоб $(p^{(0)}, q^{(0)})$ і відповідний розв'язок задачі (43) $u_m^{(0)}(t, x; p^{(0)}, q^{(0)})$ були оптимальними, необхідно та достатньо, щоб виконувалися умови:

а) функція $H_1(\mu; u_m, p)$ за аргументом p має в точці $p^{(0)}$ мінімальне значення;

б) функція $H_2(\eta; u_m, q)$ за аргументом q має в точці $q^{(0)}$ мінімальне значення;

в) для довільного вектора $(e_1, e_2) \neq 0$ і $(t, x) \in Q$ виконується нерівність

$$\partial_{u_m}^2 F_1(t, x; u_m^{(0)}, p^{(0)}) e_1^2 + 2\partial_p \partial_{u_m} F_1(t, x; u_m^{(0)}, p^{(0)}) e_1 e_2 + \partial_p^2 F_1(t, x; u_m^{(0)}, p^{(0)}) e_2^2 > 0;$$

г) для довільного вектора $(v_1, v_2) \neq 0$ і $x \in D$ виконується нерівність $\partial_{u_m}^2 F_2(x; u_m^{(0)}, q^{(0)}) v_1^2 + 2\partial_p \partial_{u_m} F_2(x; u_m^{(0)}, q^{(0)}) v_1 v_2 + \partial_p^2 F_2(x; u_m^{(0)}, q^{(0)}) v_2^2 > 0$.

Доведення теорем 7, 8 проводиться за допомогою методики праці [15]. Переходячи до границі в задачі (42)-(45) при $m_1 \rightarrow \infty$, $m_2 \rightarrow \infty$ одержимо оптимальний розв'язок задачі (1)-(4).

Література

1. Вигак В.М. Управление температурными напряжениями и перемещениями / В.М.Вигак. – Киев: Наук, думка, 1988. – 312 с.
2. Дюва Г. Неравенства в механике и физике / Г.Дюва, Ж.-Л.Лионе. – М.: Наука, 1980. – 384 с.
3. Ильин В.А. Оптимизация за произвольный достаточно большой промежуток времени T управления упругими граничными силами на двух концах струны / В.А. Ильин, К.И. Мойсеев // Докл. РАН. – 2007. – 417, №4. – С. 456-463.
4. Лионе Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными / Ж.-Л.Лионе. – М.: Мир, 1972. – 414 с.
5. Лурье К.А. Оптимальное управление в задачах математической физики / К.А.Лурье. – М.: Наука, 1975. – 478 с.
6. Eidelman S.D. Analytic methods in the theory of differential and pseudo-differential equations of parabolic type / S.D.Eidelman, S.D.Ivasyshen, A.N.Kochubei. – Basel: Birkhäuser, 2004. – 390 p. – (Ser. Operator Theory: Adv. And Appl. – Vol. 152).
7. Majewski M. On the existence of optimal solutions to an optimal control problem / M.Majewski // J.Optimiz. Theory and Appl. – 2006. – 126, No 3. – P. 635-651.
8. Rösch A. Existence of regular Lagrange multipliers for a nonlinear elliptic optimal control problem with pointwise control-state constraints / A.Rösch, F.Tröltzch // SIAM J. Contr. And Optimiz. – 2006. – 45, No 2. – P. 548-564.
9. Genngheng Wang. Shade optimization of an elliptic equation in an exterior domain / Wang Genngheng, Wand Lijuon, Yang Donghui // SIAM J. Contr. And Optimiz. – 2006. – 45, No 2. – P. 532-547.
10. Yanlei Kou. Solutions of Ginzburg-Landau equations with weight and minimizers of the renormalized energy / Yanlei Kou, Shijin Ding // Appl. Math J. Chin. Univ. B. – 2007. – 22, No 1. – P. 48-60.
11. Lange H. Controllability of the nonlinear Schrödinger equation in the vicinity of the ground state / H.Lange, H.Teismann // Math. Meth. Appl. Sei. – 2007/ – 30, No 13. – P. 1438-1515.
12. Нелокальні крайові задачі для рівнянь із частинними похідними / Б.И.Пташник, В.С.Ільків, І.Я.Кміть, В.М.Поліщук. – К.: Наук, думка, 2002. – 416 с.
13. Матійчук М.І. Параболічні та еліптичні задачі з особливостями / М.І.Матійчук. – Чернівці: Прут, 2003. – 248 с.
14. Пукальський І.Д. Крайові задачі для нерівномірно параболічних та еліптичних рівнянь з виродженнями і особливостями: Монографія / І.Д.Пукальський. – Чернівці, 2008. – 253 с.
15. Пукальський І.Д. Параболічна крайова задача і задача оптимального керування / І.Д.Пукальський // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2009. – 52, №4. – С. 1-8.

16. Вабищев Н.Н. Нелокальная параболическая задача и обратная задача теплопроводности / Н.Н.Вабищев // Дифференц. уравнения. – 1981. – Т.17, №7. – С. 1193-1199.
17. Бицадзе А.В. О некоторых простейших обобщениях линейных эллиптических краевых задач / А.В.Бицадзе, А.А.Самарский // Докл. АН СССР, 1969. – 185, №4. – С. 739-740.
18. Фридман А. Уравнения с частными производными параболического типа / А.Фридман. – М.: Мир, 1968. – 427 с.
19. Ладыженекая О.А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа / О.А.Ладыженекая, В.А.Солонников, Н.Н.Уральцева. – М.: Наука, 1967. – 736 с.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 13.10.2011 р.
Рекомендовано до друку академіком НАН України,
професором **Перестюком М.О.***

REGIONAL TASK WITH UNLOCAL CONDITION AND TASK OF OPTIMUM MANAGEMENT FOR LINEAR PARABOLIC EQUALIZATIONS WITH DEGENERATION

I. D. Pukal'sky, I. M. Isariuk

*Chernivetsy National University by Y. Fedkovych;
58012, Chernivtsy, Kotsiubynsky st., 2; ph. +380 (372) 58-48-64;
e-mail: difeg@chnu.cv.u; kafedra_DR@mail.ru*

In spaces of classic functions with sedate weight the existence and unique of decision of the first parabolic regional task is led to with an integral condition after a sentinel variable for linear differential equalization with sedate features on co-ordinate planes. Got result is drawn on for research of tasks of optimum management.

Key words: *unlocal regional task, progressive approximations, rezolventa, optimum management, linear parabolic equalization with degeneration.*

УДК 517.956.4

ЗАДАЧА КОШІ ДЛЯ ПАРАБОЛІЧНОЇ СИСТЕМИ ПСЕВДОДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ З ІМПУЛЬСНИМ ВПЛИВОМ

В. М. Лучко, М. І. Матійчук

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича;
58012, м. Чернівці, вул. Коцюбинського, 2; тел. +380 (372) 58-48-64;
e-mail: difeg@chnu.cv.u; kafedra_DR@mail.ru*

Одержано розв'язок задачі Коші для параболічної псевдодиференціальної системи рівнянь з імпульсним впливом. Псевдо диференціальні оператори трактуються як гіперсингулярні інтегральні оператори. Зв'язок між ними здійснюється за допомогою зображення елементів матричного символу α через сферичні функції.

Ключові слова: *система псевдодиференціальних рівнянь, імпульсна дія, нормальна фундаментальна матриця розв'язків задачі Коші, неоднорідна задача, оцінка матричного осцилюючого інтеграла.*

Теорія псевдодиференціальних операторів та псевдодиференціальних рівнянь, яка в сучасній формі була створена в середині шістдесятих років, є предметом багатьох досліджень. Їх число значно збільшилося після того, як виявилось, що псевдодиференціальні оператори тісно пов'язані з важкими і важливими задачами аналізу та сучасної математичної фізики.

Лінійні параболічні псевдодиференціальні рівняння з негладкими символами були визначені С.Д. Ейдельманом і Я.М. Дрінем на початку сімдесятих років у працях [1]-[2]. М.В. Федорюком [3] знайдена точна асимптотика фундаментального розв'язку задачі Коші при $x \rightarrow \infty$, яка не є експоненціальною, як для диференціальних рівнянь, а степеневою. Важливу роль у подальшому розвитку даної теорії відіграла праця А.Н. Кочубея [4], в якій він вперше звернув увагу на те, що псевдодиференціальні оператори з негладкими символами можуть трактуватися як гіперсингулярні інтегральні оператори. Це дало можливість при дослідженні задачі Коші для таких рівнянь використати добре розвинену теорію гіперсингулярних інтегралів [5].

Найбільш повні та глибокі дослідження задач з імпульсною дією вивчені А.М. Самойленком та М.О. Перестюком. В їх монографії [7] досліджуються основні питання теорії диференціальних рівнянь з імпульсною дією. Наведена загальна характеристика систем таких рівнянь, вказано подібність та відмінність задач даної теорії, із задачами звичайних диференціальних рівнянь. Основну увагу в роботі приділяється дослідженню періодичних та майже періодичних розв'язків систем з імпульсною дією, інтегральних множин рівнянь, що розглядаються, питання стійкості розв'язку, імпульсному керуванню процесами.

1. Постановка задачі. У шарі $\Pi_E \equiv \{(t, x), t \in (t_0, T], x \in \mathbb{R}^n\}$ розглядається задача Коші для параболічної псевдодиференціальної системи рівнянь з імпульсним впливом

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} + (Au)(t, x) = f(t, x), \quad t \neq \tau_j, \quad (1)$$

$$u(t, x)|_{t=t_0} = \varphi(x), \quad (2)$$

$$\Delta u(t, x)|_{t=\tau_j+0} = B_j u(\tau_j, x) + a_j(x). \quad (3)$$

Тут A – матричний псевдодиференціальний оператор (ПДО) з символом $a(\sigma)$, який визначається формулою

$$(Au)(t, x) = (2\pi)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i(x, \sigma)} a(\sigma) V(t, \sigma) d\sigma,$$

$$V(t, \sigma) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i(\sigma, y)} u(t, x) dy,$$

$a(\sigma)$ – матриця розмірності m , f , B_j , a_j – одноколонні матриці, причому a_j , $f(t, x)$ – неперервні по t і абсолютно сумовні за аргументом x , B_j – сталі,

$$\Delta u(t, x) = u(\tau_j + 0, x) - u(\tau_j, x), \quad u(\tau_j, x) = \lim_{t \rightarrow \tau_j - 0} u(t, x),$$

$$t_0 = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_p < T.$$

Нехай виконуються умови:

1) елементи матриці $a(\sigma)$ є неперервними, а також однорідними по σ порядку $\gamma \geq 1$ функціями;

2) система (1) параболічна в Π_T , тобто λ – корені многочлена $\det(a(\sigma) - \lambda E)$, де E – одинична матриця, задовольняють нерівність

$$\operatorname{Re} \lambda(\sigma) \leq -\delta |\sigma|^\gamma,$$

з деякою сталою $\delta > 0$, $\sigma \in \mathbb{R}^n$;

3) елементи матриці $a(\sigma)$ мають $N \geq 2n + 2[\gamma] + 1$, де $[\gamma]$ – ціла частина числа γ , неперервних похідних по σ при $\sigma \neq 0$, для яких правильні оцінки

$$\|D_\sigma^\chi a(\sigma)\| \leq c_N |\sigma|^{\gamma - |\chi|},$$

$$|\chi| \leq N.$$

2. Гіперсингулярні інтеграли і псевдо диференціальні оператори

Для подальших міркувань особливо важливим є запропоноване в працях [4, 6] тлумачення псевдо диференціальних операцій (ПДО) як гіперсингулярних інтегралів (ГСІ) [5]. У випадку системи псевдодиференціальних рівнянь аналогічні результати отримані а [8]. Наведемо деякі з них.

Вираз вигляду

$$\|D_{\Omega}^{\alpha}(x)\| \equiv d^{-1} \int_{\mathbb{R}^n} \Omega \left(x, \frac{h}{|h|} \right) (\Delta_h^l f)(x) |h|^{-(n+\alpha)} dh, \quad (4)$$

де $f \in C(\mathbb{R}^n)$, $\Omega \in C(\mathbb{R}^n \times S^{n-1})$ – задані комплексно значні функції, $f \in \mathbb{R}^n$, S^{n-1} – одинична сфера в \mathbb{R}^n , $0 < \alpha < l \in \mathbb{N}$, d – деяка стала, що залежить від чисел n , l , α , яку виберемо пізніше, називається матричним ГСІ порядку α з характеристикою Ω .

Нехай $f_{\xi}(x) = e^{i(x,\xi)}$ – матриця-стовпчик, тоді

$$(D_{\Omega}^{\alpha} f_{\xi})(x) = d^{-1} \int_{\mathbb{R}^n} \Omega \left(x, \frac{h}{|h|} \right) (1 - e^{i(x,\xi)}) e^{i(x,\xi)} |h|^{-(n+\alpha)} dh \equiv \tilde{\Omega}(x, \xi) f_{\xi}(x),$$

де

$$\tilde{\Omega}(x, \xi) = d^{-1} \int_{\mathbb{R}^n} \Omega \left(x, \frac{h}{|h|} \right) (1 - e^{i(x,\xi)}) |h|^{-(n+\alpha)} dh$$

називається символом матричного ГСІ D_{Ω}^{α} .

Якщо $\Omega(x, \xi) \equiv E$, то сталу можна вибрати так, щоб $\tilde{\Omega}(x, \xi) \equiv E|\xi|^{\alpha}$.

Покладемо в (4)

$$d = \int_{\mathbb{R}^n} (1 - e^{i\bar{e}_1 \xi_1}) |\xi|^{-(n+\alpha)} d\xi, \quad \xi_1 \equiv (\bar{e}_1, \xi),$$

$$\bar{e}_1 = (1, 0, \dots, 0).$$

Правильні такі твердження.

1⁰. Матричний ГСІ з сталою характерною $\Omega \equiv E$

$$D_E^{\alpha} f = d^{-1} \int_{\mathbb{R}^n} E (\Delta_y^l f)(x) |h|^{-(n+\alpha)} dy \quad (6)$$

не залежить від вибору $l > \alpha$ і є означенням операції

$$F_{\xi \rightarrow x}^{-1} [E|x|^{\alpha} F_{x \rightarrow \xi} [f]],$$

$f \in S(\mathbb{R}^n)$, $S(\mathbb{R}^n)$ – простір основних функцій, $F_{x \rightarrow \xi}$ та $F_{\xi \rightarrow x}^{-1}$ – відповідно пряме та обернене перетворення Фур'є.

2⁰. Функція d є аналітичною функцією аргументу $\alpha > 0$ і обчислюється за формулою

$$d = \frac{\pi^{\frac{n}{2}+1}}{2^{\alpha} \Gamma\left(1 + \frac{\alpha}{2}\right) \Gamma\left(n + \frac{\alpha}{2}\right) \sin \frac{\alpha\pi}{2}} \sum_{k=0}^l (-1)^{k-1} C_l^k k^{\alpha}$$

для непарних α і

$$d = \frac{(-1)^{\frac{\alpha}{2}} \pi^{\frac{n}{2}}}{2^{\alpha-1} \Gamma\left(1 + \frac{\alpha}{2}\right) \Gamma\left(n + \frac{\alpha}{2}\right) \sin \frac{\alpha\pi}{2}} \frac{d}{d\alpha} \sum_{k=0}^l (-1)^{k-1} C_l^k k^{\alpha}$$

у випадку парних α . Зауважимо, що $d = 0$ при $\alpha = 1, 2, \dots, l-1$ [5].

3⁰. Матричний ГСІ (4) збігається абсолютно при $l > \alpha$ (α – неціле число) і за умови, що функція f має обмежені ГСІ, як і в [5], є матричним диференціальним оператором α . Якщо α – непарне, то при $l > \alpha$ інтеграл в (4) дорівнює нулеві для довільної функції f [5].

4⁰. Нехай задано матричний ГСІ, тоді запишемо його у вигляді матричного ПДО, припустимо, що $f \in S(\mathbb{R}^n)$. Тоді

$$\begin{aligned} (D_{\Omega}^{\alpha} f)(\xi) &= \frac{(2\pi)^{-n}}{d} \int_{\mathbb{R}^n} \Omega\left(x, \frac{h}{|h|}\right) |h|^{-(n+\alpha)} \times \\ &\times \left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{i(x,\xi)} (1 - e^{i(x,\xi)})^l \tilde{f}(\xi) d\xi \right) dh = (2\pi)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i(x,\xi)} \tilde{\Omega}(x, \xi) \tilde{f}(\xi) d\xi. \end{aligned}$$

Розглянемо ПДО вигляду

$$(Au)(t, x) = (2\pi)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i(x,\xi)} a(\xi) \tilde{u}(t, \xi) d\xi. \quad (8)$$

Зв'язок між ПДО та ГСІ здійснюється за допомогою зображення елементів матричного символу α через сферичні функції [4, 5].

3. Основний результат. В образах Фур'є задачі (1)-(3) відповідає задача з імпульсною дією і параметром $\sigma \in \mathbb{R}^n$

$$\frac{dV(t, \sigma)}{dt} + a(\sigma)V(t, \sigma) = \tilde{f}(t, \sigma), \quad (t \neq \tau_j) \quad (9)$$

$$V(t, \sigma)|_{t=t_0} = \tilde{\varphi}(\sigma), \quad (10)$$

$$\Delta V(t, \sigma)|_{t=\tau_j+0} = B_j V(\tau_j, \sigma) + \tilde{a}_j(\sigma). \quad (11)$$

Для неоднорідної задачі (9)-(11) розглянемо відповідну однорідну задачу

$$\frac{dV(t, \sigma)}{dt} + a(\sigma)V(t, \sigma) = 0, \quad (t \neq \tau_j) \quad (12)$$

$$V(t, \sigma)|_{t=t_0} = \tilde{\varphi}(\sigma), \quad (13)$$

$$\Delta V(t, \sigma)|_{t=\tau_j+0} = B_j V(\tau_j, \sigma). \quad (14)$$

Нехай $Q(t - \tau, \sigma)$ – нормальна фундаментальна матриця розв'язків задачі Коші

$$\frac{dQ}{dt} + a(\sigma)Q = 0, \quad Q|_{t=\tau} = E.$$

Матриця $Q(t - \tau, \sigma)$ має вигляд

$$Q(t - \tau, \sigma) = e^{-a(\sigma)(t-\tau)}. \quad (15)$$

Тоді матрицант $M(t, t_0, \sigma)$ задачі (12)-(14) визначається формулою [7]

$$M(t, t_0, \sigma) = Q(t - \tau, \sigma) \prod_{p=j}^1 (E + B_p) Q(\tau_p - \tau_{p-1}, \sigma). \quad (16)$$

де $\tau_j < t \leq \tau_{j+1}$, причому M не вироджена матриця, якщо такі $E + B_p$.

Розв'язок задачі (12)-(14) визначається за формулою

$$V(t, \sigma) = M(t, t_0, \sigma) \tilde{\varphi}(\sigma). \quad (17)$$

Для розв'язку неоднорідної задачі (9)-(11) отримуємо зображення

$$V(t, \sigma) = M(t, t_0, \sigma) \tilde{\varphi}(\sigma) + \int_{t_0}^t M(t, \tau, \sigma) \tilde{f}(\tau, \sigma) d\tau + \sum_{t_0 < \tau_j < t} M(t, \tau_j, \sigma) \tilde{a}_j(\sigma), \quad (t > t_0). \quad (18)$$

Застосувавши до обох частин формули (18) обернене перетворення Фур'є і скориставшись теоремою про перетворення Фур'є згортки, отримуємо зображення розв'язку задачі (1)-(3)

$$u(t, x) = \int_{\mathbb{R}^n} G(t, t_0, x - \xi) \varphi(\xi) d\xi + \int_{t_0}^t d\tau \int_{\mathbb{R}^n} G(t, \tau, x - \xi) f(\tau, \xi) d\xi + \sum_{t_0 < \tau_j < t} \int_{\mathbb{R}^n} G(t, \tau_j, x - \xi) a_j(\xi) d\xi. \quad (19)$$

Тут $G(t, \tau, x)$ – функція Гріна задачі (1)-(3), яка визначається як обернене перетворення Фур'є матрицанта

$$G(t, \tau, x) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i(x, \sigma)} M(t, \tau, \sigma) d\sigma, \\ \Delta_t G(t, t_0, x) \Big|_{t=\tau_j} = B_j G(\tau_j, t_0, x),$$

де $t_0 < \tau_1 < \dots < \tau_j < t < T$, $x \in \mathbb{R}^n$.

Для подальших міркувань, важливу роль відіграє точна оцінка матричного осцилюючого інтеграла вигляду

$$\Phi(z) = \int_{\mathbb{R}^n} P(\sigma) e^{i(z, \sigma) - a(\sigma)} d\sigma,$$

де $P(\sigma)$ – матриця, елементи якої є однорідними многочленами степеня $\nu \in \mathbb{N}$.

Лема. Якщо $N \geq 2n + \nu + [\gamma]$ та виконуються умови 1)–3), то існує стала $c > 0$ така, що

$$\|\Phi(z)\| \leq c(1 + |z|)^{-n-\gamma-\nu}.$$

Доведення леми приведене в праці [8]. На її основі для функції $G(t, \tau, x)$ та її похідних правильними є оцінки

$$\|D_x^\chi G(t, \tau, x)\| \leq c(t - \tau) \prod_{j=1}^p \|E + B_j\| \left((t - \tau)^{\frac{1}{\nu}} + |x| \right)^{-n-\gamma-|\chi|}, \\ \|D_t G(t, \tau, x)\| \leq c \prod_{j=1}^p \|E + B_j\| \left((t - \tau)^{\frac{1}{\nu}} + |x| \right)^{-n-\gamma},$$

$$|\chi| \leq N - 2n - [\gamma].$$

Теорема. Нехай виконуються умови 1)-3), рівняння (1) є параболічним; 2) вирази $\det(E + B_j) \neq 0$, $j = \overline{1, p}$; тоді розв'язок задачі (1)-(3) для

будь-яких функцій $\varphi \in C(\mathbb{R}^n)$, $f \in C^\alpha(\Pi_T)$ визначається формулою (19) та для його похідної правильна оцінка

$$\|D_t u(t, x)\| \leq c(t - t_0) \|\varphi\|_C + \|f\|_\alpha.$$

Доведення теореми проводиться розповсюдженням міркувань із праці [9].

Література

1. Эйдельман С.Д. Необходимые и достаточные условия стабилизации решений задачи Коши для параболических псевдодифференциальных уравнений / С.Д.Эйдельман, Я.М.Дринь // Приближенные методы математического анализа. – Киев, 1974. – С. 60-69.
2. Эйдельман С.Д. Построение и исследование классических фундаментальных решений задачи Коши для равномерно параболических псевдодифференциальных уравнений / С.Д.Эйдельман, Я.М.Дринь // Математические исследования. – Кишинев, 1981. – Вып. 63. – С. 18-33.
3. Федорюк М.В. Асимптотика функции Грина псевдодифференциального уравнения / М.В.Федорюк // Дифференц. уравнения. – 1978. – №7. – С. 1296-1301.
4. Кочубей А.Н. Параболические псевдодифференциальные уравнения, гиперсингулярные интегралы и марковские процессы / А.Н.Кочубей // Изв. АН СССР. Сер. мат. – Т.52, №5. – С. 909-934.
5. Самко С.Г. Гиперсингулярные интегралы и их приложения / С.Г.Самко. – Ростов-на-Дону: Ростовский ун-т, 1984. – 208 с.
6. Кочубей А.Н. Задача Коши для эволюционных уравнений дробного порядка / А.Н.Кочубей // Дифференц. уравнения. – 1989. – Т.25, №8. – С. 1359-1368.
7. Самойленко А.М. Дифференциальные уравнения с импульсным воздействием / А.М.Самойленко, М.А.Перестюк. – К.: Вища школа, 1987. – 258 с.
8. Дринь Я.М. Фундаментальні матриці розв'язків псевдодиференціальних параболических систем з негладкими символами / Я.М.Дринь, С.Д.Ейдельман // “Крайові задачі з різними виродженнями і особливостями”, Зб. наук. праць. – Чернівці, 1990. – С. 21-31.
9. Лучко В.М. Задача Коші для параболического псевдодифференциального рівняння вищого порядку / В.М.Лучко // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки. – 2008. – Вип.2. – С. 19-25.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 13.10.2011 р.
Рекомендовано до друку д.ф.-м.н., професором Пукальським І.Д.*

**CAUCHY PROBLEM OF PARABOLIC SYSTEM
OF PSEUDODIFFERENTIAL EQUALIZATIONS
WITH IMPULSIVE BY INFLUENCING****V. M. Luchko, M. I. Matiychuk**

*Chernivetsy National University by Y. Fedkovych;
58012, Chernivtsy, Kotsiubynsky st., 2; ph. +380 (372) 58-48-64;
e-mail: difeg@chnu.cv.u; kafedra_DR@mail.ru*

The decision of task Cauchy is got for the parabolic pseudo differential system of equalizations with the impulsive influencing. Pseudo differential operators are interpreted as gipersingular integral operators. Communication between them is carried out by the image of elements of matrix character through spherical functions.

Key words: *system of pseudo differential equalizations, impulsive action, normal fundamental matrix of decisions of task Cauchy, heterogeneous task, estimation of matrix octillion integral.*

СТІЙКІСТЬ РОЗВ'ЯЗКІВ СИСТЕМ З ІМПУЛЬСНИМ ЗБУРЕННЯМ

С. І. Гургула¹, Р. І. Собкович²

¹Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua

²Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника;
76018, м. Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57;
тел. +380 (342) 59-60-16; e-mail: algeo@pi.if.ua

Для системи звичайних диференціальних рівнянь з імпульсною дією у фіксовані моменти часу одержані достатні умови стійкості, асимптотичної стійкості і нестійкості тривіального розв'язку, подібні до тих, які дає другий метод Ляпунова для систем диференціальних рівнянь без імпульсної дії.

Ключові слова: імпульсна дія, стійкість, функція Ляпунова.

Розглядається система звичайних диференціальних рівнянь з імпульсною дією у фіксовані моменти часу

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(t, x), \quad t \neq t_i, \\ \Delta x|_{t=t_i} &\equiv x(t_i + 0) - x(t_i) = I_i(x), \end{aligned} \quad (1)$$

де $t \geq t_0$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in R^n$, $f = (f_1, f_2, \dots, f_n) \in R^n$, $I_i \in R^n$, $i = 1, 2, \dots$.

Функція $f(t, x)$ вважається заданою в області

$$Z = \{t \geq t_0, x \in \bar{J}_h\}, \quad (2)$$

де $\bar{J}_h = \{x \in R^n, \|x\| \leq h, h > 0\}$ і $f(t, 0) = 0$, $t \geq t_0$, функції $I_i(x)$ визначені і неперервні в кулі \bar{J}_h , $I_i(0) = 0$, $i = 1, 2, \dots$. Відносно послідовності моментів часу $\{t_i\}$ припускаємо, що $t_i > t_{i-1}$, $i = 1, 2, \dots$, і $t_i \rightarrow \infty$ при $i \rightarrow \infty$. Досліджуватимемо питання стійкості тривіального розв'язку такої системи.

Функція Ляпунова, яка фігурує нижче, вважається скалярною і неперервно диференційовною по всіх своїх аргументах; функції $\varphi(s)$ і $\psi(s)$ вважаються заданими і неперервними при $s \geq 0$, причому $\varphi(0) = \psi(0) = 0$, $\varphi(s) > 0$, $\psi(s) > 0$ при $s > 0$, функція $\rho(t)$ – заданою, неперервною і невід'ємною при $t \geq t_0$.

Мають місце наступні твердження.

Теорема 1. Нехай для системи (1) існує додатно визначена функція Ляпунова $V(t, x)$, така, що всюди в області Z виконані нерівності

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \langle \text{grad } V, f \rangle \leq -\rho(t)\varphi(V), \quad (3)$$

$$V(t_i, x + I_i(x)) \leq \psi(V(t_i, x)), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (4)$$

а також існують константи $\theta_1 > 0$ і $\rho_0 > 0$ такі, що для всіх $i = 1, 2, \dots$, і при $t \geq t_0$ виконані нерівності

$$t_i - t_{i-1} \geq \theta_1, \quad (5)$$

$$\int_t^{t+\theta_1} \rho(\tau) d\tau \geq \rho_0. \quad (6)$$

Тоді, якщо при деякому $a_0 > 0$ для всіх $a \in (0, a_0]$

$$\int_a^{\psi(a)} \frac{ds}{\varphi(s)} \leq \rho_0, \quad (7)$$

то тривіальний розв'язок системи (1) стійкий за Ляпуновим. Причому, якщо існує $\gamma > 0$ таке, що

$$\int_a^{\psi(a)} \frac{ds}{\varphi(s)} \leq \rho_0 - \gamma, \quad (8)$$

то цей розв'язок асимптотично стійкий.

Доведення. Нехай $0 < \varepsilon < h$ і $l = \inf_{t \geq t_0, \|x\| \geq \varepsilon} V(t, x) \leq a_0$. Виберемо

$\delta > 0$ так, щоб виконувалась нерівність $m = \sup_{\|x\| < \delta} V(t_0, x) < l$, і нехай

$x(t), x(t_0) = x_0 \in J_\delta$ – довільний нетривіальний розв'язок системи (1).

Доведемо, що $x(t) \in J_\varepsilon$ при $t \geq t_0$. Розглянемо функцію $v(t) = V(t, x(t))$.

Із (3) випливає, що $v'(t) \leq -\rho(t)\varphi(v(t))$, $t \neq t_i$, $x(t) \in \bar{J}_h$, що свідчить про

те, що $v(t)$ спадає на кожному проміжку $(t_i, t_{i+1}]$, тому якщо

$v(t_i + 0) < l$, то $v(t) < l$ для всіх $t \in (t_i, t_{i+1}]$. Отже, досить показати, що

послідовність $\{v(t_i + 0)\}$, $i = 0, 1, 2, \dots$, незростаюча. Із нерівності

$v'(t) \leq -\rho(t)\varphi(v(t))$, $t \neq t_i$ маємо

$$\int_{t_{i-1}}^{t_i} \frac{v'(\tau) d\tau}{\varphi(v(\tau))} \leq - \int_{t_{i-1}}^{t_i} \rho(\tau) d\tau,$$

або, після заміни $v(\tau) = s$, для $i = 1, 2, \dots$ одержуємо:

$$\int_{v(t_{i-1}+0)}^{v(t_i)} \frac{ds}{\varphi(s)} \leq - \int_{t_{i-1}}^{t_i} \rho(\tau) d\tau,$$

що з урахуванням (5) і (6) приводить до нерівності

$$\int_{v(t_{i-1}+0)}^{v(t_i)} \frac{ds}{\varphi(s)} \leq -\rho_0. \quad (9)$$

Далі із (4) і (7) випливає, що

$$\int_{v(t_i)}^{v(t_i+0)} \frac{ds}{\varphi(s)} \leq \rho_0.$$

Додавши почленно дві останні нерівності, одержуємо:

$$\int_{v(t_{i-1}+0)}^{v(t_i+0)} \frac{ds}{\varphi(s)} \leq 0,$$

що свідчить про те, що $v(t_{i-1} + 0) \geq v(t_i + 0)$, $i = 1, 2, \dots$.

Для доведення твердження теореми про асимптотичну стійкість досить показати, що $v(t_n + 0) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. В цьому випадку із нерівностей (4) і (8) слідує, що

$$\int_{v(t_i)}^{v(t_i+0)} \frac{ds}{\varphi(s)} \leq \rho_0 - \gamma.$$

Разом із (9) це приводить при $i = 1, 2, \dots$ до нерівності

$$\int_{v(t_i+0)}^{v(t_{i-1}+0)} \frac{ds}{\varphi(s)} \geq \gamma.$$

Просумувавши такі нерівності по i від 1 до n , отримуємо

$$\int_{v(t_n+0)}^{v(t_0)} \frac{ds}{\varphi(s)} \geq n\gamma,$$

що свідчить про те, що $v(t_n + 0) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Теорему доведено.

Як видно із нерівності (3), тривіальний розв'язок відповідної системи без імпульсної дії був стійким. Для того, щоб він залишився таким і в системі з імпульсною дією, необхідно щоб імпульсні збурення були досить рідкими і досить слабкими, про що говорять умови (4)–(7) теореми. Достатні умови стійкості і асимптотичної стійкості нульового розв'язку системи (1) у випадку, коли цей розв'язок міг бути нестійким у відповідній системі без імпульсної дії, даються наступною теоремою.

Теорема 2. Нехай для системи (1) існує додатно визначена функція Ляпунова $V(t, x)$, така, що всюди в області Z виконані нерівності

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \langle \text{grad } V, f \rangle \leq \rho(t)\varphi(V), \quad (10)$$

а також існують константи $\theta_2 > 0$ і $\rho_0 > 0$ такі, що для всіх $i = 1, 2, \dots$, і при $t \geq t_0$ виконані нерівності

$$t_i - t_{i-1} \leq \theta_2, \quad (11)$$

$$\int_t^{t+\theta_2} \rho(\tau) d\tau \leq \rho_0. \quad (12)$$

Тоді, якщо при деякому $a_0 > 0$ для всіх $a \in (0, a_0]$

$$\int_{\psi(a)}^a \frac{ds}{\varphi(s)} \geq \rho_0, \quad (13)$$

то тривіальний розв'язок системи (1) стійкий за Ляпуновим. Причому, якщо існує $\gamma > 0$ таке, що

$$\int_{\psi(a)}^a \frac{ds}{\varphi(s)} \geq \rho_0 + \gamma, \quad (14)$$

то цей розв'язок асимптотично стійкий.

Доведення цієї теореми аналогічне доведенню теореми 1. Зміст умов теореми полягає в тому, що імпульсні збурення повинні бути досить частими і досить сильними.

Переходимо до теорем про нестійкість. Вважається, що функція Ляпунова $V(t, x)$, яка фігурує в цих теоремах, наділена такими властивостями:

а) область додатності $V(t, x)$ $D = \{(t, x) \in Z, V(t, x) > 0\}$ при всякому $t \geq t_0$ має непорожній відкритий переріз гіперплощиною $t = const$, який дотикається до початку координат;

б) в області D $V(t, x)$ обмежена; позначимо $a_0 = \sup_{(t, x) \in D} V(t, x)$.

Теорема 3. Нехай для системи (1) існує функція Ляпунова $V(t, x)$, яка володіє властивостями а) і б), така, що в області D виконані нерівності

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \langle grad V, f \rangle \geq -\rho(t)\varphi(V), \quad (15)$$

$$V(t_i, x + I_i(x)) \geq \psi(V(t_i, x)), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (16)$$

виконана умова (11), а також можна вказати константу $\rho_0 > 0$ таку, що при $t \geq t_0$

$$\int_t^{t+\theta_2} \rho(\tau) d\tau \leq \rho_0. \quad (17)$$

Тоді, якщо при деякому $\gamma > 0$ для всіх $a \in (0, a_0]$ виконана нерівність

$$\int_a^{\psi(a)} \frac{ds}{\varphi(s)} \geq \rho_0 + \gamma, \quad (18)$$

то тривіальний розв'язок системи (1) нестійкий.

Доведення. Нехай $\delta > 0$ як завгодно мале. За умовою знайдеться $x_0 \in J_\delta$ таке, що $V(t_0, x_0) > 0$. Покажемо, що розв'язок $x(t)$, $x(t_0) = x_0$, з часом вийде за межі кулі \bar{J}_h . Припустимо супротивне: $x(t) \in \bar{J}_h$, $t \geq t_0$. Тоді $(t, x(t)) \in D$. Справді, нехай $v(t) = V(t, x(t))$ і $t^* \in (t_i, t_{i+1}]$ – момент часу, коли вперше виконається рівність $v(t) = 0$.

В силу (15) $v'(t) \geq -\rho(t)\varphi(v(t))$, $t \neq t_i$, тоді

$$\int_{t_i}^{t^*} \frac{v'(\tau) d\tau}{\varphi(v(\tau))} \geq - \int_{t_i}^{t^*} \rho(\tau) d\tau .$$

Звідси після заміни $s = v(\tau)$ і з урахуванням (17) випливає

$$\int_{v(t^*)}^{v(t_i+0)} \frac{ds}{\varphi(s)} \leq \rho_0 ,$$

що неможливо, бо $v(t^*) = 0$, а в силу (18) невластний інтеграл $\int_0^{v(t_i+0)} \frac{ds}{\varphi(s)}$

розбіжний. Отже $(t, x(t)) \in D$, що означає що $v(t)$ – обмежена функція. Аналогічно, як при доведенні другої частини теореми 1, легко одержати, що при $i = 1, 2, \dots$ виконані нерівності

$$\int_{v(t_{i-1}+0)}^{v(t_i+0)} \frac{ds}{\varphi(s)} \geq \gamma .$$

Додаючи такі нерівності, для будь-якого натурального n отримуємо

$$\int_{v(t_0)}^{v(t_n+0)} \frac{ds}{\varphi(s)} \geq n\gamma ,$$

що означає, що $v(t_n + 0) \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$ і суперечить обмеженості функції $v(t)$. Теорему доведено.

Як видно із умов теореми, тривіальний розв'язок відповідної системи без імпульсної дії міг бути стійким, чи навіть асимптотично стійким. Щоб в системі (1) він став нестійким, імпульсні збурення повинні бути досить частими і досить сильними, про що свідчать умови (11), (16)–(18) теореми 3. Що ж стосується ситуації, коли розв'язок $x \equiv 0$ системи без імпульсної дії був нестійким, то в цьому випадку справедливе наступне твердження.

Теорема 4. Нехай для системи (1) існує функція Ляпунова $V(t, x)$, наділена властивостями а) і б), така, що в області D виконані нерівності

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \langle \text{grad } V, f \rangle \geq \rho(t)\varphi(V) , \quad (19)$$

і (16), має місце умова (5), а також можна вказати константу $\rho_0 > 0$ таку, що при $t \geq t_0$

$$\int_t^{t+\theta_1} \rho(\tau) d\tau \geq \rho_0 . \quad (20)$$

Тоді, якщо при деякому $\gamma > 0$ для всіх $a \in (0, a_0]$

$$\int_{\psi(a)}^a \frac{ds}{\varphi(s)} \leq \rho_0 - \gamma , \quad (21)$$

то розв'язок $x \equiv 0$ системи (1) нестійкий.

Як видно із умов (16), (5), (20), (21) теореми імпульсні збурення в цьому випадку повинні бути не надто частими і не надто сильними.

Література

1. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости / Демидович Б.П. – М.: Наука, 1967. – 472 с.
2. Гургула С.І. Про стійкість розв'язків імпульсних систем / С.І. Гургула, М.О.Перестюк // Вісник Київського університету. Математика і механіка. – 1981. – Вип.23. – С. 33-40.
3. Гургула С.І. Про другий метод Ляпунова в системах з імпульсною дією / С.І.Гургула, І.Й.Перкатюк // Прикарпатський вісник НТШ. Число. – 2008. – №1(1). – С. 9-15.
4. Гургула С.І. Про стійкість в системах з імпульсами / С.І.Гургула, Р.І.Собкович // Прикарпатський вісник НТШ. Число. – 2009. – №1(5). – С. 24-29.
5. Гургула С.І. Про другий метод Ляпунова для диференціальних рівнянь з імпульсами / С.І.Гургула, Р.І.Собкович, І.Й.Перкатюк // Прикарпатський вісник НТШ. Число. – 2010. – №1(9). – С. 14-20.

Стаття надійшла до редакційної колегії 13.10.2011 р.

*Рекомендовано до друку академіком НАН України,
професором Перестюком М.О.*

STABILITY OF SOLUTIONS OF SYSTEMS WITH IMPULSIVE ACTIONS

S. I. Gurgula¹, R. I. Sobkovych²

¹*Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;
76019, Ivano-Frankivs'k, Carpats'ka st., 15;*

ph. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua

²*PreCarpathian National University by Vasil Stefanic;*

76000, Ivano-Frankivs'k, Shevchenko st., 57;

ph. +380 (342) 59-60-16; e-mail: algeo@pu.if.ua

Criteria's of stability, asymptotic stability and non-stability of simple solution in an analogy to those according to the secondary Liapunov's method for differential equations without impulses, were issued for system of ordinary differential equations with impulsive action in the fixed moments of time.

Key words: *impulsive action, stability, function of Liapunov.*

**ПРО ОДИН АПРОКСИМАЦІЙНИЙ МЕТОД
НАБЛИЖЕНОГО РОЗВ'ЯЗУВАННЯ
ЛІНІЙНИХ ІНТЕГРАЛЬНИХ РІВНЯНЬ ВОЛЬТЕРРА**

І. В. Федак

*Прикарпатський національний університет ім. В. Стефаника;
76025, м. Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57;
e-mail: Fedak_ivan@rambler.ru*

Запропонований один новий метод наближеного розв'язування інтегральних рівнянь Вольтерра другого роду.

Ключові слова: *лінійне інтегральне рівняння Вольтерра, апроксимаційний метод.*

Розглянемо задачу Коші

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad (1)$$

та різницеву схему Рунге-Кутта

$$\begin{cases} \frac{\bar{y}_{i+1} - \bar{y}_i}{h} = p_1 k_1 + p_2 k_2, & i = 0, 1, \dots, n-1, \\ \bar{y}_0 = y_0, \end{cases} \quad (2)$$

де

$$k_1 = f(x_i, \bar{y}_i), \quad k_2 = f(x_i + \alpha h, \bar{y}_i + \alpha h k_1), \quad 0 < \alpha \leq 1.$$

Якщо функція $f(x, y)$ має неперервні частинні похідні третього порядку за обома змінними, то для розв'язку $y(x)$ задачі (1) за формулою Тейлора одержуємо

$$y_{i+1} = y_i + y'_i h + \frac{y''_i h^2}{2} + \frac{y'''_i h^3}{6} + O(h^4).$$

Підставляючи точний розв'язок у перші n рівнянь схеми (2), знаходимо різницю між її лівою і правою частинами у вигляді

$$\begin{aligned} \Delta_i(h) = & y'_i + \frac{1}{2} y''_i h + \frac{1}{6} y'''_i h^3 + O(h^3) - p_1 f_i - \\ & - p_2 \left(f_i + \frac{\partial f_i}{\partial x} \alpha h + \frac{\partial f_i}{\partial y} \alpha h f_i + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 f_i}{\partial x \partial y} f_i + \frac{\partial^2 f_i}{\partial y^2} f_i^2 \right) (\alpha h)^2 + O(h^3) \right), \end{aligned}$$

де позначено

$$f_i \equiv f(x_i, y_i).$$

Оскільки з (1) випливають рівності

$$y'_i = f_i, \quad y''_i = \frac{\partial f_i}{\partial x} + \frac{\partial f_i}{\partial y} f_i,$$

$$y_i''' = \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 f_i}{\partial x \partial y} f_i + \frac{\partial^2 f_i}{\partial y^2} f_i^2 + \frac{\partial f_i}{\partial y} y_i'',$$

то

$$\Delta_i(h) = (1 - p_1 - p_2) y_i' + \left(\frac{1}{2} - \alpha p_2 \right) y_i'' h +$$

$$+ \left(\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2} \alpha^2 p_2 \right) y_i''' + \frac{1}{2} \alpha^2 p_2 \frac{\partial f_i}{\partial y} y_i'' \right) h^2 + O(h^3).$$

Отже, третій порядок апроксимації отримаємо лише тоді, коли

$$\begin{cases} 1 - p_1 - p_2 = 0, \\ \frac{1}{2} - \alpha p_2 = 0, \\ \frac{1}{6} - \frac{1}{2} \alpha^2 p_2 = 0, \\ \frac{1}{2} \alpha^2 p_2 \frac{\partial f_i}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (3)$$

Із системи (3) знаходимо

$$\alpha = \frac{2}{3}, \quad p_1 = \frac{1}{4}, \quad p_2 = \frac{3}{4}, \quad \frac{\partial f_i}{\partial y} = 0. \quad (4)$$

Таким чином, якщо права частина рівняння (1) не залежить від змінної y , то, поклавши $x_0 = a$, $y_0 = 0$, одержуємо задачу Коші

$$y' = f(x), \quad y(x_0) = 0. \quad (5)$$

Звідси маємо

$$y(x) = \int_a^x f(t) dt, \quad (6)$$

і якщо функція $f(x)$ тричі неперервно диференційована на відрізку $[a, b]$, то враховуючи (4), з точністю до $O(h^3)$ знаходимо

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \frac{h}{4} \cdot \left(f(x_i) + 3f\left(x_i + \frac{2h}{3}\right) \right), \quad (7)$$

де

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \dots, n-1.$$

Зрозуміло, що при цьому

$$y(x_i) = \int_a^{x_i} f(t) dt, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad y(x_n) = \int_a^b f(t) dt. \quad (8)$$

Застосуємо отриманий результат до наближеного розв'язування одного класу інтегральних рівнянь Вольтерра II роду

$$y(x) = \lambda \int_a^x K(x, s) y(s) ds + f(x), \quad a \leq x \leq b. \quad (9)$$

Припустимо, що $K(x, s) \equiv k(s)$, і функції $y(x)$, $k(s)$, $f(x)$ тричі неперервно диференційовані на відрізку $[a, b]$. Тоді з інтегрального рівняння (9) отримаємо рівність

$$y(x_i) = \lambda \int_a^{x_i} k(s)y(s)ds + f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (10)$$

Позначимо $k_i = k(x_i)$, $f_i = f(x_i)$. Якщо \bar{y}_i – наближені значення шуканої функції у вузлах x_i , то, використовуючи для наближеного обчислення інтеграла у формулі (10) рекурентну формулу (7) з кроком $3h$, з врахуванням рівняння (9) приходимо до рівності

$$\begin{aligned} \bar{y}_{i+3} &= \lambda \left(\frac{\bar{y}_i - f_i}{\lambda} + \frac{3h}{4} (k_i \bar{y}_i + 3k_{i+2} \bar{y}_{i+2}) \right) + f_{i+3} = \\ &= \bar{y}_i + \frac{3\lambda h}{4} (k_i \bar{y}_i + 3k_{i+2} \bar{y}_{i+2}) + f_{i+3} - f_i, \quad i = 0, 1, \dots, n-3. \end{aligned}$$

При цьому $\bar{y}_0 = f_0$, а значення \bar{y}_1 та \bar{y}_2 можна знайти за формулами

$$\begin{aligned} \bar{y}_1 &= \left(1 - \frac{h}{2} \lambda k_1 \right)^{-1} \left(f_1 + \frac{h}{2} \lambda k_0 \bar{y}_0 \right), \\ \bar{y}_2 &= \left(1 - \frac{h}{2} \lambda k_2 \right)^{-1} \left(f_2 + \frac{h}{2} \lambda k_0 \bar{y}_0 + h \lambda k_1 \bar{y}_1 \right). \end{aligned}$$

Зауважимо, що описана тут методика може бути застосована і до наближеного розв'язування рівносильної заданому інтегральному рівнянню задачі Коші:

$$y'(x) = \lambda k(x)y(x) + f'(x), \quad y(a) = f(a).$$

Стаття надійшла до редакційної колегії 10.10.2011 р.

Рекомендовано до друку д.ф.-м.н., професором Артемовичем О.Д.

ON ONE APPROXIMATION METHOD OF THE APPROACH SOLVING OF VOLTERRA LINEAR INTEGRAL EQUATIONS

I. V. Fedak

PreCarpathian National University by V. Stefanyuc;

76025, Ivano-Frankivs'k, Shevchenko st., 57;

e-mail: Fedak_ivan@rambler.ru

One new method of the approach solving of Volterra second kin linear integral equations have proposed.

Key words: *Volterra linear integral equation, approximation method.*

УДК 517.98

**ПЕРІОДИЧНІСТЬ РОЗВ'ЯЗКІВ СИСТЕМИ
ДВОХ НЕЛІНІЙНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ
РІВНЯНЬ ТРЕТЬОГО ПОРЯДКУ**

А. М. Краснодембський

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua*

У статті встановлено умови збіжності послідовностей, що визначають розв'язки з періодичними компонентами деякої системи двох нелінійних диференціальних рівнянь третього порядку.

Ключові слова: система нелінійних диференціальних рівнянь, умови збіжності, періодичність розв'язків.

Розглядається система диференціальних рівнянь

$$y_y''' = f_i(x, y, y_1', y_1'', y_2, y_2', y_2'') \quad (i=1, 2), \quad (1)$$

де неперервні функції $f_i(x, u_0^{(1)}, u_1^{(1)}, u_2^{(1)}, u_0^{(2)}, u_1^{(2)}, u_2^{(2)})$ ($i=1, 2$) задовольняють умови:

1. $f_i(x+T, u_0^{(1)}, u_1^{(1)}, u_2^{(1)}, u_0^{(2)}, u_1^{(2)}, u_2^{(2)}) \equiv f_i(x, u_0^{(1)}, u_1^{(1)}, u_2^{(1)}, u_0^{(2)}, u_1^{(2)}, u_2^{(2)})$ ($i=1, 2$);
2. $f_i(\alpha-x, u_0^{(1)}, u_1^{(1)}, u_2^{(1)}, u_0^{(2)}, u_1^{(2)}, u_2^{(2)}) \equiv -f_i(x, u_0^{(1)}, u_1^{(1)}, u_2^{(1)}, u_0^{(2)}, u_1^{(2)}, u_2^{(2)})$ ($i=1, 2$);
 $|f_i(x, u_{02}^{(1)}, u_{12}^{(1)}, u_{22}^{(1)}, u_{02}^{(2)}, u_{12}^{(2)}, u_{22}^{(2)}) - f_i(x, u_{01}^{(1)}, u_{11}^{(1)}, u_{21}^{(1)}, u_{01}^{(2)}, u_{11}^{(2)}, u_{21}^{(2)})| \leq$
3. $\leq K_0^{(1)}|u_{02}^{(1)} - u_{01}^{(1)}| + K_1^{(1)}|u_{12}^{(1)} - u_{11}^{(1)}| + K_2^{(1)}|u_{22}^{(1)} - u_{21}^{(1)}| + K_0^{(2)}|u_{02}^{(2)} - u_{01}^{(2)}| +$
 $+ K_1^{(2)}|u_{12}^{(2)} - u_{11}^{(2)}| + K_2^{(2)}|u_{22}^{(2)} - u_{21}^{(2)}| \quad (i=1, 2).$

Як було вказано раніше ([1],[2]) диференціальне рівняння

$$y''' = \varphi(x),$$

де $\varphi(x) \in C$; $\varphi(x+T) \equiv \varphi(x)$; $\int_0^T \varphi(x) dx = 0$

має неперервний, періодичний (періоду T) розв'язок $y = \bar{y}(x)$ ($\bar{y}(0) = y_0$), який можна записати у формі

$$\bar{y}(x) = \frac{1}{2} \int_0^x (x-t)^2 \varphi(t) dt + \frac{1}{2T} \int_0^T xt(x+T-t) \varphi(t) dt + y_0.$$

Якщо, крім того, $\varphi(\alpha-x) = -\varphi(x)$, то $\bar{y}(\alpha-x) = -\bar{y}(x)$.

Теорема 1. Якщо $\frac{1}{2} K_0 T^3 + \frac{13}{12} K_1 T^2 + \frac{3}{2} K_2 T < 1$ ($K_0 = K_0^{(1)} + K_0^{(2)}$),

$K_1 = K_1^{(1)} + K_1^{(2)}$, $K_2 = K_2^{(1)} + K_2^{(2)}$, то система (1) має двох параметричне сімейство розв'язків $y_i = \bar{y}_i(x)$ ($\bar{y}_i(0) = y_{i0}$; $i = 1, 2$), що $\bar{y}_i(x) \in C$; $\bar{y}_i(x+T) = \bar{y}_i(x)$; $\bar{y}_i(\alpha-x) = -\bar{y}_i(x)$ ($i = 1, 2$).

Доведення. Складаємо послідовності

$$y_{ik}(x) = \frac{1}{2} \int_0^x (x-t)^2 f(t, y_{1k-1}(t), y'_{1k-1}(t), y''_{1k-1}(t), y_{2k-1}(t), y'_{2k-1}(t), y''_{2k-1}(t)) dt +$$

$$+ \frac{1}{2T} \int_0^x xt(x+T-t) f(t, y_{1k-1}(t), y'_{1k-1}(t), y''_{1k-1}(t), y_{2k-1}(t), y'_{2k-1}(t), y''_{2k-1}(t)) dt + y_{i0}$$

$$(i = 1, 2; k = 1, 2, \dots);$$

$$y'_{ik}(x) = \int_0^x (x-t) f(t, y_{1k-1}(t), y'_{1k-1}(t), y''_{1k-1}(t), y_{2k-1}(t), y'_{2k-1}(t), y''_{2k-1}(t)) dt +$$

$$+ \frac{1}{2T} \int_0^x t(2x+T-t) f(t, y_{1k-1}(t), y'_{1k-1}(t), y''_{1k-1}(t), y_{2k-1}(t), y'_{2k-1}(t), y''_{2k-1}(t)) dt \quad (2)$$

$$(i = 1, 2; k = 1, 2, \dots);$$

$$y''_{ik}(x) = \int_0^x f(t, y_{1k-1}(t), y'_{1k-1}(t), y''_{1k-1}(t), y_{2k-1}(t), y'_{2k-1}(t), y''_{2k-1}(t)) dt +$$

$$+ \frac{1}{T} \int_0^x t f(t, y_{1k-1}(t), y'_{1k-1}(t), y''_{1k-1}(t), y_{2k-1}(t), y'_{2k-1}(t), y''_{2k-1}(t)) dt \quad (i = 1, 2; k = 1, 2, \dots);$$

$$y_{i0}(x) = y_{i0}; \quad y'_{i0}(x) = 0; \quad y''_{i0}(x) = 0 \quad (i = 1, 2).$$

В силу вказаного вище $y_{ik}(x)$ є неперервними, періодичними (періоду T) функціями, що $y_{ik}(\alpha-x) = -y_{ik}(x)$ ($i = 1, 2; k = 1, 2, \dots$).

Нехай

$$\max_{0 \leq x \leq T} |f_i(x, y_{10}, 0, 0, y_{20}, 0, 0)| = M \quad (i = 1, 2).$$

Приймаючи до уваги періодичність (періоду T) послідовностей (2), отримуємо:

$$|y_{i1} - y_{i0}| \leq \frac{1}{2} MT^3; \quad |y'_{i1}| \leq \frac{13}{12} MT^2; \quad |y''_{i1}| \leq \frac{3}{2} MT \quad (i = 1, 2);$$

$$|y_{i2} - y_{i1}| \leq \left(K_0^{(1)} \frac{1}{2} MT^3 + K_1^{(1)} \frac{13}{12} MT^2 + K_2^{(1)} \frac{3}{2} MT + K_0^{(1)} \frac{1}{2} MT^3 + \right.$$

$$\left. + K_1^{(2)} \frac{13}{12} MT^2 + K_2^{(2)} \frac{3}{2} MT \right) \frac{1}{2} T^3 = \frac{1}{2} MT^3 \left(\frac{1}{2} K_0 T^3 + \frac{13}{12} K_1 T^2 + \frac{3}{2} K_2 T \right) (i = 1, 2);$$

$$|y'_{i2} - y'_{i1}| \leq \frac{13}{12} MT^2 \left(\frac{1}{2} K_0 T^3 + \frac{13}{12} K_1 T^2 + \frac{3}{2} K_2 T \right);$$

$$|y''_{i2} - y''_{i1}| \leq \frac{3}{2} MT \left(\frac{1}{2} K_0 T^3 + \frac{13}{12} K_1 T^2 + \frac{3}{2} K_2 T \right) \quad (i = 1, 2).$$

Використовуючи позначення

$$\frac{1}{2}K_0T^3 + \frac{13}{12}K_1T^2 + \frac{3}{2}K_2T = q,$$

запишемо:

$$|y_{i2} - y_{i1}| \leq \frac{1}{2}MT^3q^k; |y'_{i2} - y'_{i1}| \leq \frac{13}{12}MT^2q^k; |y''_{i2} - y''_{i1}| \leq \frac{3}{2}MTq^k \quad (i=1,2).$$

Тоді

$$|y_{ik+2} - y_{ik+1}| \leq \left(K_0^{(1)} \frac{1}{2}MT^3q^k + K_1^{(1)} \frac{13}{12}MT^2q^k + K_1^{(2)} \frac{3}{2}14Tq^k + K_0^{(2)} \frac{1}{2}MT^3q^k + \right. \\ \left. + K_1^{(2)} \frac{13}{12}MT^2q^k + K_2^{(2)} \frac{3}{2}MTq^k \right) \frac{1}{2}T^3 = \frac{1}{2}MT^3q^{k+1} \quad (i=1,2);$$

$$|y'_{ik+2} - y'_{ik+1}| \leq \frac{13}{12}MT^2q^{k+1}; |y''_{ik+2} - y''_{ik+1}| \leq \frac{3}{2}MTq^{k+1} \quad (i=1,2).$$

Згідно з методом математичної індукції, ряди

$$|y_{i0}| + |y_{i1} - y_{i0}| + |y_{i2} - y_{i1}| + \dots + |y_{ik+1} - y_{ik}| + \dots \quad (i=1,2)$$

мажоруються геометричною прогресією з знаменником q .

Значить, послідовності (2) збігаються рівномірно, тобто існують границі

$$\lim_{k \rightarrow \infty} y_{ik}(x) = \bar{y}_i(x) \quad (i=1,2),$$

де $\bar{y}_i(x)$ ($i=1,2$) є неперервні, періодичні (періоду T) функції, що $\bar{y}_i(\alpha - x) \equiv \bar{y}_i(x)$ ($i=1,2$).

Переходячи в перших двох рівностях послідовностей (2) до границі при $k \rightarrow 0$, отримаємо:

$$\bar{y}_i(x) = \frac{1}{2} \int_0^x (x-t)^2 f(t, \bar{y}_1(t), \bar{y}'_1(t), \bar{y}''_1(t), \bar{y}_2(t), \bar{y}'_2(t), \bar{y}''_2(t)) dt + \\ + \frac{1}{2T} \int_0^x xt(x+T-t) f_i(t, \bar{y}_1(t), \bar{y}'_1(t), \bar{y}''_1(t), \bar{y}_2(t), \bar{y}'_2(t), \bar{y}''_2(t)) dt + y_{i0} \quad (i=1,2).$$

Отже $y_i = \bar{y}_i(x)$ ($i=1,2$) є розв'язком системи (1).

Теорема доведена.

Теорема 2. Якщо $q = \frac{1}{2}K_0T^3 + \frac{13}{12}K_1T^2 + \frac{3}{2}K_2T < 1$ і $y_i = \bar{y}_i(x)$, $z_i = \bar{z}_i(x)$ ($i=1,2$) є неперервні, періодичні (періоду T) розв'язки системи (1), що $\bar{y}_i(0) = \bar{z}_i(0) = y_{i0}$ ($i=1,2$), то $\bar{y}_i(x) = \bar{z}_i(x)$ ($i=1,2$).

Доведення. Згідно з попереднім, розв'язок $z_i = \bar{z}_i(x)$ системи (1) можна записати у вигляді

$$\bar{z}_i(x) = \frac{1}{2} \int_0^x (x-t)^2 f(t, \bar{z}_1(t), \bar{z}'_1(t), \bar{z}''_1(t), \bar{z}_2(t), \bar{z}'_2(t), \bar{z}''_2(t)) dt + \\ + \frac{1}{2T} \int_0^x xt(x+T-t) f_i(t, \bar{z}_1(t), \bar{z}'_1(t), \bar{z}''_1(t), \bar{z}_2(t), \bar{z}'_2(t), \bar{z}''_2(t)) dt \quad (i=1,2).$$

Нехай

$$\max_{0 \leq x \leq T} (K_0^{(1)} |y_{11} - \bar{z}_1| + K_1^{(1)} |y'_{11} - \bar{z}'_1| + K_2^{(1)} |y''_{11} - \bar{z}''_1| + K_0^{(2)} |y_{21} - \bar{z}_2| + \\ + K_1^{(2)} |y'_{21} - \bar{z}'_2| + K_2^{(2)} |y''_{21} - \bar{z}''_2|) = L.$$

Тоді з врахуванням введених раніше позначень, дістанемо:

$$|y_{i2} - \bar{z}_i| \leq \frac{1}{2} LT^3; \quad |y'_{i2} - \bar{z}'_i| \leq \frac{13}{12} LT^2; \quad |y''_{i2} - \bar{z}''_i| \leq \frac{3}{2} LT \quad (i=1,2); \\ |y_{i3} - \bar{z}_i| \leq \frac{1}{2} LT^3 q; \quad |y'_{i3} - \bar{z}'_i| \leq \frac{13}{12} LT^2 q; \quad |y''_{i3} - \bar{z}''_i| \leq \frac{3}{2} LT q \quad (i=1,2).$$

Аналогічно попередньому, знаходимо:

$$|y_{ik} - \bar{z}_i| \leq \frac{1}{2} LT^3 q^{k-2} \quad (i=1,2; k=1,2,\dots).$$

Оскільки $q < 1$, то

$$\lim_{k \rightarrow \infty} y_{ik}(x) = \bar{z}_i(x); \quad \bar{y}_i(x) = \bar{z}_i(x) \quad (i=1,2).$$

Теорему доведено.

Література

1. Краснодембський А.М. ДАН УРСР / А.М.Краснодембский. – 10. – 1962.
2. Краснодембский А.М. Записки мех.-математического ф-та ХГУ и Харьковского матем. Общества / А.М.Краснодембский. – 1964. – Т.XXX, сер.4.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 08.09.2011 р.
Рекомендовано до друку д.т.н., професором **Мойсишиним В.М.***

PERIODICITY OF DECISIONS OF SYSTEM OF TWO NONLINEAR DIFFERENTIAL EQUALIZATIONS OF THE THIRD ORDER

A. M. Krasnodembskyy

*Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;
76019, Ivano-Frankivs'k, Carpats'ka st., 15;
ph. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua*

The terms of meeting of sequences, which determine the upshots with the periodic components of some system of two nonlinear differential equalizations of the third order are set in the article.

Key words: *system of nonlinear differential equalizations, terms of meeting, periodicity of decisions.*

УДК 517.53

ПОБУДОВА ПРИЄДНАНОЇ ЦІЛОЇ КРИВОЇ З НАПЕРЕД ЗАДАНОЮ МНОЖИНОЮ ДЕФЕКТНИХ ВЕКТОРІВ

Я. І. Савчук

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua*

Для наперед заданої множини векторів певної структури побудовано цілу криву скінченного додатного порядку, для якої структура дефектних векторів відповідної приєднаної цілої кривої співпадає з цією множиною.

Ключові слова: *ціла крива, спеціальний вектор, приєднана ціла крива, неванліннівський дефектний вектор, мероморфна функція.*

Дана стаття є продовженням [1], тому використовуватимемо позначення, які є в [1] та [2], а також основні результати теорії цілих кривих.

Основним результатом [1] є

Теорема А. *Нехай \vec{G} – ціла p -вимірна крива скінченного порядку. Тоді ($1 \leq l \leq p-1$):*

1) $D(\vec{G}_l) \cup \{\vec{0}\} = \bigcup_{j=-\infty}^{\infty} A_j$, де A_j – підпростори з C^q , де $q = C_p^l$, причому $0 \leq \dim A_j = q_j \leq q-1$;

2) для кожного j існує спеціальний вектор $\vec{b}_j \in C^q$, ортогональний до A_j .

Як відзначалося, нам не вдалося вияснити, чи підпростори A_j повинні задовольняти ще яким-небудь умовам. Метою цієї статті є показати, що умова 2) при $q_j = q-1$ є достатньою.

Теорема 1. *Нехай $A = \bigcup_{j=1}^k A_j$ ($k \leq \infty$), де A_j – підпростори з C^q , де $q = C_p^l$, причому $q_j = q-1$, кожний з яких має ортогональний спеціальний вектор. Тоді для довільного $0 < \rho < \infty$ існує ціла крива $\vec{G}: C \rightarrow C^p$ порядку ρ така, що $D(\vec{G}_l) \cup \{\vec{0}\} = A$.*

Доведення цієї теореми проведемо, опираючись на доведення теореми 1 в [3] і вважаючи, що $\rho < \frac{1}{2}$. Для зручності перенумеруємо A_j

таким чином, щоб $A = \bigcup_{j=-\infty}^{\infty} A_j$, $A_0 = \{\vec{0}\}$. Спеціальні вектори

$\vec{b}^{(j)} = [\vec{b}_1^{(j)}, \vec{b}_2^{(j)}, \dots, \vec{b}_l^{(j)}]$, ортогональні до A_j , беремо такими, щоб

$$\|\vec{b}_1^{(j)}\| + \|\vec{b}_2^{(j)}\| + \dots + \|\vec{b}_l^{(j)}\| \leq 2^{-j}. \quad (1)$$

Виберемо q спеціальних лінійно незалежних між собою векторів $\vec{b}^{(0s)} = [\vec{b}_1^{(0s)}, \vec{b}_2^{(0s)}, \dots, \vec{b}_l^{(0s)}] \in C^q$, $s = 1, 2, \dots, q$ (зокрема, можемо взяти $\vec{b}^{(01)} = (1, 0, \dots, 0), \dots, \vec{b}^{(0q)} = (0, \dots, 0, 1)$).

Позначимо

$$\vec{P}_j(z) = \vec{b}_l^{(j)} + \frac{1}{1!} \vec{b}_{l-1}^{(j)} z + \dots + \frac{1}{(l-1)!} \vec{b}_1^{(j)} z^{l-1}, \quad j \neq 0;$$

$$\vec{P}_0(z) = \sum_{s=1}^q (\vec{b}_l^{(0s)} + \vec{b}_{l-1}^{(0s)} z + \dots + \vec{b}_1^{(0s)} z^{l-1}) z^{3^s l}.$$

$$\text{Візьмемо } W(z) = \prod_{n=1}^{\infty} (1 + z \cdot n^{-1/\rho}).$$

Виберемо послідовність θ_j таку, що $-\pi < \theta_j < \pi$, $\theta_0 = 0$, $\theta_{j+1} > \theta_j$, $\theta_j \rightarrow \pi$ при $j \rightarrow -\infty$, $\theta_j \rightarrow -\pi$ при $j \rightarrow +\infty$.

Покажемо, що ціла крива $\vec{G}(z) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \vec{P}_j(z) W(z e^{-i\theta_j})$ є шуканою.

З результатів [3, гл. II, §5] випливає, що

$$W^{(s)}(z) = o\{W(z)\}, \quad z \rightarrow \infty, \quad (2)$$

виконується рівномірно по z в куті $\{z : -\pi + \delta < \arg z < \pi - \delta\}$.

В [4] показано, що $T(r, \vec{G}) \leq \frac{\pi}{\sin \pi \rho} r^\rho + o(r^\rho)$, $r \rightarrow \infty$. Тоді, відпо-

відно до нерівності $T(r, \vec{G}_l) \leq \{l + o(1)\} T(r, \vec{G})$, $r \rightarrow \infty$ [1], одержуємо, що

$$T(r, \vec{G}_l) \leq \frac{\pi l}{\sin \pi \rho} r^\rho + o(r^\rho), \quad r \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Зафіксуємо число $m \in \mathbf{Z}$. Візьмемо $\eta = \eta(m)$, $0 < \eta < (\theta_{m+1} - \theta_m)/4$, і розглянемо цілу криву на множині $V_m = V_m(\eta) = \{z : (\theta_m + \theta_{m-1})/2 + \eta < \arg z < (\theta_m + \theta_{m+1})/2 - \eta; \varphi \notin E(\mu)\}$, де $E(\mu)$ – скінченне об'єднання інтервалів, таке, що

$$\text{mes } E(\mu) < \mu; \quad (4)$$

$[-\pi, -\pi + \mu/3] \cup [\pi, \pi - \mu/3] \subset E(\mu)$; $\theta_j + \pi \in E(\mu)$ при $j \leq 0$;
 $\theta_j - \pi \in E(\mu)$ при $j > 0$.

Згідно (2) на основі такого вибору $E(\mu)$ рівність

$$W^{(s)}(ze^{-i\theta_j}) = o\left\{W(ze^{-i\theta_j})\right\}, \quad z \rightarrow \infty, \quad (5)$$

виконується рівномірно по z на множині $\{z : \arg z \in [-\pi, \pi] \setminus E(\mu)\}$.

Щоб виконувалось $\text{mes } V_m > 0$, візьмемо $\mu < (\theta_{m+1} - \theta_{m-1})/4 - \eta$.

Зауважимо, що

$$\begin{aligned} & \left[\bar{P}_m(z)W(ze^{-i\theta_m}), (\bar{P}_m(z)W(ze^{-i\theta_m}))', \dots, (\bar{P}_m(z)W(ze^{-i\theta_m}))^{(l-1)} \right] = \\ & = \left[\bar{P}_m(z), \bar{P}_m'(z), \dots, \bar{P}_m^{(l-1)}(z) \right] W^l(ze^{-i\theta_m}). \end{aligned} \quad (6)$$

Безпосередньою перевіркою можна переконатись, що при $m \neq 0$

$$\left[\bar{P}_m(z), \bar{P}_m'(z), \dots, \bar{P}_m^{(l-1)}(z) \right] = \left[\bar{b}_1^{(m)}, \bar{b}_2^{(m)}, \dots, \bar{b}_l^{(m)} \right] = \bar{b}^{(m)}. \quad (7)$$

Міркуючи як в [3, с.163-165], дістанемо

$$\ln \left| \frac{W(re^{i(\varphi-\theta_j)})}{W(re^{i(\varphi-\theta_m)})} \right| \leq -A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho), \quad r \rightarrow \infty, \quad A_m(\eta) > 0, \quad j \neq m,$$

рівномірно відносно φ та j в V_m .

Тоді при цих же умовах, згідно (5), маємо:

$$\left| W^{(s)}(re^{i(\varphi-\theta_j)}) \right| = o\left\{ \left| W(re^{i(\varphi-\theta_j)}) \right| \right\} \leq \exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\} \left| W(re^{i(\varphi-\theta_m)}) \right|, \quad r \rightarrow \infty.$$

Тому одержимо ($z = re^{i\varphi}$)

$$\left| \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq m}}^{\infty} (\bar{P}_j(z)W(ze^{-i\theta_j}))^{(s)} \right| \leq \exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\} \left| W(re^{i(\varphi-\theta_m)}) \right|, \quad r \rightarrow \infty, \quad (8)$$

рівномірно відносно φ та j в V_m .

Оскільки

$$\begin{aligned} \bar{G}_l(z) &= \left[\sum_{j=-\infty}^{\infty} \bar{P}_j(z)W(ze^{-i\theta_j}), \sum_{j=-\infty}^{\infty} (\bar{P}_j(z)W(ze^{-i\theta_j}))', \dots, \sum_{j=-\infty}^{\infty} (\bar{P}_j(z)W(ze^{-i\theta_j}))^{(l-1)} \right] = \\ &= \left[\bar{P}_m(z)W(ze^{-i\theta_m}), (\bar{P}_m(z)W(ze^{-i\theta_m}))', \dots, (\bar{P}_m(z)W(ze^{-i\theta_m}))^{(l-1)} \right] + \\ &+ \left[\sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq m}}^{\infty} \bar{P}_j(z)W(ze^{-i\theta_j}), \sum_{j=-\infty}^{\infty} (\bar{P}_j(z)W(ze^{-i\theta_j}))', \dots, \sum_{j=-\infty}^{\infty} (\bar{P}_j(z)W(ze^{-i\theta_j}))^{(l-1)} \right] + \end{aligned}$$

$$+ \sum_{s=1}^{l-1} \left[\bar{P}_m(z) W(z e^{-i\theta_m}), (\bar{P}_m(z) W(z e^{-i\theta_m}))', \dots, (\bar{P}_m(z) W(z e^{-i\theta_m}))^{(s-1)}, \right. \\ \left. \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq m}}^{\infty} (\bar{P}_j(z) W(z e^{-i\theta_j}))^{(s)}, \sum_{j=-\infty}^{\infty} (\bar{P}_j(z) W(z e^{-i\theta_j}))^{(s+1)}, \dots, \sum_{j=-\infty}^{\infty} (\bar{P}_j(z) W(z e^{-i\theta_j}))^{(l-1)} \right],$$

то, з урахуванням (6) та (8), маємо ($z = r e^{i\varphi}$):

$$\bar{G}_l(z) = [\bar{P}_m(z), \bar{P}_m'(z), \dots, \bar{P}_m^{(l-1)}(z)] W^l(z e^{i(\varphi - \theta_m)}) + \\ + O(\exp\{-A_m(\eta)r^\rho\} W^l(r e^{i(\varphi - \theta_m)})) = \{[\bar{P}_m(r e^{i\varphi}), \bar{P}_m'(r e^{i\varphi}), \dots, \bar{P}_m^{(l-1)}(r e^{i\varphi})] + \dots\} \\ + O(\exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\}) W^l(z e^{i(\varphi - \theta_m)}), \quad r \rightarrow \infty, \quad (9)$$

рівномірно відносно φ в V_m .

У випадку $m = 0$ неважко перекоонатись, що для довільного $\bar{a} \in \mathbb{C}^q \setminus \{\bar{0}\}$ виконується

$$Q_0(z, \bar{a}) = [\bar{P}_0(z), \bar{P}_0'(z), \dots, \bar{P}_0^{(l-1)}(z)] \bar{a} \neq 0,$$

Звідки, оскільки $Q_0(z, \bar{a})$ – многочлен, згідно рівності (8) випливає, що $\bar{G}_l(z) \bar{a} \neq 0$, тобто \bar{G}_l – не вироджена крива в \mathbb{C}^q .

Розглянемо тепер випадок $m \neq 0$. Згідно вибору векторів $\bar{b}^{(m)}$ та на підставі (9) і (7) для довільного $\bar{a} \in A_m \setminus \{\bar{0}\}$ маємо

$$\bar{G}_l(r e^{i\varphi}) \bar{a} = W^l(r e^{i(\varphi - \theta_m)}) \{ \bar{b}^{(m)} \bar{a} + O(\exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\}) \} = \\ = W^l(r e^{i(\varphi - \theta_m)}) \cdot O(\exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\}), \quad r \rightarrow \infty,$$

рівномірно в V_m .

Тоді рівномірно в V_m виконується

$$\frac{|\bar{G}_l(r e^{i\varphi}) \bar{a}|}{\|\bar{G}_l(r e^{i\varphi})\|} = \frac{O(\exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\})}{\|\bar{b}^{(m)} + O(\exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\})\|} \leq \exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\}, \\ r \rightarrow \infty,$$

звідки випливає, що

$$m(r, \bar{a}, \bar{G}_l) \geq \frac{1}{2\pi} \int_{E_m} \ln \frac{\|\bar{G}_l(r e^{i\varphi})\|}{|\bar{G}_l(r e^{i\varphi}) \bar{a}|} d\varphi + O(1) \geq \frac{1}{2\pi} \cdot \text{mes } E_m \cdot A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho) \geq \\ \geq \frac{1}{2\pi} ((\theta_{m+1} - \theta_{m-1})/2 - 2\eta - \mu) A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho), \quad r \rightarrow \infty, \quad (10)$$

де $E_m = \{\varphi : r e^{i\varphi} \in V_m\}$.

Співставляючи (3) з (10), отримуємо, що $\rho(\bar{G}_l) = \rho$ і $\delta(\bar{a}, \bar{G}_l) > 0$.

Тепер покажемо, що для довільного $\vec{a} \notin A$ виконується $\delta(\vec{a}, \vec{G}_l) = 0$. Очевидно, $\vec{b}^{(j)}\vec{a} \neq 0$ для всіх j . Тому для кожного j рівномірно в V_j виконується

$$\frac{\|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\|}{|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\vec{a}|} = \frac{\|\vec{b}^{(j)} + O(\exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\})\|}{|\vec{b}^{(j)}\vec{a} + O(\exp\{-A_m(\eta)r^\rho + o(r^\rho)\})|} = O(1), \quad r \rightarrow \infty. \quad (11)$$

Для довільного $\mu > 0$ існує n_0 таке, що

$$(\pi - \theta_{n_0}) + (\theta_{-n_0} + \pi) < \mu/3. \quad (12)$$

Виберемо $\eta(s)$ ($-n_0 \leq s \leq n_0$) такими, щоб виконувалось

$$\sum_{s=-n_0}^{n_0} \eta(s) < \mu/6. \quad (13)$$

Розглянемо множину

$$E = E(\mu) \cup \left\{ \bigcup_{s=-n_0}^{n_0} [(\theta_{s+1} + \theta_s)/2 - \eta(s), (\theta_{s+1} + \theta_s)/2 + \eta(s+1)] \right\}.$$

Згідно вибору $E(\mu)$ та (12), (13), (4) маємо:

$$mes E < 2\mu; \quad \{z = re^{i\varphi} : \varphi \in [-\pi, \pi] \setminus E\} \subset \bigcup_{s=-n_0}^{n_0} V_s.$$

Тому, враховуючи (11), робимо висновок, що

$$\begin{aligned} m(r, \vec{a}, \vec{G}_l) &= \frac{1}{2\pi} \int_{[-\pi, \pi] \setminus E} \ln \frac{\|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\|}{|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\vec{a}|} d\varphi + \frac{1}{2\pi} \int_E \ln \frac{\|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\|}{|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\vec{a}|} d\varphi + O(1) \leq \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \sum_{s=-n_0}^{n_0} \int_{re^{i\varphi} \in V_s} \ln \frac{\|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\|}{|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\vec{a}|} d\varphi + \frac{1}{2\pi} \int_E \ln \frac{\|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\|}{|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\vec{a}|} d\varphi + O(1) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_E \ln \frac{\|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\|}{|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\vec{a}|} d\varphi + O(1), \quad r \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (14)$$

З (3) та (10) видно, що $T(r, \vec{G}_l) = O(r^\rho)$ і $r^\rho = O(T(r, \vec{G}_l))$, $r \rightarrow \infty$, звідки, згідно леми в [4], випливає, що

$$\frac{1}{2\pi} \int_E \ln \frac{\|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\|}{|\vec{G}_l(re^{i\varphi})\vec{a}|} d\varphi \leq C(2\mu)T(r, \vec{G}_l),$$

де $C(2\mu) \rightarrow 0$ при $\mu \rightarrow 0$. Тому, враховуючи (14), робимо висновок, що $\delta(\vec{a}, \vec{G}_l) \leq C(2\mu)$. Спрямувавши $\mu \rightarrow 0$, одержуємо $\delta(\vec{a}, \vec{G}_l) = 0$.

Легко перекоонатись, що якщо $\bar{L}(z) = \bar{G}(z^n)$, то $\rho(\bar{L}) = n \cdot \rho(\bar{G})$ і $\rho(\bar{L}_l) = n \cdot \rho(\bar{G}_l)$. Враховуючи це та розглядаючи цілі криві $\bar{G}_l(z^n)$, $n = 1, 2, \dots$, можна отримати приклади цілих кривих з множиною неванліннівських дефектних векторів, що співпадає з $A \setminus \{\bar{0}\}$, і довільним порядком $0 < \rho < n/2$.

Зауваження. Ми довели теорему 1 для випадку, коли A можна подати у вигляді зліченного об'єднання підпросторів A_j з $\dim A_j = q - 1$. Для випадку $A = \bigcup_{j=1}^k A_j$ ($k < \infty$) можемо взяти $A_j = \{\bar{0}\}$ при $j \in \mathbf{Z} \setminus \{1, 2, \dots, k\}$ і для кожного такого j розглянути многочлени $\bar{P}_j(z)$ такого ж вигляду, як і многочлен $\bar{P}_0(z)$ в щойно наведеному доведенні теореми 1.

Теорема 2. Нехай $A^{(s)}$ – не більше ніж зліченне об'єднання підпросторів $A_j^{(s)}$ із C^{q_s} ($q_s = C_p^s$) розмірності не вище $q_s - 1$, причому кожний з підпросторів $A_j^{(s)}$ має ортогональний спеціальний вектор. Тоді для довільного $0 < \rho < \infty$ існує p – мірна ціла крива порядку ρ така, що $A^{(s)} \subset D(\bar{G}_l) \cup \{\bar{0}\}$ при всіх $s = 1, 2, \dots, p - 1$.

Доведення. Можемо вважати, що $A^{(s)} = \bigcup_{m=-\infty}^{+\infty} A_m^{(s)}$, $A_0^{(s)} = \{\bar{0}\}$ для всіх $s = 1, 2, \dots, p - 1$. Нехай

$$\bar{b}_m^{(s)} = [\bar{b}_{m,1}^{(s)}, \bar{b}_{m,2}^{(s)}, \dots, \bar{b}_{m,s}^{(s)}] \perp A_m^{(s)}; \sum_{v=1}^s \|\bar{b}_{m,v}^{(s)}\| \leq 2^{-m};$$

$$\bar{P}_j(z) = \bar{b}_{m,s}^{(j)} + \frac{1}{1!} \bar{b}_{m,s-1}^{(j)} z + \dots + \frac{1}{(l-1)!} \bar{b}_{m,1}^{(j)} z^{l-1},$$

де $j = m(p-1) + s$, $m \in \mathbf{Z}$, $s = 1, 2, \dots, p - 1$.

Повторюючи міркування, наведені в доведенні теореми 1, неважко перекоонатись, що крива

$$\bar{G}(z) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \bar{P}_j(z) W(z e^{-i\theta_j}),$$

де многочлен $\bar{P}_0(z)$ такий же, як і в теоремі 1, задовольняє потрібним умовам.

Література

1. Савчук Я.І. Структура дефектних векторів для приєднаних цілих кривих / Я.І.Савчук // Прикарпатський вісник НТШ. Число. – 2010. – №1(9). – С. 46-50.

2. Петренко В.П. Целые кривые / В.П.Петренко. – Ч.: Вища школа, 1984. – 136 с.
3. Гольдберг А.А. Распределение значений мероморфных функций / А.А.Гольдберг, И.В.Островский. – М.: Наука, 1970. – 592 с.
4. Савчук Я.И. О множестве дефектных векторов целых кривых / Я.И.Савчук // Укр. мат. журн. – 1983. – Т.35, №3. – С. 385-389.

Стаття надійшла до редакційної колегії 01.12.2011 р.

Рекомендовано до друку д.ф.-м.н., професором Загороднюком А.В.

CONSTRUCTION OF THE ADDED WHOLE CURVE WITH BEFOREHAND BY THE SET GREAT NUMBER OF IMPERFECT VECTORS

Ya. I. Savchuk

*Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;
76019, Ivano-Frankivs'k, Carpathians st., 15;
ph. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua*

For the beforehand set great number of vectors of certain structure the whole curve of complete positive order, for which the structure of imperfect vectors of the proper added whole curve coincides with this great number, is built.

Key words: *whole curve, special vector, added whole curve, nevanlinna imperfect vector, meromorf function.*

THE PROPERTIES OF ENTIRE FUNCTIONS OF BOUNDED VALUE L -DISTRIBUTION IN DIRECTION

A. I. Bandura

*Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;
76019, Ivano-Frankivs'k, Carpats'ka st., 15;
e-mail: andriykopanytsia@gmail.com*

We generalize a concept of function of bounded value l -distribution for multidimensional case. Besides we obtain a connection between class of entire functions of bounded value L -distribution in direction and entire functions of bounded L -index in direction.

Keywords: *entire function, bounded L -index in direction, bounded value L -distribution in direction, directional derivative.*

Entire functions of bounded value distribution and of bounded value l -distribution are investigated in the papers [1]-[3]. Particularly there are proved a connection between these classes of functions and classes of entire functions of bounded index and bounded l -index in papers [1] and [3]. We introduced the concept entire function of bounded L -index in direction in [4]. In connection with these papers we put next question: is there generalization of concept of entire function of bounded value l -distribution for entire functions of several complex variables and is there a connection between this new class and functions of bounded L -index in direction?

Let $L(z)$, $z \in \mathbf{C}^n$, be a positive continuous function.

Definition 1 (see [4]). *An entire function of $F(z)$, $z \in \mathbf{C}^n$, is called function of bounded L -index in the direction of $\mathbf{b} \in \mathbf{C}^n$, if there exists $m_0 \in \mathbf{Z}_+$ such that for $m \in \mathbf{Z}_+$ and every $z \in \mathbf{C}^n$ next inequality is true:*

$$\frac{1}{m!L^m(z)} \left| \frac{\partial^m F(z)}{\partial \mathbf{b}^m} \right| \leq \max \left\{ \frac{1}{k!L^k(z)} \left| \frac{\partial^k F(z)}{\partial \mathbf{b}^k} \right| : 0 \leq k \leq m_0 \right\},$$

where $\frac{\partial^0 F(z)}{\partial \mathbf{b}^0} = F(z)$, $\frac{\partial F(z)}{\partial \mathbf{b}} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial F(z)}{\partial z_j} b_j$, $\frac{\partial^k F(z)}{\partial \mathbf{b}^k} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{b}} \left(\frac{\partial^{k-1} F(z)}{\partial \mathbf{b}^{k-1}} \right)$, $k \geq 2$.

We denote

$$\lambda_1^{\mathbf{b}}(z, t_0, \eta) = \inf \left\{ \frac{L(z + t\mathbf{b})}{L(z + t_0\mathbf{b})} : |t - t_0| \leq \frac{\eta}{L(z + t_0\mathbf{b})} \right\},$$

$$\lambda_2^{\mathbf{b}}(z, t_0, \eta) = \sup \left\{ \frac{L(z + t\mathbf{b})}{L(z + t_0\mathbf{b})} : |t - t_0| \leq \frac{\eta}{L(z + t_0\mathbf{b})} \right\},$$

$$\lambda_1^{\mathbf{b}}(z, \eta) = \inf \{ \lambda_1^{\mathbf{b}}(z, t_0, \eta) : t_0 \in \mathbf{C} \}, \lambda_2^{\mathbf{b}}(z, \eta) = \inf \{ \lambda_2^{\mathbf{b}}(z, t_0, \eta) : t_0 \in \mathbf{C} \},$$

$$\lambda_1^b(\eta) = \inf \{ \lambda_1^b(z, \eta) : z \in \mathbf{C}^n \}, \lambda_2^b(\eta) = \inf \{ \lambda_2^b(z, \eta) : z \in \mathbf{C}^n \}.$$

A class of functions L , which satisfy the condition $0 < \lambda_1^b(\eta) \leq \lambda_2^b(\eta) < +\infty$ for all $\eta \leq 0$, we denote by Q_b^n .

For fixed $z^0 \in \mathbf{C}^n$ let c_k^0 are zeros of function $F(z^0 + t\mathbf{b})$, i. e. $F(z^0 + c_k^0\mathbf{b}) = 0$. Then we denote $n(r, z^0, t_0, 1/F) = \sum_{|c_k^0 - t_0| \leq r} 1$ be a normed counting function of sequence zeros c_k^0 .

Definition 2 An entire function $F(z)$, $z \in \mathbf{C}^n$, is called function of bounded value L -distribution in direction $\mathbf{b} \in \mathbf{C}^n$ if exists $p \in \mathbf{C} \forall z_0 \in \mathbf{C}^n$ such that $F(z^0 + t\mathbf{b}) \neq 0$, and $\forall t_0 \in \mathbf{C} \forall w \in \mathbf{C}$ next inequality is true $n(1/L(z^0 + t_0\mathbf{b}), z^0, t_0, 1/F \ w) \leq p$,

i.e. the equation $F(z^0 + t\mathbf{b}) = w$ has in $\left\{ t : |t - t_0| \leq \frac{1}{L(z^0 + t\mathbf{b})} \right\}$ at most p solutions and, thus, $F(z^0 + t\mathbf{b})$ is p -valent in $\left\{ t : |t - t_0| \leq \frac{1}{L(z^0 + t\mathbf{b})} \right\}$.

The corresponding Sheremeta's result [3] is generalized for entire functions of bounded value L -distribution in direction.

Theorem 1 Let $L \in Q_b^n$. Entire function $F(z)$, $z \in \mathbf{C}^n$, is a function of bounded value L -distribution in direction $b \in \mathbf{C}^n$ if and only if its directional derivative $\frac{\partial F}{\partial \mathbf{b}}$ is of bounded L -index in direction b .

Proof. Suppose that F if of bounded value L -distribution in direction \mathbf{b} , i. e. for all $z^0 \in \mathbf{C}^n$ such that $F(z^0 + t\mathbf{b}) \neq 0$ and for all $t^0 \in \mathbf{C}$ function $F(z^0 + t\mathbf{b})$ is p -valent in each disc $\left\{ t : |t - t_0| \leq \frac{1}{L(z^0 + t\mathbf{b})} \right\}$

To prove this theorem we need an following theorem ([5], p. 48, Theorem 2.8).

Theorem 2 [5] Let $D_0 = \{t : |t - t_0| < R\}$, $0 < R < \infty$. If an analytic function in D_0 is p -valent in D_0 then for $j > p$

$$\frac{|f^{(j)}(t_0)|}{j!} R^j \leq (Aj)^{2p} \max_{1 \leq k \leq p} \frac{|f^{(k)}(t_0)|}{k!} R^k \quad (1)$$

where $A \equiv \text{const}$ and $A \geq \max_{j > p} \frac{p+2}{2} (8e^{\pi^2})^p \left(1 - \frac{1}{j}\right)^j$.

By Theorem 2 inequality (1) holds with $R = \frac{1}{L(z^0 + t_0\mathbf{b})}$ for function $F(z^0 + t\mathbf{b})$ as function of one variable $t \in \mathbf{C}$ for every fixed $z^0 \in \mathbf{C}^n$. Let $f(t) = F(z^0 + t\mathbf{b})$, then we can easy prove that for every $m \in \mathbf{N}$ next equality

is true $f^{(p)}(t) = \frac{\partial^p F(z^0 + t\mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^p}$. Put $j = p + 1$ in Theorem 2. Then from (1) we obtain

$$\frac{\left| \frac{\partial^{p+1} F(z^0 + t_0 \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^{p+1}} \right|}{(p+1)! L^{p+1}(z_0 + t_0 \mathbf{b})} \leq (A(p+1))^{2p} \max \left\{ \frac{\left| \frac{\partial^k F(z^0 + t_0 \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^k} \right|}{k! L^k(z_0 + t_0 \mathbf{b})} : 1 \leq k \leq p \right\} \Rightarrow$$

$$\frac{\left| \frac{\partial^{p+1} F(z^0 + t_0 \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^{p+1}} \right|}{L^{p+1}(z_0 + t_0 \mathbf{b})} \leq (p+1)! (A(p+1))^{2p} \max \left\{ \frac{\left| \frac{\partial^k F(z^0 + t_0 \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^k} \right|}{L^k(z_0 + t_0 \mathbf{b})} : 1 \leq k \leq p \right\} \cdot \max \left\{ \frac{1}{k!} : \right.$$

$$1 \leq k \leq p \left. \right\} \Rightarrow \frac{\left| \frac{\partial^p}{\partial \mathbf{b}^p} \frac{\partial F(z^0 + t_0 \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} \right|}{L^p(z_0 + t_0 \mathbf{b})} \leq$$

$$\leq L(z^0 + t_0 \mathbf{b}) \cdot (p+1)! A^{2p} (p+1)^{2p} \max \left\{ \frac{\left| \frac{\partial^{k-1}}{\partial \mathbf{b}^{k-1}} \frac{\partial F(z^0 + t_0 \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} \right|}{L^k(z_0 + t_0 \mathbf{b})} : \right.$$

$$0 \leq k-1 \leq p-1 \left. \right\} \Rightarrow \frac{\left| \frac{\partial^p}{\partial \mathbf{b}^p} \frac{\partial F(z^0 + t_0 \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} \right|}{L^p(z_0 + t_0 \mathbf{b})} \leq$$

$$\leq (p+1)! A^{2p} (p+1)^{2p} \max \left\{ \frac{\left| \frac{\partial^{k-1}}{\partial \mathbf{b}^{k-1}} \frac{\partial F(z^0 + t_0 \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} \right|}{L^{k-1}(z_0 + t_0 \mathbf{b})} : 0 \leq k-1 \leq p-1 \right\}.$$

Now we need a next analogues Hayman's theorem for entire functions of bounded L -index in direction ([4], Theorem 8).

Theorem 3 ([4]) Let $L \in Q_{\mathbf{b}}^n$. An entire function $F(z)$, $z \in \mathbf{C}^n$, is of bounded L -index in direction $\mathbf{b} \in \mathbf{C}^n$ if, and only if, there exists numbers $p \in \mathbf{Z}_+$ and $C > 0$ such that for each $z \in \mathbf{C}^n$

$$\frac{1}{L^{p+1}(z)} \left| \frac{\partial^{p+1} F(z)}{\partial \mathbf{b}^{p+1}} \right| \leq C \max \left\{ \frac{1}{L^k(z)} \left| \frac{\partial^k F(z)}{\partial \mathbf{b}^k} \right| : 0 \leq k \leq p \right\} \quad (2)$$

Thus, for $\frac{\partial F}{\partial \mathbf{b}}$ inequality (2) holds with $p-1$ instead of p and with

$C = (p+1)! A^{2p} (p+1)^{2p}$. In Theorem 2 constant $A \geq \max_{j > p} \frac{p+2}{2} (8e^{\pi^2})^p (1 - \frac{1}{j})^j$

is independent of z^0 , because p is independent of z^0 . Then $C = (p+1)!A^{2p}(p+1)^{2p}$ is independent of z^0 . Thus by Theorem 3 $\frac{\partial F}{\partial \mathbf{b}}$ is of bounded L -index in direction \mathbf{b} .

On the contrary, let $\frac{\partial F}{\partial \mathbf{b}}$ be of bounded L -index in direction $\mathbf{b} \in \mathbf{C}^n$.

By Theorem 3 there exists $p \in \mathbf{Z}_+$ and $C \geq 1$ such that for each $z \in \mathbf{C}^n$ the next inequality is true

$$\frac{1}{L^{p+1}(z)} \left| \frac{\partial^{p+1} F(z)}{\partial \mathbf{b}^{p+1}} \right| \leq C \max \left\{ \frac{1}{L^k(z)} \left| \frac{\partial^k F(z)}{\partial \mathbf{b}^k} \right| : 1 \leq k \leq p \right\} \quad (3)$$

We consider a disk $K_0 = \{t \in \mathbf{C} : |t - t_0| \leq \frac{1}{L(z^0 + t_0 \mathbf{b})}, t_0 \in \mathbf{C}, z^0 \in \mathbf{C}^n$.

We remark that if $L(z) \in Q_{\mathbf{b}}^n$ and $z^0 \in \mathbf{C}^n, t_0 \in \mathbf{C}$ then for all $r > 0$ the inequality $|t - t_0| \leq \frac{r}{L(z^0 + t_0 \mathbf{b})}$ and definition of class $Q_{\mathbf{b}}^n$ imply the inequality

$$\lambda_1^{\mathbf{b}}(r)L(z^0 + t_0 \mathbf{b}) \leq L(z^0 + t \mathbf{b}) \leq \lambda_2^{\mathbf{b}}(r)L(z^0 + t_0 \mathbf{b}). \quad (4)$$

From (3) and (4) we have

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(p+1)!} \left| \frac{\partial^{p+1} F(z^0 + t \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^{p+1}} \right| \left(\frac{1}{C \lambda_2^{\mathbf{b}}(1)L(z^0 + t_0 \mathbf{b})} \right)^{p+1} \leq \frac{Cp!}{(p+1)!} \max \left\{ \frac{1}{k!} \left| \frac{\partial^k F(z^0 + t \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^k} \right| \times \right. \\ & \times \left. \left(\frac{1}{C \lambda_2^{\mathbf{b}}(1)L(z^0 + t_0 \mathbf{b})} \right)^k \left(\frac{L(z^0 + t \mathbf{b})}{C \lambda_2^{\mathbf{b}}(1)L(z^0 + t_0 \mathbf{b})} \right)^{p+1-k} : 1 \leq k \leq p \right\} \leq \\ & \leq \frac{C}{p+1} \max \left\{ \frac{1}{k!} \left| \frac{\partial^k F(z^0 + t \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^k} \right| \left(\frac{1}{C \lambda_2^{\mathbf{b}}(1)L(z^0 + t_0 \mathbf{b})} \right)^k \left(\frac{1}{C} \right)^{p+1-k} : 1 \leq k \leq p \right\} \leq \\ & \leq \max \left\{ \frac{1}{k!} \left| \frac{\partial^k F(z^0 + t \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}^k} \right| \left(\frac{1}{C \lambda_2^{\mathbf{b}}(1)L(z^0 + t_0 \mathbf{b})} \right)^k : 1 \leq k \leq p \right\}. \quad (5) \end{aligned}$$

To prove this theorem we need an following theorem ([5], p. 44, Theorem 2.7).

Theorem 4 Let $D_0 = \{t \in \mathbf{C} : |t - t_0| < R\}, 0 < R < +\infty$, and $f(t)$ be analytic function in D_0 . If for all $z \in D_0$

$$\left(\frac{R}{2} \right)^{p+1} \frac{|f^{(p+1)}(t)|}{(p+1)!} \leq \max \left\{ \left(\frac{R}{2} \right) \frac{|f^{(k)}(z)|}{k!} : 1 \leq k \leq p \right\} \quad (6)$$

then $f(t)$ is p -valent in $\left\{t \in \mathbf{C} : |t - t_0| \leq \frac{R}{25\sqrt{p+1}}\right\}$, i. e. $f(t)$ assumes each values at most p times.

The inequality (5) implies inequality (6) with $R = \frac{2}{C\lambda_2^b(1)L(z^0 + t_0\mathbf{b})}$.
By Theorem 4 the function $F(z^0 + t\mathbf{b})$ is p -valent in the disk $\left\{t \in \mathbf{C} : |t - t_0| \leq \frac{\rho}{L(z^0 + t_0\mathbf{b})}\right\}$, $\rho = \frac{2}{25C\lambda_2^b(1)\sqrt{p+1}}$.

Let t_j be arbitrary point in K_0 and $K_j^* = \left\{t \in \mathbf{C} : |t - t_j| \leq \frac{\rho}{L(z^0 + t_j\mathbf{b})}\right\}$.

Since

$$L(z^0 + t_j\mathbf{b}) \leq \lambda_2^b(1)L(z^0 + t_0\mathbf{b})$$

from definitions class Q_b^n , we see that

$$K_j = \left\{t \in \mathbf{C} : |t - t_j| \leq \frac{\rho}{\lambda_2^b(1)L(z^0 + t_0\mathbf{b})}\right\} \subset K_j^*.$$

We can repeat the above considerations to the set $\left\{t \in \mathbf{C} : |t - t_j| \leq \frac{1}{L(z^0 + t_j\mathbf{b})}\right\}$ and as above we obtain that $F(z^0 + t\mathbf{b})$ is p -valent in K_j^* . But $K_j \subset K_j^*$ therefore $F(z^0 + t\mathbf{b})$ is p -valent in K_j .

Finally we remark that each closed discs of radius R_* we can cover by a finite number m_* of closed disks of radius $\rho_* < R_*$ and with center in this disk, moreover, $m_* < B_*(R_*/\rho_*)^2$, where $B_* > 0$ is an absolute constant. Hence, K_0 can be covered be a finite number m of disks K_j , where $m \leq 625(p+1)C^2(\lambda_2^b(1))^2/4$. Since $F(z^0 + t\mathbf{b})$ in K_j is p -valent, it is mp -valent in K_0 .

In view of arbitrariness of t_0 and z^0 , the theorem is proved.

References

1. Hayman W.K. Differential inequalities and local valency / W.K.Hayman // Pacific J. Math. – 1973. – **44**, No.1. – P. 117-137.
2. Kuzyk A.D. Entire functions of bounded value l -distribution / A.D.Kuzyk, M.M.Sheremeta // Matem. zam. – 1986. – **39**, No1. – P.3-13 (in Russian).
3. Sheremeta M.M. About l -index and value l -distribution of entire functions / M.M.Sheremeta // Izv. vuzov. Mat. – 1990. – **2**. – P. 94-96 (in Russian).
4. Bandura A.I. Entire functions of bounded L -index in direction / A.I.Bandura, O.B.Skaskiv // Math. Stud. – 2007. – **27**, No1. – P. 30-52 (in Ukrainian).

5. Sheremeta M. Analytic functions of bounded index / M.Sheremeta // Sheremeta Myroslav. – Lviv: VNTL Publishers, 1999. – 141 p.

Стаття надійшла до редакційної колегії 08.09.2011 р.

Рекомендовано до друку д.ф.-м.н., професором Загороднюком А.В.

ВЛАСТИВОСТІ ЦІЛИХ ФУНКЦІЙ ОБМЕЖЕНОГО L -РОЗПОДІЛУ ЗНАЧЕНЬ ЗА НАПРЯМКОМ

А. І. Бандура

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;

76019, Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;

e-mail: andriykoranytsia@gmail.com

Узагальнено поняття функції обмеженого L -розподілу значень на багатовимірний випадок. Отримано зв'язок між класом цілих функцій обмеженого L -розподілу значень за напрямком та класом цілих функцій обмеженого L -індексу за напрямком.

Ключові слова: *ціла функція, обмежений L -індекс за напрямом, обмежений L -розподіл значень за напрямком, похідна за напрямком.*

ПОВНА СИСТЕМА РІВНЯНЬ УМОВНОЇ РІВНОВАГИ ДІЛЯНОК БУРИЛЬНОЇ КОЛОНИ У СВЕРДЛОВИНІ ОРІЄНТОВАНІЙ ДОВІЛЬНО У ПРОСТОРИ

В. М. Мойсишин, В. І. Векерик

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
Україна, 76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua.*

У роботі виведено загальні рівняння рівноваги ділянки бурильної колони орієнтованої довільно у просторі; враховано розподілені по довжині сили ваги, тertia труб об стінки свердловини, рух промивальної рідини, обертальний та поступальний рухи колони.

Вивчено особливості утворення плоских та просторових форм рівноваги пружної лінії бурильної колони, одержано залежності для знаходження її кривини і кручення, вивчено кінематику обертання ділянок колон та руху промивальної рідини у трубах і затрубному просторі.

***Ключові слова:** рівняння рівноваги, пружна лінія бурильної колони, кути Ейлера-Крилова, кривина, кручення, згинаючий момент, крутний момент, переміщення, внутрішня сила, внутрішній момент.*

На сьогодні маємо досить багато досліджень присвячених вивченню рівноваги ділянок бурильної колони у свердловині. Розв'язані задачі носять, як правило, частинний характер, що ускладнює їх узагальнення, не дозволяє створити узагальнену математичну модель, яка враховувала б поєднання впливів різноманітних факторів на стійкість розглядуваної механічної системи.

В роботі досліджено особливості взаємної бурильної колони зі стінками свердловини, складено системи рівнянь умовної рівноваги ділянок колони бурильних труб за різних умов навантаження, обмеження стінками свердловини, обертання колони, руху промивальної рідини в трубі та затрубному просторі. Одержано нові системи рівнянь, що дозволяють після їх розв'язання вперше комплексно оцінити вплив різних факторів на стійкість колони у свердловині орієнтованій довільно у просторі.

Одержані результати мають практичне значення, оскільки ними можна скористатись для розв'язку конкретних задач, пов'язаних з визначенням напружень в перерізах колони, сил тиску труб на стінки свердловини, параметрів пружної лінії колони.

1. Рівняння рівноваги невідомої ділянки бурильної колони

Пропонована робота є логічним продовженням статті [1], в якій системі векторних рівнянь рівноваги пружної лінії бурильної колони записано у вигляді

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\bar{Q}}{ds} + \bar{f}(s) &= 0, \\ \frac{d\bar{L}}{ds} + \bar{z}_0 \times \bar{Q} + \bar{m}(s) &= 0, \\ \bar{L} &= \|A\|(\bar{\omega}_0 - \hat{\omega}), \\ \frac{d\bar{u}}{ds} &= (\cos \beta \cos \gamma - 1) \cdot \bar{x}_0 - \cos \beta \sin \gamma \cdot \bar{y}_0 + \sin \beta \cdot \bar{z}_0, \end{aligned} \right\} \quad (1.1)$$

де \bar{Q}, \bar{L} – внутрішні сила та момент у s -перерізі компоновки; $F(s), m(s)$ – розподілені по довжині колони сили і моменти, причому $\bar{m} = \bar{m}_1 + \bar{l} \times \bar{f}(s)$, $m_1(s)$ – власне розподілений момент, $\bar{l} \times \bar{f}(s)$ – момент розподіленої сили $\bar{f}(s)$, \bar{l} – вектор, що з'єднує центр ваги s -перерізу з точкою прикладання розподіленого силового навантаження; $\bar{x}_0, \bar{y}_0, \bar{z}_0$ –

орти розрахункової системи координат; $\|A\|$ – матриця $\begin{pmatrix} A & O & O \\ O & B & O \\ O & O & C \end{pmatrix}$, в

якій A, B, C – жорсткості при згині та крученні;

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_0 &= p^0 \bar{x}_0^0 + q^0 \bar{y}_0^0 + r^0 \bar{z}_0^0, \\ \hat{\omega} &= p^0 \bar{x}_0 + q^0 \bar{y}_0 + r^0 \bar{z}_0, \end{aligned}$$

p^0, q^0, r^0 – кривина і кручення стрижня у недеформованому стані; $\bar{x}_0^0, \bar{y}_0^0, \bar{z}_0^0$ – орти розрахункової системи координат для недеформованого стрижня; \bar{u} – вектор переміщення елемента ds стрижня; β – кут, утворений дотичними до осей свердловини та бурильної колони; γ – кут закручування виділеної ділянки труб.

Два останні кути разом з кутом нахилу α осі свердловини складають так звані кути Ейлера-Крилова.

В реальній свердловині ділянки бурильної колони взаємодіють зі стінками свердловини, які в першому наближенні приймемо абсолютно жорсткими. Це в першу чергу виправдано для обсаджених ділянок стовбура свердловини.

Розглядаючи рівновагу колони невідільних ділянок бурильної колони розподілені по довжині колони труб сили \bar{f} і моменти \bar{m} подамо сумами

$$\left. \begin{aligned} \bar{f} &= \bar{f}' + \bar{f}_R, \\ \bar{m} &= \bar{m}' + \bar{m}_R, \end{aligned} \right\} \quad (1.2)$$

де \bar{f}', \bar{m}' – власне розподілені по довжині сили і моменти, а \bar{f}_R, \bar{m}_R – розподілені сили і моменти реакцій в'язей.

Рівняння (1.1) з урахуванням (1.2) можна використати для опису просторових форм рівноваги невідільних ділянок бурильної колони. У

проекціях на осі розрахункової системи перші два векторних рівняння мають вигляд

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial Q_x}{\partial s} + Q_z q - Q_y r &= -f'_x(s) - f_{Rx}(s), \\ \frac{\partial Q_y}{\partial s} + Q_x r - Q_z p &= -f'_y(s) - f_{Ry}(s), \\ \frac{\partial Q_z}{\partial s} + Q_y p - Q_x q &= -f'_z(s) - f_{Rz}(s); \end{aligned} \right\} \quad (1.3)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial L_x}{\partial s} + L_z q - L_y r &= Q_y - m'_x(s) - m_{Rx}(s), \\ \frac{\partial L_y}{\partial s} + L_x r - L_z p &= -Q_x - m'_y(s) - m_{Ry}(s), \\ \frac{\partial L_z}{\partial s} + L_y p - L_x q &= -m'_z(s) - m_{Rz}(s). \end{aligned} \right\} \quad (1.4)$$

В роботі [2] розглянуто деякі приклади складання рівнянь інтегрованих та неінтегрованих в'язей невільних тонких стрижнів, що опираються на абсолютно тверді тіла. Показано, що для статички тонких стрижнів справджується принцип аналогічний принципу д'Аламбера в динаміці, одержано співвідношення, що відповідає загальному рівнянню динаміки, а також складене методом Лагранжа рівняння пружної лінії невільного стрижня. Базуючись на результатах роботи [2], запишемо рівняння контакту колони зі свердловиною на випадок голономної в'язі через куту Ейлера-Крилова

$$f(\alpha, \beta, \gamma, s, \xi_0, \eta_0, \zeta_0) = 0, \quad (1.5)$$

де ξ_0, η_0, ζ_0 – координати точок пружної лінії, що відповідають дуговій координаті. Для випадку неголономної в'язі рівняння контакту має вигляд

$$R_1 \frac{\partial \alpha}{\partial s} + R_2 \frac{\partial \beta}{\partial s} + R_3 \frac{\partial \gamma}{\partial s} + R_4 = 0, \quad (1.6)$$

де R_1, R_2, R_3 – функції кутів α, β, γ , а R_4 – функція координат пружної лінії ξ_0, η_0, ζ_0 .

Умови, що накладаються рівняннями (1.5), (1.6) на змінні, подамо у вигляді

$$R_1 \delta \alpha + R_2 \delta \beta + R_3 \delta \gamma + S_1 \delta \xi_0 + S_2 \delta \eta_0 + S_3 \delta \zeta_0 = 0, \quad (1.7)$$

де $\delta \alpha, \delta \beta, \delta \gamma$ – можливі кутові зміщення, $\delta \xi_0, \delta \eta_0, \delta \zeta_0$ – проекції можливого зміщення точки пружної лінії з координатою s на осі опорної системи координат.

Одержаний вираз зведемо до вигляду

$$K_1 \delta p + K_2 \delta q + K_3 \delta r + P_1 \delta x_0 + P_2 \delta y_0 + P_3 \delta z_0 = 0, \quad (1.8)$$

де K_1, K_2, K_3 – деякі функції кутів α, β, γ ; $\delta\xi_0, \delta\eta_0, \delta\zeta_0$ – проекції малих змін повної кривини стрижня на осі розрахункової системи координат, причому

$$\left. \begin{aligned} \delta p &= \delta\alpha \cos \beta \cos \gamma + \delta\beta \sin \gamma, \\ \delta q &= -\delta\alpha \cos \beta \sin \gamma + \delta\beta \cos \gamma, \\ \delta r &= \delta\alpha \sin \beta + \delta\gamma. \end{aligned} \right\} \quad (1.9)$$

Функції P_1, P_2, P_3 мають вигляд

$$\left. \begin{aligned} P_1 &= S_1 \cos(\bar{\xi}_0, \bar{x}_0) + S_2 \cos(\bar{\eta}_0, \bar{x}_0) + S_3 \cos(\bar{\zeta}_0, \bar{x}_0), \\ P_2 &= S_1 \cos(\bar{\xi}_0, \bar{y}_0) + S_2 \cos(\bar{\eta}_0, \bar{y}_0) + S_3 \cos(\bar{\zeta}_0, \bar{y}_0), \\ P_3 &= S_1 \cos(\bar{\xi}_0, \bar{z}_0) + S_2 \cos(\bar{\eta}_0, \bar{z}_0) + S_3 \cos(\bar{\zeta}_0, \bar{z}_0). \end{aligned} \right\} \quad (1.10)$$

Враховуючи характер можливого зміщення стрижня для ідеально гладких в'язей можна записати

$$f_{Rx}(s)\delta x_0 + f_{Ry}(s)\delta y_0 + f_{Rz}(s)\delta z_0 + m_{Rx}(s)\delta p + m_{Ry}(s)\delta q + m_{Rz}(s)\delta r = 0. \quad (1.11)$$

Домноживши вираз (1.8) на “ $-\lambda$ ” і додаючи його до (1.11), одержимо

$$\begin{aligned} &(f_{Rx} - \lambda P_1)\delta x_0 + (f_{Ry} - \lambda P_2)\delta y_0 + (f_{Rz} - \lambda P_3)\delta z_0 + (m_{Rx} - \lambda K_1)\delta p + \\ &+ (m_{Ry} - \lambda K_2)\delta q + (m_{Rz} - \lambda K_3)\delta r = 0. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Множник λ вибираємо так, щоб коефіцієнти при незалежних варіаціях дорівнювали нулю. Тоді рівняння рівноваги (1.3), (1.4) можна подати у вигляді

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial Q_x}{\partial s} + Q_z q - Q_y r &= -f'_x(s) + \lambda P_1, \\ \frac{\partial Q_y}{\partial s} + Q_x r - Q_z p &= -f'_y(s) + \lambda P_2, \\ \frac{\partial Q_z}{\partial s} + Q_y p - Q_x q &= -f'_z(s) + \lambda P_3, \\ \frac{\partial L_x}{\partial s} + L_z q - L_y r &= Q_y - m'_x(s) + \lambda K_1, \\ \frac{\partial L_y}{\partial s} + L_x r - L_z p &= -Q_x - m'_y(s) + \lambda K_2, \\ \frac{\partial L_z}{\partial s} + L_y p - L_x q &= -m'_z(s) + \lambda K_3. \end{aligned} \right\} \quad (1.14)$$

Для визначення множника λ , з рівняння (1.14) знаходимо величини $\frac{\partial p}{\partial s}, \frac{\partial q}{\partial s}, \frac{\partial r}{\partial s}$ через λ і решту невідомих. Після цього підкладемо їх у рівняння в'язі (1.5) або (1.6) попередньо продиференційоване і зведене до вигляду

$$K_1^* \frac{\partial p}{\partial s} + K_2^* \frac{\partial q}{\partial s} + K_3^* \frac{\partial r}{\partial s} + K_4^* = 0, \quad (1.15)$$

де $K_1^*, K_2^*, K_3^*, K_4^*$ – відомі функції кутів Ейлера-Крилова.

Знайдене значення λ підкладаємо в (1.13), (1.14) і одержуємо рівняння, що дозволяють вивчати закономірності рівноваги ділянки бурильної колони, що взаємодіє зі стінками свердловини.

2. Визначення кривини пружної лінії бурильної колони у свердловині довільно орієнтованій у просторі

Трасекторія глибоких свердловин може складатись з вертикальних ділянок, ділянок набору, стабілізації та скидання кривини. Для тих чи інших ділянок стовбура свердловини використовують різноманітні технічні засоби і конструкції компоновок бурильної колони.

Для вивчення закономірностей просторового викривлення стовбура свердловини введемо наступні системи координат:

ξ, η, ζ – нерухому (опорну) з початком в точці O ;

ξ', η', ζ' – пов'язану з нахилом осі свердловини у площині $\eta O \zeta$;

ξ'', η'', ζ'' – пов'язану з нахилом осі свердловини у площині $\xi O \zeta$;

x', y', z' – відносну;

x, y, z – розрахункову.

Розглянемо чотири кутових зміщення α, δ, β і γ , т.б. додамо до кутів Ейлера-Крилова кут δ . Кути α і δ відповідають за просторове викривлення свердловини, кут β – за нахил бурильної колони до осі свердловини, γ – за скручування виділеної ділянки труб.

Порівнюючи запропоновану нами систему кутів $\alpha, \delta, \beta, \gamma$ з кутами Ейлера-Крилова, приходимо до висновку, що останні не характеризують вісь свердловини відносно сторін світу. Щоб кути $\alpha, \delta, \beta, \gamma$ мали всі переваги кутів Ейлера-Крилова, зокрема дозволяли складати наближені рівняння рівноваги, необхідно зв'язати повороти δ и β , т.б. виконувати їх один за одним. При цьому не важливо який з них буде першим.

Для вивчення рівноважних форм спіральнозігнутого низу бурильної колони нами запропоновано наступну схему кутових зміщень

$$\begin{array}{ccccccccccc} \xi & \rightarrow & \alpha & \rightarrow & \xi' & & \xi'' & & x' & & x \\ \eta & & & & \eta' & \rightarrow & \delta & \rightarrow & \eta'' & \rightarrow & \beta & \rightarrow & y' & & y \\ \zeta & & & & \zeta' & & \zeta'' & & z' & \rightarrow & \gamma & \rightarrow & z. \end{array}$$

Спільний початок систем $x'y'z'$ и xuz рівномірно рухається вздовж пружної лінії стрижня зі швидкістю ($s = t$) рівною одиниці. При викристанні кутів Ейлера-Крилова величини розподілених сил і моментів, що виникають внаслідок накладених в'язей, необхідно визначати після нахилу ділянки свердловини з бурильними трубами всередині на кути α і δ . Кутове зміщення $\alpha(s)$ відповідає за викривлення осі свердловини у площині $\eta O \zeta$, а $\delta(s)$ – у площині $\xi O \zeta$.

На лініях 2 і 3 у площинах $\xi O \zeta$ і $\xi O \zeta$ (см. рис.1) зображені проєкції M' и M'' точки M , яка належить осі свердловини. Кути $\alpha(s)$ і $\delta(s)$ характеризують викривлення осі свердловини в точці M , що відповідає дуговій координаті s . Складемо для введених нами кутових зміщень таблиці косинусів:

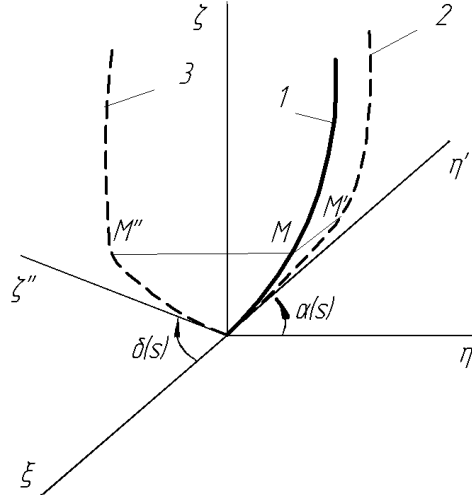
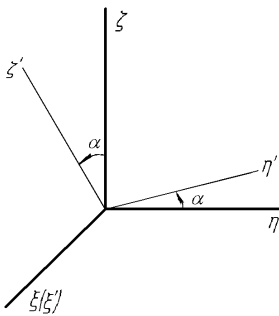


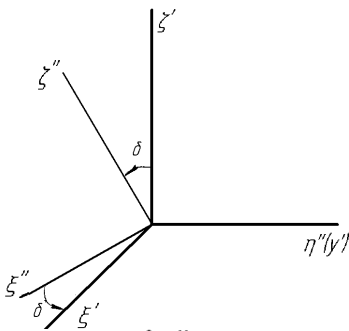
Рис.1. До визначення кутових переміщень $\alpha(s)$ і $\delta(s)$



між $\xi \eta \zeta$ і $\xi' \eta' \zeta'$

	ξ	η	ζ
ξ'	1	0	0
η'	0	$\cos \alpha$	$\sin \alpha$
ζ'	0	$-\sin \alpha$	$\cos \alpha$

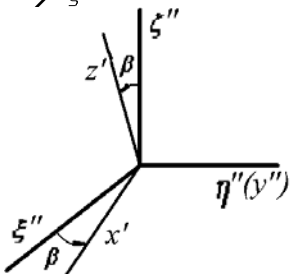
Табл.2.1



між $\xi' \eta' \zeta'$ і $\xi'' \eta'' \zeta''$

	ξ'	η'	ζ'
ξ''	$\cos \delta$	0	$-\sin \delta$
η''	0	1	0
ζ''	$\sin \delta$	0	$\cos \delta$

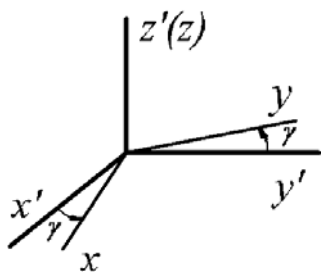
Табл.2.2



між $\xi'' \eta'' \zeta''$ і $x' y' z'$

	ξ''	η''	ζ''
x'	$\cos \beta$	0	$-\sin \beta$
y'	0	1	0
z'	$\sin \beta$	0	$\cos \beta$

Табл.2.3

між $x'y'z'$ і xyz

	x'	y'	z'
x	$\cos \gamma$	$\sin \gamma$	0
y	$-\sin \gamma$	$\cos \gamma$	0
z	0	0	1

Табл.2.4

між $\xi\eta\zeta$ і $\xi''\eta''\zeta''$

	ξ	η	ζ
ξ''	$\cos \delta$	$\sin \alpha \sin \delta$	$-\cos \alpha \sin \delta$
η''	0	$\cos \alpha$	$\sin \alpha$
ζ''	$\sin \delta$	$-\sin \alpha \sin \delta$	$\cos \alpha \cos \delta$

(3.2.1)×(3.2.2)

Табл. 2.5

між $\xi''\eta''\zeta''$ і xyz

	ξ''	η''	ζ''
x	$\cos \beta \cos \gamma$	$\sin \gamma$	$-\sin \beta \cos \gamma$
y	$-\cos \beta \sin \gamma$	$\cos \gamma$	$\sin \beta \sin \gamma$
z	$\sin \beta$	0	$\cos \beta$

(3.2.3)×(3.2.4)

Табл. 2.6

між $\xi'\eta'\zeta'$ і $x'y'z'$

	ξ'	η'	ζ'
x'	$\cos \delta \cos \beta - \sin \delta \sin \beta$	0	$-\sin \delta \cos \beta - \cos \delta \sin \beta$
y'	0	1	0
z'	$\cos \delta \sin \beta + \sin \delta \cos \beta$	0	$-\sin \delta \sin \beta + \cos \delta \cos \beta$

(3.2.3)×
×(3.2.3)

Табл. 2.7

або

	ξ'	η'	ζ'
x'	$\cos(\delta + \beta)$	0	$-\sin(\delta + \beta)$
y'	0	1	0
z'	$\sin(\delta + \beta)$	0	$\cos(\delta + \beta)$

Табл. 2.7a

між $\xi\eta\zeta$ і $x'y'z'$

	ξ	η	ζ	(3.2.1)×(3.2.7a) або (3.2.2)×(3.2.3)
x'	$\cos(\delta + \beta)$	$\sin \alpha \sin(\delta + \beta)$	$-\cos \alpha \sin(\delta + \beta)$	
y'	0	$\cos \alpha$	$\sin \alpha$	
z'	$\sin(\delta + \beta)$	$-\sin \alpha \cos(\delta + \beta)$	$\cos \alpha \cos(\delta + \beta)$	

Табл. 2.8

між $\xi'\eta'\zeta'$ і xyz

	ξ'	η'	ζ'	(3.2.7a)×(3.2.4) або (3.2.2)×(3.2.6)
x	$\cos(\delta + \beta)\cos\gamma$	$\sin\gamma$	$-\sin(\delta + \beta)\cos\gamma$	
y	$-\cos(\delta + \beta)\sin\gamma$	$\cos\gamma$	$\sin(\delta + \beta)\sin\gamma$	
z	$\sin(\delta + \beta)$	0	$\cos(\delta + \beta)$	

Табл. 2.9

між $\xi\eta\zeta$ і xyz

(3.2.8)×(3.2.4) або (3.2.1)×(3.2.9) або (3.2.5)×(3.2.6)

	ξ	η	ζ
x	$\cos(\delta + \beta) \times$ $\times \cos\gamma$	$\cos\alpha \sin\gamma +$ $+ \sin\alpha \sin(\delta + \beta)\cos\gamma$	$\sin\alpha \sin\gamma +$ $+ \cos\alpha \sin(\delta + \beta)\cos\gamma$
y	$-\cos(\delta + \beta) \times$ $\times \sin\gamma$	$\cos\alpha \cos\gamma -$ $- \sin\alpha \sin(\delta + \beta)\sin\gamma$	$\sin\alpha \cos\lambda +$ $+ \cos\gamma \sin(\delta + \beta)\sin\gamma$
z	$\sin(\delta + \beta)$	$-\sin\alpha \cos(\delta + \beta)$	$\cos\alpha \cos(\delta + \beta)$

Табл. 2.10

Використовуючи таблиці косинусів (2.1)-(2.10), неважко одержати результати попереднього параграфу через кути $\alpha, \delta, \beta, \gamma$.

Вектор повної кривини $\bar{\omega}$ пружної лінії ділянки бурильної колони знаходимо за теоремою про додавання миттєвих обертальних рухів ($s = t$) навколо осей, що перетинаються

$$\bar{\omega} = \frac{\partial\alpha}{\partial s} \bar{\xi}_0'' + \frac{\partial\delta}{\partial s} \bar{\xi}_0' + \frac{\partial\beta}{\partial s} \bar{y}_0' + \frac{\partial\gamma}{\partial s} \bar{z}_0 = \frac{\partial\alpha}{\partial s} \bar{\xi}_0'' + \left(\frac{\partial\delta}{\partial s} + \frac{\partial\beta}{\partial s} \right) \bar{y}_0' + \frac{\partial\gamma}{\partial s} \bar{z}_0, \quad (2.1)$$

де векторами з індексом "0" позначено орти введених систем координат.

Проектуючи (2.1) на осі розрахункової системи координат, одержуємо

$$\left. \begin{aligned} p &= \frac{\partial\alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta)\cos\gamma + \left(\frac{\partial\delta}{\partial s} + \frac{\partial\beta}{\partial s} \right) \sin\gamma, \\ q &= -\frac{\partial\alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta)\sin\gamma + \left(\frac{\partial\delta}{\partial s} + \frac{\partial\beta}{\partial s} \right) \cos\gamma, \\ r &= \frac{\partial\alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial\gamma}{\partial s}. \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

Модуль і напрямні косинуси вектора $\bar{\omega}$ визначаються рівностями

$$\omega = \sqrt{p^2 + q^2 + r^2} = \sqrt{\left(\frac{\partial\alpha}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial\delta}{\partial s} + \frac{\partial\beta}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial\gamma}{\partial s} \right)^2 + 2 \frac{\partial\alpha}{\partial s} \frac{\partial\gamma}{\partial s} \sin(\delta + \beta)}, \quad (2.3)$$

$$\cos(\overline{\omega}, \hat{x}_0) = \frac{p}{\omega}, \quad \cos(\overline{\omega}, \hat{y}_0) = \frac{q}{\omega}, \quad \cos(\overline{\omega}, \hat{z}_0) = \frac{r}{\omega}. \quad (2.4)$$

Нарівні з кутами $\alpha, \delta, \beta, \gamma$ можна, очевидно, вводити інші схеми поворотів. Найбільш “життєздатною” нам видається наступна

$$\begin{array}{ccccccccccc} \xi & & \xi & \rightarrow & \alpha^* & \rightarrow & \xi'' & \rightarrow & \theta & \rightarrow & x_2 & & x \\ \eta & & \tilde{\eta} & & & & \eta'' & & & & y_2 & & y \\ \zeta & \rightarrow & \theta^* & \rightarrow & \zeta & & \zeta'' & & & & z_2 & \rightarrow & \varphi & \rightarrow & z. \end{array}$$

Тут $\tilde{\xi}, \tilde{\eta}, \tilde{\zeta}$ осі проміжної системи координат з ортами $\tilde{\xi}_0, \tilde{\eta}_0, \tilde{\zeta}_0$.

До схеми безпосередньо входять азимутальний θ^* і зенітний α^* кути викривлення осі свердловини, що визначаються інклінометричними замірами. Необхідність у формулах зв'язку між θ^*, α^* і α, δ відповідає. Але ця система кутових зміщень має усі недоліки кутів Л.Ейлера. Користуючись викладеним вище, неважко скласти таблиці косинусів, що відповідають запропонованій системі кутів. Не роблячи цього, наведемо тільки формули для визначення вектора повної кривини та його проєкцій на осі x, y, z через кути $\theta^*, \alpha^*, \theta, \varphi$

$$\overline{\omega} = \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \tilde{\zeta}_0 + \frac{\partial \alpha^*}{\partial s} \tilde{\xi}_0'' + \frac{\partial \theta}{\partial s} (\overline{x}_2)_0 + \frac{\partial \varphi}{\partial s} \overline{z}_0 = \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \tilde{\zeta}_0 + \left(\frac{\partial \alpha^*}{\partial s} + \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) (\overline{x}_2)_0 + \frac{\partial \varphi}{\partial s} \overline{z}_0, \quad (2.5)$$

$$p = \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \sin(\alpha^* + \theta) \sin \varphi + \left(\frac{\partial \alpha^*}{\partial s} + \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) \cos \varphi,$$

$$q = \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \sin(\alpha^* + \theta) \cos \varphi - \left(\frac{\partial \alpha^*}{\partial s} + \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) \sin \varphi, \quad (2.6)$$

$$r = \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \cos(\alpha^* + \theta) + \frac{\partial \varphi}{\partial s}.$$

Вирази для знаходження модуля и напрямних косинусів вектора повної кривизни матимуть вигляд

$$\omega = \sqrt{\left(\frac{\partial \theta^*}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial \alpha^*}{\partial s} + \frac{\partial \theta}{\partial s} \right)^2 + \frac{\partial \varphi}{\partial s} + 2 \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \frac{\partial \varphi}{\partial s} \cos(\alpha^* + \theta)}, \quad (2.7)$$

$$\cos(\overline{\omega}, \hat{x}_0) = \frac{p}{\omega}, \quad \cos(\overline{\omega}, \hat{y}_0) = \frac{q}{\omega}, \quad \cos(\overline{\omega}, \hat{z}_0) = \frac{r}{\omega_0}. \quad (2.8)$$

3. Взаємозв'язок між азимутальним і зенітним кутами та кутам α, δ .

Інтенсивність викривлення

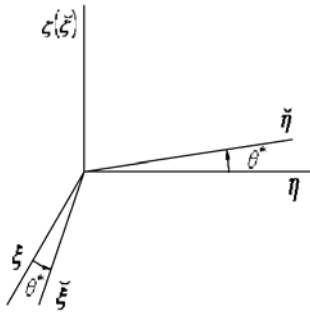
У практиці буріння свердловин систематичний контроль за просторовим положенням осі свердловини проводять за допомогою спеціальних пристроїв, які дозволяють вимірювати азимутальний θ^* і зенітний α^* кути.

Для подання результатів вимірювань через кути Ейлера-Кривола необхідно встановити залежності між кутами θ^*, α^* і α, δ .

Щоб сумістити похилоскеровану свердловину, що характеризується азимутальним і зенітним кутами, з положенням вертикальної осі після поворотів на кути α , δ запропоновано наступну схему

$$\begin{array}{l} \xi \rightarrow \theta^* \rightarrow \check{\xi} \qquad \qquad \xi'' \\ \eta \qquad \qquad \check{\eta} \qquad \qquad \eta'' \\ \zeta \qquad \qquad \check{\zeta} \rightarrow \alpha^* \rightarrow \zeta'' \end{array}$$

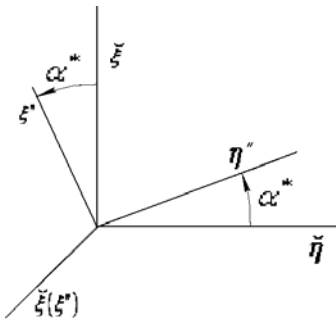
Нижче наводяться таблиці косинусів між розглядуваними осями:



між $\xi\eta\zeta$ і $\check{\xi}\check{\eta}\check{\zeta}$

	ξ	η	ζ
$\check{\xi}$	$\cos\theta^*$	$\sin\theta^*$	0
$\check{\eta}$	$-\sin\theta^*$	$\cos\alpha^*$	0
$\check{\zeta}$	0	0	1

Табл.3.1



між $\check{\xi}\check{\eta}\check{\zeta}$ і $\xi''\eta''\zeta''$

	$\check{\xi}$	$\check{\eta}$	$\check{\zeta}$
ξ''	1	0	0
η''	0	$\cos\alpha^*$	$\sin\alpha^*$
ζ''	0	$-\sin\alpha^*$	$\cos\alpha^*$

Табл.3.2

між $\xi\eta\zeta$ і $\xi''\eta''\zeta''$ (3.1)×(3.2)

	ξ	η	ζ
ξ''	$\cos\theta^*$	$\sin\theta^*$	0
η''	$-\sin\theta^* \cos\alpha^*$	$\cos\theta^* \cos\alpha^*$	$\sin\alpha^*$
ζ''	$\sin\theta^* \sin\alpha^*$	$-\cos\theta^* \sin\alpha^*$	$\cos\alpha^*$

Табл. 3.3

Вектор повної кривини осі просторововикривленої свердловини $\tilde{\omega}$ можна подати залежностями

$$\tilde{\omega} = \frac{\partial\alpha}{\partial s} \bar{\xi}'_0 + \frac{\partial\delta}{\partial s} \bar{\eta}''_0, \tag{3.1}$$

$$\tilde{\omega} = \frac{\partial\theta^*}{\partial s} \bar{\zeta}''_0 + \frac{\partial\alpha^*}{\partial s} \bar{\xi}''_0. \tag{3.2}$$

Проектуючи (3.1) і (3.2) на осі опорної системи і прирівнюючи результати, одержимо

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \alpha}{\partial s} &= \frac{\partial \alpha^*}{\partial s} \cos \theta^*, \\ \frac{\partial \delta}{\partial s} \cos \alpha &= \frac{\partial \alpha^*}{\partial s} \sin \theta^*, \\ \frac{\partial \delta}{\partial s} \sin \alpha &= \frac{\partial \theta^*}{\partial s}. \end{aligned} \right\} \quad (3.3)$$

Додаючи квадрати першої і другої залежностей системи (3.3), будемо мати

$$\left(\frac{\partial \alpha^*}{\partial s} \right)^2 = \left(\frac{\partial \alpha}{\partial s} + \frac{\partial \delta}{\partial s} \cos \alpha \right)^2. \quad (3.4)$$

На основі (3.3), (3.4) запишемо

$$\theta^* = \int \frac{\partial \delta(s)}{\partial s} \sin \alpha(s) ds + \theta_0^*, \quad (3.5)$$

$$\alpha^* = \int \left[\frac{\partial \alpha(s)}{\partial s} + \frac{\partial \delta(s)}{\partial s} \cos \alpha(s) \right] ds + \alpha_0^*. \quad (3.6)$$

Попередньо додаючи квадрати лівих і правих частин другої і третьої залежностей системи (3.3), знайдемо наступні взаємозв'язки між кутами α, δ і кутами α^*, θ^*

$$\alpha = \int \frac{\partial \alpha^*(s)}{\partial s} \cos \theta^*(s) ds + \alpha_0, \quad (3.7)$$

$$\delta = \int \left[\frac{\partial \alpha^*(s)}{\partial s} \sin \theta^*(s) + \frac{\partial \theta^*(s)}{\partial s} \right] ds + \delta_0. \quad (3.8)$$

У виразах (3.5)-(3.8) початкові значення відповідних параметрів позначено через $\theta_0^*, \alpha_0^*, \alpha_0, \delta_0$.

Одержані залежності дозволяють визначати параметри гвинтової лінії, перерізуючі сили і моменти, як функції дугової координати s пружної лінії, азимута θ^* і зенітного кута α^* свердловини.

Декілька слів про приріст просторового кута викривлення Δi . За формулою М.М. Александра

$$\Delta i = \sqrt{(\Delta \alpha^*)^2 + (\Delta \theta^* \sin \alpha_{\text{серед.}}^*)^2}, \quad (3.9)$$

де $\Delta \alpha^*$ – модуль різниці кутів на початку α_1^* і в кінці α_2^* інтервалу l ; $\Delta \theta^*$ – модуль різниці азимутальних кутів θ_1^* і θ_2^* ; l – відстань між точками, в яких інклінометром замірюють α^* и θ^* ; $\alpha_{\text{серед.}}^*$ – середнє значення зенітного кута.

Якщо різниця початкового і кінцевого значень азимута перевищує 360° , тоді

$$\Delta \theta^* = (360^\circ - \theta_2^*) + \theta_1^*. \quad (3.10)$$

За допомогою (3.5), (3.6) можна виразити Δi через α, δ і говорити, користуючись [3] та одержаним виразом, про інтенсивність викривлення, визначати притискуючі сили і сили опору за різних умов буріння, а також аналітично знаходити власну вагу ділянки бурильної колони у викривленій свердловині.

4. Кінематика спіральновигнутої ділянки бурильної колони

За певного поєднання навантажень ділянка бурильної колони набуває рівноважної форми у вигляді спіралі. Для встановлення зв'язку між рухом бурильної колони у свердловині орієнтованій довільно у просторі і параметрами, що характеризують її пружний стан, припустимо, що ділянка колони рухається поступально в напрямі осі свердловини зі швидкістю \bar{v}_s і обертається навколо цієї осі з кутовою швидкістю $\bar{\Omega}$. Остання є швидкістю обертання розрахункової системи координат, орти $\bar{x}_0, \bar{y}_0, \bar{z}_0$ якої – функції часу t і дугової координати s .

Для похідних від ортів за часом справджується співвідношення

$$\frac{\partial \bar{x}_0}{\partial t} = \bar{\Omega} \times \bar{x}_0, \quad \frac{\partial \bar{y}_0}{\partial t} = \bar{\Omega} \times \bar{y}_0, \quad \frac{\partial \bar{z}_0}{\partial t} = \bar{\Omega} \times \bar{z}_0. \quad (4.1)$$

Проекції вектора $\bar{\Omega}$ на осі розрахункової системи координат подамо через кутові зміщення $\alpha(s, t), \delta(s, t), \beta(s, t), \gamma(s, t)$

$$\left. \begin{aligned} \Omega_x &= \frac{\partial \alpha}{\partial t} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \sin \gamma, \\ \Omega_y &= -\frac{\partial \alpha}{\partial t} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma, \\ \Omega_z &= \frac{\partial \alpha}{\partial t} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \gamma}{\partial t}. \end{aligned} \right\} \quad (4.2)$$

Встановимо зв'язок між векторами $\bar{\omega}$ і $\bar{\Omega}$, попередньо зауваживши, що абсолютні похідні згаданих векторів відповідно по s і t рівні локальним.

Оскільки

$$\frac{\partial' \bar{\Omega}}{\partial s} = \frac{\partial \bar{\Omega}}{\partial s} - \bar{\omega} \times \bar{\Omega}, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial' \bar{\omega}}{\partial s} = \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial s} - \bar{\Omega} \times \bar{\omega}, \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial' \bar{\Omega}}{\partial s} - \frac{\partial' \bar{\omega}}{\partial t} + \bar{\Omega} \times \bar{\omega} = 0, \quad (4.5)$$

$$\text{то } \frac{\partial \bar{\Omega}}{\partial s} - \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial t} - \bar{\Omega} \times \bar{\omega} = 0. \quad (4.6)$$

Для плоскої кривої

$$\frac{\partial \Omega_z}{\partial s} = \frac{\partial \omega_z}{\partial t}. \quad (4.7)$$

Зв'язок між лінійною швидкістю руху стрижня \bar{v} , вектором повної кривини лінії $\bar{\omega}$ і кутовою швидкістю обертання ортів розрахункової системи $\bar{\Omega}$ встановлюється за допомогою кінематичного рівняння вигляду

$$\frac{\partial' \bar{v}}{\partial s} + \bar{\omega} \times \bar{v} = \bar{\Omega} \times \bar{z}_0. \quad (4.8)$$

У проекціях на осі розрахункової системи координат вираз (4.8) набуде вигляду

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial v_x}{\partial s} + v_z q - v_y r &= \Omega_y, \\ \frac{\partial v_y}{\partial s} + v_x r - v_z p &= -\Omega_x, \\ \frac{\partial v_z}{\partial s} + v_y p - v_x q &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.9)$$

На рис.2 зображено ділянку бурильної колони 1 у свердловині 2. Точкою M позначено поточну координату пружної лінії 3.

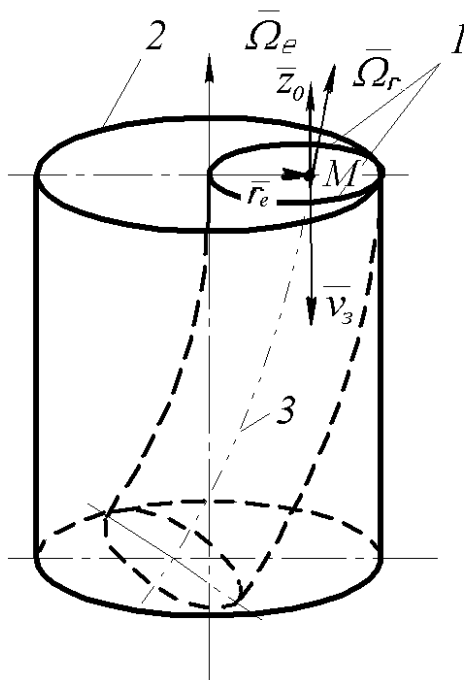


Рис.2. До визначення швидкості \bar{v} виділеної ділянки колони

Подамо швидкість руху виділеної ділянки бурильної колони через усереднену швидкість поглиблення вибою свердловини

$$\bar{v}_e = -v_e \bar{z}_0, \quad (4.10)$$

а також кутову швидкість обертання $\bar{\Omega}_e$ колони бурильних труб навколо осі свердловини 4 та кутову швидкість обертання $\bar{\Omega}_r$ колони навколо власної осі 5. Використовуючи формулу Л. Ейлера, запишемо

$$\bar{v} = \bar{\Omega}_e \times \bar{r}_e + \bar{v}_3 + \bar{\Omega}_r \times \bar{r}_r. \quad (4.11)$$

Величина r_e рівна піврізниці діаметрів свердловини і бурильної труби, а $r_r = 0$. З урахуванням цього запишемо (4.11) в проекціях на осі розрахункової системи координат

$$\begin{aligned} v_x &= \Omega_e \frac{D-d}{2} \sin \gamma, \\ v_y &= \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma, \\ v_z &= -v_3. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Відзначимо, що кут закручування γ залежить від $\bar{\Omega}_r$. Величина кута γ потрібна для правильного вибору кута довороту відхиляючого пристрою при похилоскерваному бурінні.

Підкладаючи (4.12) в (4.9), одержимо

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s} \left(\Omega_e \frac{D-d}{2} \sin \gamma \right) + v_z q - v_y r &= \Omega_y, \\ \frac{\partial}{\partial s} \left(\Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \right) + v_z r - v_x p &= -\Omega_x, \\ -\frac{\partial v_3}{\partial s} + v_y p - v_x q &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.13)$$

Одержані співвідношення дозволяють визначати швидкість довільної координати пружної лінії за поступального і обертального рухів спіральновигнутої бурильної колони.

5. Рівняння рівноваги невідних ділянок бурильної колони у свердловині орієнтованій довільно в просторі

Виведемо залежності для визначення сил у перерізах бурильної колони за її взаємодії зі стінками свердловини. Нехай ділянка колони під дією кінцевих сил і моментів набуває просторової орієнтації, обертається навколо осі свердловини з переносною кутовою швидкістю $\bar{\Omega}_e$ і навколо власної осі з відносною швидкістю $\bar{\Omega}_r$, а також рухається поступально в напрямі осі свердловини з переносною швидкістю \bar{v}_e . Вісь пружної лінії ділянки колони, а також розрахункова і опорна системи координат у вертикальній і похилій свердловинах зображені на рис.3.

Запишемо складові розподіленої сили

$$\bar{q} = -\rho g \bar{\zeta}_0 \quad (5.1)$$

в проекціях на осі опорної і розрахункової систем координат. Вектор \bar{q} є стежною силою напрямленою паралельно осі ζ , тому

$$q_\xi = 0, \quad q_\eta = 0, \quad q_\zeta = -\rho g, \quad (5.2)$$

де $\rho = m/l$ – маса одиниці довжини бурильної колони, m – маса виділеної ділянки труб довжини l , g – прискорення земного тяжіння.

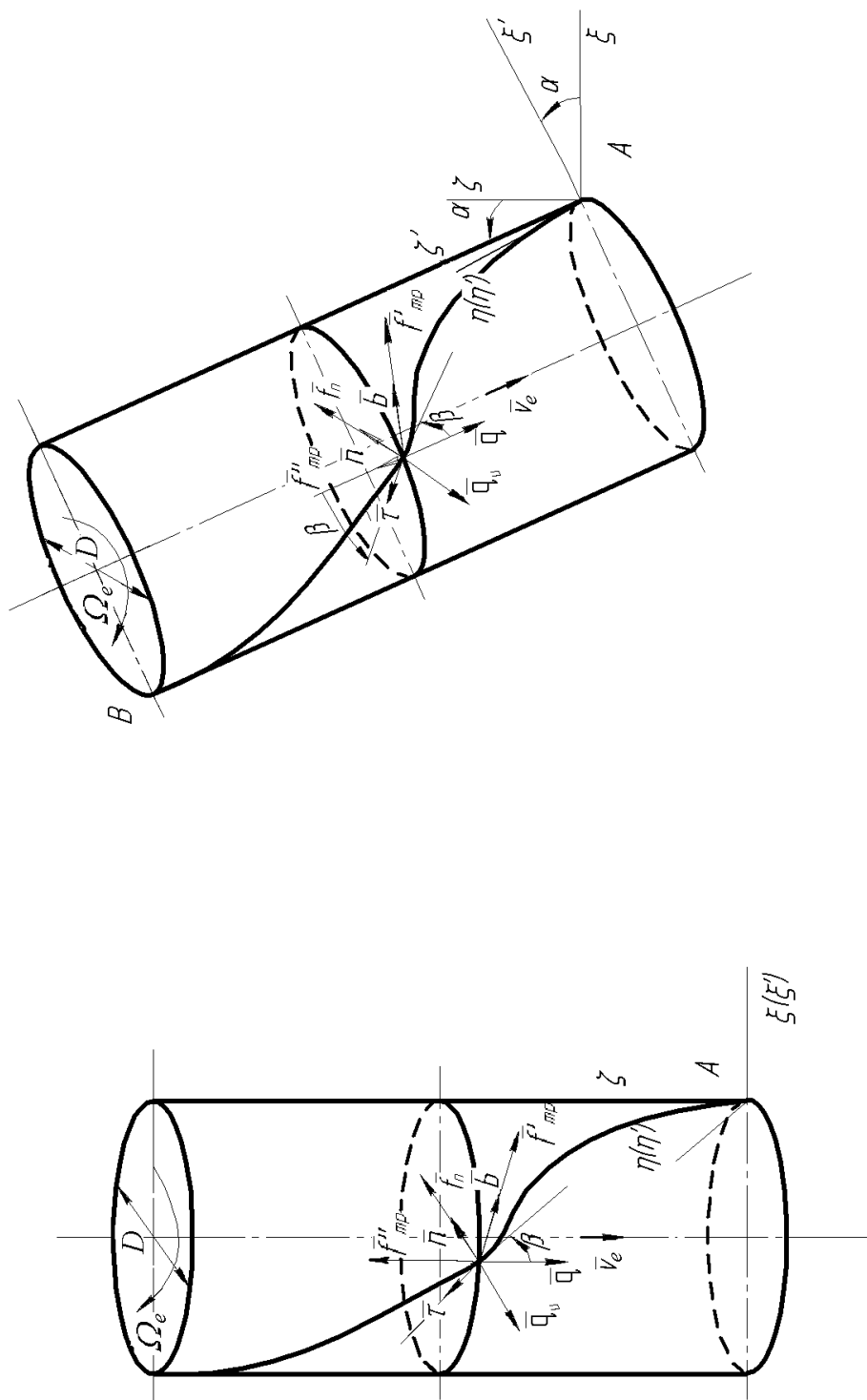


Рис.3. До визначення проекцій складових головних векторів зовнішніх сили і моменту, прикладених до ділянки колони у вертикальній (а) і похилій (б) свердловинах

Проектуючи вектор \bar{q} на осі розрахункової системи координат, одержимо

$$\left. \begin{aligned} q_x &= -\rho g (\sin \alpha \sin \gamma - \cos \alpha \sin \beta \cos \gamma), \\ q_y &= -\rho g (\sin \alpha \cos \gamma + \cos \alpha \sin \beta \sin \gamma), \\ q_z &= -\rho g \cos \alpha \cos \beta. \end{aligned} \right\} \quad (5.3)$$

Якщо в (5.3) підкласти $\alpha = 0$, то одержимо проекції розподілених по довжині сил, що діють на зігнуту у вертикальній свердловині гвинтову спіраль, тобто на виділену ділянку бурильної колони.

Нормальна складова \bar{q}_n розподіленої сили урівноважується реакцією стінки свердловини

$$\bar{f}_n = \bar{n}(q_x \cos \gamma - q_y \sin \gamma) = \bar{n} \rho g \sin \beta = \bar{n} f_n. \quad (5.4)$$

Тангенціальна складова \bar{q}_τ зінтегрована по довжині виділеної ділянки пружної лінії, урівноважується кінцевою силою, тобто осьюовою складовою реакції вибою свердловини.

Під час руху ділянки колони у свердловині виникає розподілена по довжині сила тертя \bar{f}_{mp} , яку можна подати сумою двох доданків

$$\bar{f}_{mp} = \bar{f}'_{mp} + \bar{f}''_{mp}, \quad (5.5)$$

де $\bar{f}'_{mp}, \bar{f}''_{mp}$ – складові розподіленої сили тертя, що виникають відповідно при обертанні колони та поглибленні вибою свердловини і визначаються за формулами

$$f'_{mp} = \mu' f_n + f'_0, \quad (5.6)$$

$$f''_{mp} = \mu'' f_n + f''_0. \quad (5.7)$$

Відмінність у значеннях μ' і μ'' , f'_0 і f''_0 зумовлена анізотропією породи.

Напрямок сили тертя \bar{f}'_{mp} при обертанні колони за і проти руху годинникової стрілки зображено на рис.4а і 4б.

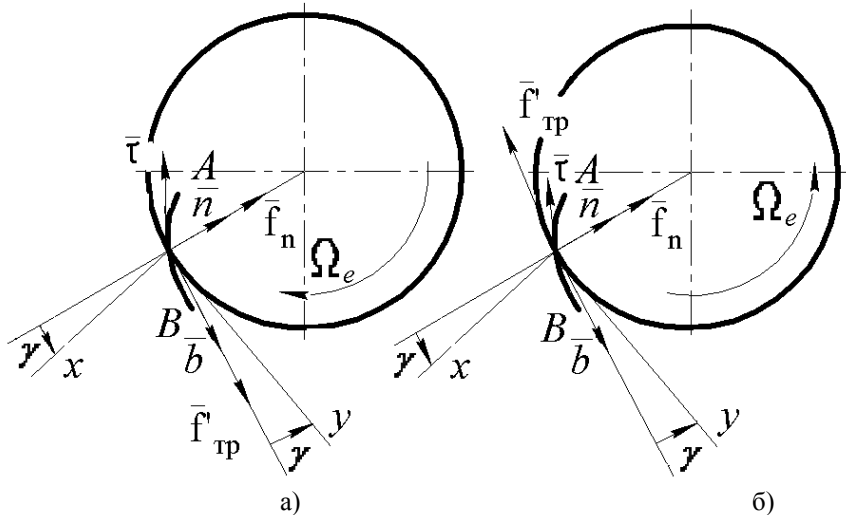


Рис.4. До визначення напрямку сили \bar{f}'_{mp}

У загальному випадку напрям вектора \vec{f}'_{mp} залежить від співвідношення векторів кутової швидкості обертання навколо осі свердловини $\vec{\Omega}_e$ та навколо власної осі бурильної колони $\vec{\Omega}_r$. Вектор абсолютної кутової швидкості $\vec{\Omega}$ визначається за теоремою про додавання миттєвих обертальних рухів навколо осей, що перетинаються

$$\vec{\Omega} = \vec{\Omega}_e + \vec{\Omega}_r. \quad (5.8)$$

За перекочування колони стінкою свердловини в бік протилежний кутовому зміщенню обертача, величина лінійної швидкості точки взаємодії колони зі стінкою визначається формулою

$$\tilde{v}_a = \Omega_e \frac{D}{2} - \Omega_r \frac{d}{2}, \quad (5.9)$$

де D – діаметр свердловини, d – діаметр бурильної колони.

Якщо $\tilde{v}_a > 0$, то напрям сили \vec{f}'_{mp} співпадає з напрямом бінормалі, якщо $\tilde{v}_a < 0$ – протилежний йому. Коли ж $\tilde{v}_a = 0$, то $\vec{f}'_{mp} = 0$.

Розподілене інерційне навантаження, що пов'язане з відцентровими силами і виникає внаслідок обертання колони навколо осі свердловини з кутовою швидкістю Ω_e , складе

$$q_u = \frac{q(D-d)}{2g} \Omega_e^2 = 0,5\rho(D-d)\Omega_e^2. \quad (5.10)$$

Тепер можна, користуючись принципом Германа-Ейлера-д'Аламбера, одержати векторні рівняння для визначення внутрішніх сил і моментів

$$\vec{Q} = -\int(\vec{q} + \vec{f}_n + \vec{f}_{mp} + q_u)ds + \vec{C}_1 = \int \vec{F}ds + \vec{C}_1, \quad (5.11)$$

$$\vec{L} = -\int(\vec{z}_0 + \vec{Q} + \vec{l} + \vec{f}_{mp})ds + \vec{C}_2 = \int \vec{M}ds + \vec{C}_2. \quad (5.12)$$

Для свердловини орієнтованої довільно у просторі проекції сили \vec{F} і моменту \vec{M} на осі розрахункової системи координат визначаються наступним чином

$$\left. \begin{aligned} F_x &= -q_x + (f_n - q_u) \cos \gamma - f'_{mp} \sin \gamma, \\ F_y &= -q_y - (f_n - q_u) \sin \gamma - f'_{mp} \cos \gamma, \\ F_z &= -q_z - f''_{mp} \cos \beta; \end{aligned} \right\} \quad (5.13)$$

$$\left. \begin{aligned} M_x &= Q_y + f''_{mp} \frac{d}{2} \cos \beta \sin \gamma, \\ M_y &= -Q_z + f''_{mp} \frac{d}{2} \cos \beta \cos \gamma, \\ M_z &= -f''_{mp} \frac{d}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (5.14)$$

Для вертикальної свердловини за $\tilde{v}_a > 0$ будемо мати

$$\left. \begin{aligned} F_x &= -0,5\rho(D-d)\Omega_e^2 \cos \gamma - (\mu'\rho g \sin \beta + f'_0) \sin \gamma, \\ F_y &= 0,5\rho(D-d)\Omega_e^2 \sin \gamma - (\mu'\rho g \sin \beta + f'_0) \cos \gamma, \\ F_z &= \rho g \cos \beta - (\mu''\rho g \sin \beta + f''_0) \cos \beta; \end{aligned} \right\} \quad (5.15)$$

$$\left. \begin{aligned} M_x &= Q_y + 0,5d(\mu''\rho g \sin \beta + f''_0) \cos \beta \sin \gamma, \\ M_y &= -Q_x + 0,5d(\mu''\rho g \sin \beta + f''_0) \cos \beta \cos \gamma, \\ M_z &= -0,5d(\mu'\rho g \sin \beta + f'_0). \end{aligned} \right\} \quad (5.16)$$

Доданки у правих частинах (5.14) одержуємо, розкриваючи визначники

$$\bar{z}_0 \times \bar{Q} = \begin{vmatrix} \bar{x}_0 & \bar{y}_0 & \bar{z}_0 \\ 0 & 0 & 1 \\ Q_x & Q_y & Q_z \end{vmatrix}, \quad (5.17)$$

$$\bar{l} \times \bar{f}_{mp} = \begin{vmatrix} \bar{x}_0 & \bar{y}_0 & \bar{z}_0 \\ \frac{d}{2} \cos \gamma & -\frac{d}{2} \sin \gamma & 0 \\ f'_{mp} \sin \gamma & f'_{mp} \cos \gamma & f''_{mp} \cos \beta \end{vmatrix}. \quad (5.18)$$

Для похилої свердловини залежності (5.13), (5.14) мають вигляд

$$\left. \begin{aligned} F_x &= \rho g \sin \alpha \sin \gamma - 0,5\rho(D-d)\Omega_e^2 \cos \gamma - \\ &\quad - (\mu'\rho g \cos \alpha \sin \beta + f'_0) \sin \gamma, \\ F_y &= \rho g \sin \alpha \sin \gamma + 0,5\rho(D-d)\Omega_e^2 \sin \gamma - \\ &\quad - (\mu'\rho g \cos \alpha \sin \beta + f'_0) \cos \gamma, \\ F_z &= \rho g \cos \alpha \cos \beta - (\mu''\rho g \cos \alpha \sin \beta + f''_0) \cos \beta; \end{aligned} \right\} \quad (5.19)$$

$$\left. \begin{aligned} M_x &= Q_y + 0,5d(\mu''\rho g \cos \alpha \sin \beta + f''_0) \cos \beta \sin \gamma, \\ M_y &= -Q_x + 0,5d(\mu''\rho g \cos \alpha \sin \beta + f''_0) \cos \beta \cos \gamma, \\ M_z &= -0,5d(\mu'\rho g \cos \alpha \sin \beta + f'_0). \end{aligned} \right\} \quad (5.20)$$

Вирази (5.15)-(5.20) неважко переписати і для $\tilde{v}_a < 0$. Через очевидність необхідних перетворень ці співвідношення тут не наводимо.

Якщо переносна кутова швидкість $\bar{\Omega}_e$ і сила тертя \bar{f}_{mp} дорівнюють нулю (буріння з вибійним двигуном), то для колони у вигляді гвинтової спіралі, що знаходиться у вертикальній свердловині, одержимо

$$\left. \begin{aligned} F_x &= -q_x + f_n \cos \gamma = 0, \\ F_y &= -q_y - f_n \sin \gamma = 0, \\ F_z &= -q_z - f''_{mp} \cos \beta = \rho g \cos \beta - (\mu''\rho g \sin \beta + f''_0) \cos \beta; \end{aligned} \right\} \quad (5.21)$$

$$M_x = Q_y + f_{mp} \frac{d}{2} \cos \beta \sin \gamma = Q_y + 0,5d(\mu'' \rho g \sin \beta + f_0'') \cos \beta \sin \gamma ,$$

$$M_y = -Q_x + f_{mp}'' \frac{d}{2} \cos \beta \cos \gamma = -Q_x + 0,5d(\mu'' \rho g \sin \beta + f_0'') \cos \beta \cos \gamma , \quad (5.22)$$

$$M_z = 0 .$$

Якщо $\alpha \neq 0$, то ці рівняння набудуть вигляду

$$\left. \begin{aligned} F_x &= \rho g \sin \alpha \sin \gamma , \\ F_y &= \rho g \sin \alpha \cos \gamma , \\ F_z &= \rho g \cos \alpha \cos \beta - (\mu'' \rho g \cos \alpha \sin \beta + f_0'') \cos \beta , \end{aligned} \right\} \quad (5.23)$$

$$\left. \begin{aligned} M_x &= Q_y + 0,5d(\mu'' \rho g \sin \beta + f_0'') \cos \beta \sin \gamma , \\ M_y &= -Q_x + 0,5d(\mu'' \rho g \sin \beta + f_0'') \cos \beta \cos \gamma , \\ M_z &= 0 . \end{aligned} \right\} \quad (5.24)$$

Залежності (5.13)-(5.24) можна використати для дослідження просторових форм рівноваги невеличких ділянок бурильної колони за очищення свердловини газом або повітрям. Вплив їхнього тиску на стійкість бурильної колони можна оцінити так само, як і вплив тиску промивальної рідини.

6. Вивчення взаємодії бурильної колони зі свердловиною з урахуванням впливу промивальної рідини

Включення до рівняння рівноваги (1.1) складових, що враховують рух промивальної рідини в трубі і затрубному просторі, дає можливість зібрати разом весь комплекс чинників, що визначають з високою точністю перерізуючі сили і моменти, силу тиску труби на стінку свердловини, кривину і кручення пружної лінії бурильної колони.

Абсолютні швидкості промивальної рідини в трубі і затрубному просторі подамо відповідно сумою відносних і переносних складових

$$\bar{v}_1 = \bar{v}_1^r + \bar{v}_1^e , \quad (6.1)$$

$$\bar{v}_2 = \bar{v}_2^r + \bar{v}_2^e . \quad (6.2)$$

Відносні складові швидкостей \bar{v}_1^r і \bar{v}_2^r пов'яжемо з рухом рідини в трубі та затрубному просторі, коли швидкість поглиблення вибою рівна нулю, а переносні \bar{v}_1^e і \bar{v}_2^e – з переміщенням колони вздовж осі свердловини.

Якщо враховується розтяг стрижня, то відносні складові швидкостей є функціями часу t і дугової координати пружної лінії s .

Якщо розтяг стрижня не враховується, то ці складові є функціями тільки часу t .

Визначимо взаємозв'язки між параметрами руху промивальної рідини, ділянки бурильної колони і параметрами пружної лінії. Знайдемо повну похідну радіус-вектора точок осьової лінії течії рідини в часі

$$\frac{d\bar{r}[s(t), t]}{dt} = \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{r}}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial t} . \quad (6.3)$$

Перший доданок є локальною похідною і характеризує зміну в часі координат перерізу колони при фіксованому значенні дугової координати s . Другий доданок визначає конвективну (переносну) похідну і відповідає за зміну координат точок осьової лінії течії рідини. Похідна $\frac{\partial s}{\partial t}$ відповідає за переносну швидкість промивальної рідини.

Рівняння (6.3) для рухомої рідини в трубці перепишемо у вигляді

$$\frac{\partial \bar{r}[s(t), t]}{\partial t} = \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} - \frac{\partial \bar{r}}{\partial s} v_1^r, \quad (6.4)$$

а для затрубної рухомої рідини

$$\frac{\partial \bar{r}[s(t), t]}{\partial t} = \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{r}}{\partial s} v_2^r. \quad (6.5)$$

Знайдемо абсолютні прискорення усталеного руху рідини в трубці та затрубному просторі

$$\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial t^2} - 2v_1^r \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial s \partial t} + (v_1^r)^2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial s^2}, \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial t^2} + 2v_2^r \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial s \partial t} + (v_2^r)^2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial s^2}. \quad (6.7)$$

За сталої витрати рідини відносні швидкості v_1^r і v_2^r будемо вважати постійними, т.б.

$$\frac{\partial' v_1^r}{\partial t} = \frac{\partial' v_2^r}{\partial t} = 0, \quad (6.8)$$

тому залежності (6.6), (6.7) можна подати у вигляді

$$\frac{\partial \bar{v}_1}{\partial t} = \frac{\partial(\bar{v}_1^e + \bar{v}_1^r)}{\partial t} = \frac{\partial' \bar{v}_1^e}{\partial t} + \bar{\Omega} \times \bar{v}_1^e + 2\bar{\Omega} \times \bar{v}_1^r - \frac{\partial' \bar{v}_1^r}{\partial s} v_1^r - (\bar{\omega} \times \bar{v}_1^r) v_1^r, \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial \bar{v}_2}{\partial t} = \frac{\partial(\bar{v}_2^e + \bar{v}_2^r)}{\partial t} = \frac{\partial' \bar{v}_2^e}{\partial t} + \bar{\Omega} \times \bar{v}_2^e + 2\bar{\Omega} \times \bar{v}_2^r - \frac{\partial' \bar{v}_2^r}{\partial s} v_2^r - (\bar{\omega} \times \bar{v}_2^r) v_2^r. \quad (6.10)$$

У нашому випадку

$$\bar{v}_1^r(s, t) = -\bar{v}_1^r \bar{z}_0, \quad (6.11)$$

$$\bar{v}_2^r(s, t) = \bar{v}_2^r \bar{z}_0. \quad (6.12)$$

Складові $\bar{\Omega}$ визначаються виразами (4.2), а складові $\bar{\omega}$ – виразами (2.2), в яких повні похідні по s замінено частинними.

Враховуючи (4.10)-(4.12), спроектуємо (6.9), (6.10) на осі розрахункової системи координат

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\partial v_1}{\partial t} \right)_x &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\Omega_e \frac{D-d}{2} \sin \gamma \right) - \Omega_y v_3 - \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \cdot \Omega_z - 2\Omega_y v_1^r + (v_1^r)^2 p, \\ \left(\frac{\partial v_1}{\partial t} \right)_y &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \right) + \Omega_x v_3 + \Omega_e \frac{D-d}{2} \sin \gamma \cdot \Omega_z + 2\Omega_x v_1^r - (v_1^r)^2 p, \\ \left(\frac{\partial v_1}{\partial t} \right)_z &= -\frac{\partial v_3}{\partial t} + \Omega_x \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma - \Omega_e \frac{D-d}{2} \sin \gamma \cdot \Omega_y + v_1^r \frac{\partial v_1^r}{\partial s}; \end{aligned} \right\} \quad (6.13)$$

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\partial v_2}{\partial t}\right)_x &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\Omega_e \frac{D-d}{2} \sin \gamma \right) - \Omega_y v_3 - \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \cdot \Omega_z + 2\Omega_y v_3^r + (v_2^r)^2 q, \\ \left(\frac{\partial v_2}{\partial t}\right)_y &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \right) + \Omega_x v_3 + \Omega_e \frac{D-d}{2} \sin \gamma \cdot \Omega_z - 2\Omega_x v_2^r - (v_2^r)^2 p, \\ \left(\frac{\partial v_2}{\partial t}\right)_z &= -\frac{\partial v_3}{\partial t} + \Omega_x \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma - \Omega_e \frac{D-d}{2} \sin \gamma \cdot \Omega_y + v_2^2 \frac{\partial v_2^r}{\partial s}. \end{aligned} \right\} (6.14)$$

Одержані взаємозв'язки (6.13), (6.14) необхідні для урахування інерційних складових руху рідини при складанні рівнянь умовної рівноваги ділянки бурильної колони у свердловині.

Звернемось до зображення на рис.5 ділянки бурильної колони, для якої

$$\bar{v}_3 = 0, \quad \bar{\Omega}_e = \bar{\Omega}_r = 0. \quad (6.15)$$

Оскільки колона нерухома, то усі згадувані нами параметри залежать тільки від кутової координати s пружної лінії.

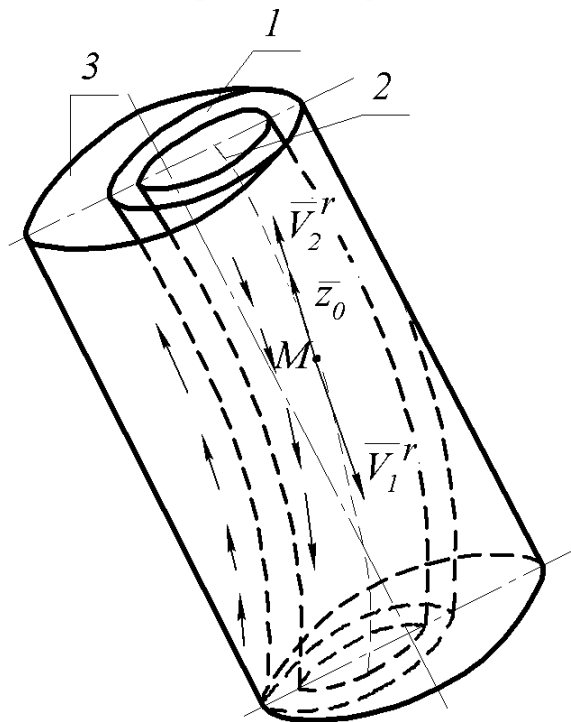


Рис.5. До оцінки впливу промивальної рідини для нерухокої ділянки бурильної колони

Для опису руху достатньо знати тільки положення виділеної ділянки труби в часі та внутрішні силу і момент у фіксованому перерізі. Розділимо рух ділянки труби на відносний та переносний.

У нашому випадку рух рідини розглядається разом з рухом труби. Якщо рідина нестислива, то відносна швидкість не залежить від руху труби.

Виділимо ділянку труби 1, рідину 2, що рухається в трубі, та промивальну рідину 3 (разом зі шламом), що рухається в затрубному просторі, і запишемо, користуючись принципом д'Аламбера, рівняння рівноваги сил

$$\frac{\partial \bar{Q}}{\partial s} + \bar{f}_1^e + \bar{f}_2^e = \bar{F}, \quad (6.16)$$

$$\frac{\partial(S_1 p_1 \bar{z}_0)}{\partial s} + \bar{f}_1^e = \bar{F}_1, \quad (6.17)$$

$$\frac{\partial(S_2 p_2 \bar{z}_0)}{\partial s} + \bar{f}_2^e = \bar{F}_2, \quad (6.18)$$

де \bar{f}_1^e , \bar{f}_2^e – розподілені по довжині сили взаємодії відповідно між трубою і рідиною в ній та між трубою і затрубною рідиною; S_1 , p_1 – площа отвору і тиск рідини в трубі; S_2 , p_2 – площа поперечного перерізу затрубного простору і тиск рідини в ньому; \bar{z}_0 – орт дотичної до пружної лінії бурильної колони. Вектори \bar{F}_1 і \bar{F}_2 визначаються за формулами

$$\bar{F}_1 = m_1 g \bar{z}_0 - \psi_1 m_1 \frac{d\bar{v}_1}{dt}, \quad (6.19)$$

$$\bar{F}_2 = m_2 g \bar{z}_0 - \psi_2 m_2 \frac{d\bar{v}_2}{dt}, \quad (6.20)$$

де ψ_1 , ψ_2 – коректувальні коефіцієнти, що залежать від дугової координати s . У першому приближенні їх можна прийняти постійними.

Для визначення \bar{f}_1^e і \bar{f}_2^e можна скористатись теоремою Ейлера про рівність нулю векторної суми головних векторів об'ємних і поверхневих сил та векторів кількостей руху мас рідини, що входить і виходить через два якихось перерізи труби за одиницю часу.

Якщо осі бурильної колони і свердловини не співпадають, то для визначення розподілених по довжині сил взаємодії труби і затрубної рідини можна скористатись міркуваннями, наведеними в роботі [4]. Ексцентричний кільцевий простір (рис.6) розбивається на сектори, кожен з яких розглядається як еквівалентна часина відповідного кільцевого простору. Відстані між стінкою свердловини і трубою приймаються рівними різниці радіусів свердловини і частинами кільця, що відповідає розглядуваному сектору.

Радіус R_2 утворює в кожному секторі однакові області. В одному з секторів рідина може мати ламінарний характер течії, в другому – турбулентний, в третьому – залишатись нерухомою. За основу взято припущення, що течія в одному секторі не впливає на течію в сусідньому секторі.

Є тільки дві спільних характеристики секторів: градієнт руху рідини в кільцевому просторі ті діаметр свердловини.

Якщо $S_1 = const$, $S_2 = const$ і рух рідини стаціонарний, то

$$\frac{d\bar{v}_1}{dt} = -\frac{d\bar{v}_1}{ds} v_1^r = (v_1^r)^2 \frac{d\bar{z}_0}{ds} = (v_1^r)^2 (\bar{\omega} \times \bar{z}_0), \quad (6.21)$$

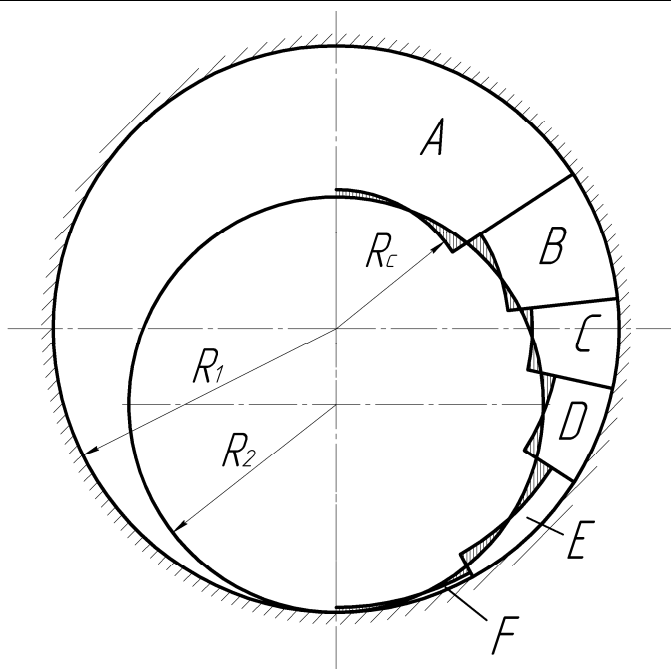


Рис.6. Поділ на сектори ексцентричного кільцевого простору

Рівності (6.21), (6.22) одержано на підставі подання через змінні Ейлера повних похідних від швидкостей $\bar{v}_1(s,t)$ і $\bar{v}_2(s,t)$ з урахуванням (6.8).

Подамо маси m_1 і m_2 через густини промивальної рідини в трубі і затрубної рідини (з урахуванням шламу)

$$m_1 = \frac{\rho_1}{g} S_1, \quad (6.23)$$

$$m_2 = \frac{\rho_2}{g} S_2 \quad (6.24)$$

Виключаючи з (6.16)-(6.18) розподілені по довжині сили \bar{f}_1^b і \bar{f}_2^b , приходимо до одного векторного рівняння

$$\frac{d\bar{Q}^*}{ds} = \bar{F}^*, \quad (6.25)$$

де

$$\begin{aligned} \bar{Q}^* &= \bar{Q} - (S_1 p_1 + S_2 p_2) \cdot \bar{z}_0 - \left[\psi_1 m_1 (v_1^r)^2 + \psi_2 m_2 (v_2^r)^2 \right] \cdot \bar{z}_0 = \\ &= Q_x \bar{x}_0 + Q_y \bar{y}_0 + \left[Q_z - S_1 p_1 - S_2 p_2 - \psi_1 \frac{\rho_1}{g} S_1 (v_1^r)^2 - \psi_2 \frac{\rho_2}{g} S_2 (v_2^r)^2 \right] \cdot \bar{z}_0 = \\ &= Q_x^* \bar{x}_0 + Q_y^* \bar{y}_0 + Q_z^* \bar{z}_0, \end{aligned} \quad (6.26)$$

$$\begin{aligned}
\bar{F}^* &= \bar{F} - g(m_1 + m_2)\bar{\zeta}_0 = \{F_x - (\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2)\} \times \\
&\times [\sin \alpha \sin \gamma - \cos \alpha \sin(\delta + \beta) \cos \gamma] \bar{x}_0 + \{F_y - (\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2)\} \times \\
&\times [\sin \alpha \cos \gamma + \cos \alpha \sin(\delta + \beta) \sin \gamma] \bar{y}_0 + [F_z - (\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2)\} \times \\
&\times \cos \alpha \cos(\delta + \beta)] \bar{z}_0 = F_x^* \bar{x}_0 + F_y^* \bar{y}_0 + F_z^* \bar{z}_0.
\end{aligned} \tag{6.27}$$

Для одержання (6.26), (6.27) використано співвідношення (6.15)-(6.24) і таблиця косинусів 2.10. Складові F_x , F_y , F_z головного вектора зовнішніх сил визначаються за формулами (5.13). Для ідеальної рідини при $S_1 = const$, $S_2 = const$ вектори \bar{f}_1^e , \bar{f}_2^e ортогональні \bar{z}_0 .

Зв'яжемо тиск зі швидкістю ідеальної рідини

$$p_1 + \frac{m_1(v_1^r)^2}{2S_1} + \frac{m_1 g \zeta}{S_1} = const, \tag{6.28}$$

$$p_2 + \frac{m_2(v_2^r)^2}{2S_2} + \frac{m_2 g \zeta}{S_2} = const, \tag{6.29}$$

де ζ – апліката центра ваги виділеної ділянки колони в опорній системі координат (відстань від вибою свердловини до центра ваги ділянки).

Якщо S_1 , S_2 сталі, то (6.28), (6.29) з урахуванням (6.23), (6.24) перепишуться у вигляді

$$P_1 + \frac{\rho_1 S_1}{2g} (v_1^r)^2 + \rho_1 S_1 \zeta = const, \tag{6.30}$$

$$P_2 + \frac{\rho_2 S_2}{2g} (v_2^r)^2 + \rho_2 S_2 \zeta = const, \tag{6.31}$$

де

$$P_1 = p_1 S_1, \tag{6.32}$$

$$P_2 = p_2 S_2. \tag{6.33}$$

Вектори \bar{L} і \bar{Q} зв'язані залежністю

$$\frac{d\bar{L}}{ds} = \bar{Q} \times \bar{z}_0 + \bar{m} = 0. \tag{6.34}$$

Враховуючи, що

$$\bar{Q} \times \bar{z}_0 = \bar{Q}^* \times \bar{z}_0, \tag{6.35}$$

запишемо наступні системи рівнянь рівноваги у проєкціях на осі розра-хункової системи координат

$$\left. \begin{aligned}
\frac{dQ_x^*}{ds} + Q_z^* q - Q_y^* r &= F_x^*, \\
\frac{dQ_y^*}{ds} + Q_x^* r - Q_z^* p &= F_y^*, \\
\frac{dQ_z^*}{ds} + Q_y^* p - Q_x^* q &= F_z^*,
\end{aligned} \right\} \tag{6.36}$$

$$\left. \begin{aligned} A \frac{d}{ds} (p - p^0) + Cq(r - r^0) - Ar(q - q^0) &= M_x^*, \\ B \frac{d}{ds} (q - q^0) + Ar(p - p^0) - Cp(r - r^0) &= M_y^*, \\ C \frac{d}{ds} (r - r^0) + Ap(q - q^0) - Aq(p - p^0) &= M_z^*. \end{aligned} \right\} \quad (6.37)$$

В (6.37) M_x^* , M_y^* відрізняються від M_x , M_y тим, що в перші входять Q_y^* , Q_x^* а в другі – Q_y , Q_x ; $M_z = M_z^*$.

Додаючи до (6.36), (6.37) третє та четверте рівняння системи (1.1), одержимо повну систему рівнянь рівноваги бурильної колони з урахуванням впливу промивальної рідини.

Підкладаючи в (6.19) вираз (6.13), а в (6.20) – (6.14), одержимо рівняння умовної рівноваги рухомої колони з урахуванням впливу промивальної рідини, т.б. фактично будемо мати випадок роторного буріння.

7. Повна система рівнянь умовної рівноваги ділянки бурильної колони у свердловині

Наведемо повну систему рівнянь, що описує поведінку ділянки бурильної колони під дією розглядуваних в роботі навантажень. Якщо виконуються умови (6.8), $v_a > 0$, обертання зі швидкістю $\bar{\Omega}_e$ рівномірне, вибій поглиблюється рівномірно зі швидкістю \bar{v}_e , то для випадку вертикальної свердловини при роторному бурінні будемо мати

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial Q_x}{\partial s} + \left[Q_z - S_1 p_1 - S_2 p_2 - \psi_1 \frac{\rho_1}{g} S_1 (v_1^r)^2 - \right. \\ \left. - \psi_2 \frac{\rho_2}{g} S_2 (v_2^r)^2 \cdot \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma - Q_y \frac{\partial \gamma}{\partial s} = F_x^*, \right. \\ \frac{\partial Q_y}{\partial s} + Q_x \frac{\partial \gamma}{\partial s} - \left[Q_z - S_1 p_1 - S_2 p_2 - \psi_1 \frac{\rho_1}{g} S_1 (v_1^r)^2 - \right. \\ \left. - \psi_2 \frac{\rho_2}{g} S_2 (v_2^r)^2 \right] \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma = F_y^*, \\ \frac{\partial}{\partial s} \left[Q_z - S_1 p_1 - S_2 p_2 - \psi_1 \frac{\rho_1}{g} S_1 (v_1^r)^2 - \psi_2 \frac{\rho_2}{g} \times \right. \\ \left. \times S_2 (v_2^r)^2 \right] + Q_y \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma - Q_x \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma = F_z^*, \end{aligned} \right\} \quad (7.1)$$

$$\begin{aligned}
A \frac{\partial}{\partial s} \left[\frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma - p^0 \right] + Cq \left(\frac{\partial \gamma}{\partial s} - r^0 \right) - Ar \left[\frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma - q^0 \right] &= M_x^*, \\
A \frac{\partial}{\partial s} \left[\frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma - q^0 \right] + Ar \left[\frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma - p^0 \right] - Cp \left(\frac{\partial \gamma}{\partial s} - r^0 \right) &= M_y^*, \\
C \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \gamma}{\partial s} - r^0 \right) + A \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma \left[\frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma - \right. & \\
\left. A \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma \left[\frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma - p^0 \right] \right] &= M_z^*.
\end{aligned} \tag{7.2}$$

Далі розпишемо праві частини у співвідношеннях (7.1), (7.2). Наприклад,

$$\begin{aligned}
F_x^* &= -q_x + (f_n - q_n) \cos \gamma - f_{mp}' \sin \gamma + (\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2) \times \sin(\delta + \beta) \cos \gamma + + \frac{\rho_1}{g} S_1 \times \\
&\times \left[\Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \frac{\partial \gamma}{\partial t} - \frac{\partial \beta}{\partial t} \cos \gamma \cdot v_e - \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \frac{\partial \gamma}{\partial t} - 2 \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma \cdot v_1' \right] + \frac{\rho_2}{g} S_2 \times \\
&\times \left[\Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \frac{\partial \gamma}{\partial t} - \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma \cdot v_e - \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \frac{\partial \gamma}{\partial t} + 2 \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma \cdot v_2' \right].
\end{aligned}$$

Зводячи подібні та враховуючи, що урівноважується не тільки вага стрижня, а й рідини в трубі та затрубному просторі, одержимо

$$\begin{aligned}
F_x^* &= -0,5 \left(\rho + \rho_1 S_1 \right) (D-d) \Omega_e^2 \cos \gamma - [\mu' \rho g \sin(\delta + \beta) + f_0'] \cos \gamma - \frac{\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2}{g} \times \\
&\times \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma \cdot v_e - 2 \frac{\rho_1 S_1}{g} \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma \cdot v_1' + 2 \frac{\rho_2 S_2}{g} \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma \cdot v_2', \\
F_y^* &= 0,5 (\rho + \rho_1 S_1) (D-d) \Omega_e^2 \sin \gamma - [\mu' \rho g \sin(\delta + \beta) + f_0'] \times \sin \gamma - \frac{\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2}{g} \times \\
&\times \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \sin \gamma \cdot v_e + 2 \frac{\rho_1 S_1}{g} \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \sin \gamma \cdot v_1' - 2 \frac{\rho_2 S_2}{g} \times \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \sin \gamma \cdot v_2',
\end{aligned} \tag{7.3}$$

$$F_z^* = \rho g \cos(\delta + \beta) - [\mu'' \rho g \sin(\delta + \beta) + f_0''] \cos(\delta + \beta).$$

Складові моменти \bar{M}^* подамо у вигляді

$$\left. \begin{aligned}
M_x^* &= Q_y + 0,5d [\mu'' \rho g \sin(\delta + \beta) + f_0''] \times \cos(\delta + \beta) \sin \gamma, \\
M_y^* &= -Q_x + 0,5d [\mu'' \rho g \sin(\delta + \beta) + f_0''] \times \cos(\delta + \beta) \cos \gamma, \\
M_z^* &= -0,5d [\mu' \rho g \sin(\delta + \beta) + f_0'] .
\end{aligned} \right\} \tag{7.4}$$

Співвідношеннями (7.1)-(7.4) можна користуватись і для випадку буріння вибійним двигуном. Для цього в (7.3) слід прийняти $\bar{\Omega}_e = 0$.

Перепишемо систему рівнянь (7.1)-(7.4) для випадку похилої свердловини

$$\begin{aligned} & \frac{\partial Q_x}{\partial s} + \left[Q_z - S_1 p_1 - S_2 p_2 - \psi_1 \frac{\rho_1}{g} S_1 (v_1')^2 - \psi_2 \frac{\rho_2}{g} S_2 (v_2')^2 \right] \times \\ & \cdot \left[-\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma \right] - Q_y \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \gamma}{\partial s} \right] = F_x^*, \\ & \frac{\partial Q_y}{\partial s} + Q_x \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \gamma}{\partial s} \right] - \left[Q_z - S_1 p_1 - S_2 p_2 - \psi_1 \frac{\rho_1}{g} S_1 (v_1')^2 - \right. \\ & \left. - \psi_2 \frac{\rho_2}{g} S_2 (v_2')^2 \right] \times \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma \right] = F_y^*, \end{aligned} \quad (7.5)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial s} \left[Q_z - S_1 p_1 - S_2 p_2 - \psi_1 S_1 \frac{\rho_1}{g} (v_1')^2 - \psi_2 \frac{\rho_2}{g} S_2 (v_2')^2 \right] + Q_y \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \times \right. \\ & \left. \times \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma \right] - Q_x \left[-\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma \right] = F_z^*; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & A \frac{\partial}{\partial s} \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma - p^0 \right] + C \left[-\frac{\partial \alpha}{\partial s} \times \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \right. \\ & \left. + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma \right] \times \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \gamma}{\partial s} - r^0 \right] + A \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \gamma}{\partial s} \right] \times \\ & \times \left[-\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \times \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma - q^0 \right] = M_x^*, \\ & A \frac{\partial}{\partial s} \left[-\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma - q^0 \right] + \\ & + A \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \gamma}{\partial s} \right] \times \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma - p^0 \right] - \\ & - C \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma \right] \times \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \gamma}{\partial s} - r^0 \right] = M_y^*, \\ & C \frac{\partial}{\partial s} \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \alpha}{\partial s} - r^0 \right] + A \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma \right] \times \\ & \times \left[-\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \times \cos \gamma - q^0 \right] - A \left[-\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \right. \\ & \left. + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma \right] \times \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma - p^0 \right] = M_z^*; \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\left. \begin{aligned}
F_x^* &= \rho g \sin \alpha \sin \gamma - 0,5(\rho + \rho_1 S_1)(D-d)\Omega_e^2 \cos \gamma - \\
&- [\mu' \rho g \sin(\delta + \beta) \cos \alpha + f_0'] \sin \gamma - (\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2) \sin \alpha \sin \gamma + \\
&+ \left(\frac{\rho_1}{g} S_1 + \frac{\rho_2}{g} S_2 \right) \left\{ - \left[- \frac{\partial \alpha}{\partial t} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma \right] v_e - \right. \\
&- \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \frac{\partial \alpha}{\partial t} \sin(\delta + \beta) \left. \right\} - 2 \left[- \frac{\partial \alpha}{\partial t} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \right. \\
&+ \left. \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \cos \gamma \right] \left(\frac{\rho_1}{g} S_1 v_1^r - \frac{\rho_2}{g} S_2 v_2^r \right), \\
F_y^* &= \rho g \sin \alpha \sin \gamma + 0,5(\rho + \rho_1 S_1)(D-d)\Omega_e^2 \sin \gamma - \\
&- [\mu' \rho g \cos \alpha \sin(\delta + \beta) + f_0'] \cos \gamma - (\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2) \sin \alpha \sin \gamma + \\
&+ \left(\frac{\rho_1}{g} S_1 + \frac{\rho_2}{g} S_2 \right) \left\{ \left[\frac{\partial \alpha}{\partial t} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \sin \gamma \right] v_e + \right. \\
&+ \Omega_e \frac{D-d}{2} \cos \gamma \frac{\partial \alpha}{\partial t} \sin(\delta + \beta) \left. \right\} + 2 \left[\frac{\partial \alpha}{\partial t} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \right. \\
&+ \left. \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial t} \sin \gamma \right] \times \left(\frac{\rho_1}{g} S_1 v_1^r - \frac{\rho_2}{g} S_2 v_2^r \right), \\
F_z^* &= \rho g \cos \alpha \cos(\delta + \beta) - [\mu'' \rho g \cos \alpha \sin(\delta + \beta) + f_0''] \times \\
&\times \cos(\delta + \beta) - (\rho_1 S_1 + \rho_2 S_2) \cos \alpha \cos(\delta + \beta) + \\
&+ \frac{\partial \alpha}{\partial t} \times \cos(\delta + \beta) \Omega_e \frac{D-d}{2};
\end{aligned} \right\} (7.7)$$

$$\left. \begin{aligned}
M_x^* &= Q_y + 0,5d[\mu'' \rho g \cos \alpha \sin(\delta + \beta) + f_0''] \cos(\delta + \beta) \sin \gamma, \\
M_y^* &= -Q_x + 0,5d[\mu'' \rho g \cos \alpha \sin(\delta + \beta) + f_0''] \cos(\delta + \beta) \cos \gamma, \\
M_z^* &= -0,5d[\mu' \rho g \cos \alpha \sin(\delta + \beta) + f_0'].
\end{aligned} \right\} (7.8)$$

Одержану сукупність (7.4)-(7.8) слід доповнити співвідношенням для вектора переміщень \bar{u} в проекціях на осі розрахункової системи координат.

$$\left. \begin{aligned}
\frac{\partial u_x}{\partial s} + u_z \left[- \frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma \right] - u_y \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \right. \\
\left. + \frac{\partial \alpha}{\partial s} \right] &= \cos(\delta + \beta) \cos \gamma - 1, \\
\frac{\partial u_y}{\partial s} + u_x \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \sin(\delta + \beta) + \frac{\partial \gamma}{\partial s} \right] - u_z \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \right. \\
\left. + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma \right] &= -\cos(\delta + \beta) \sin \gamma, \\
\frac{\partial u_z}{\partial s} + u_y \left[\frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \cos \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \sin \gamma \right] - \\
-u_x \left[- \frac{\partial \alpha}{\partial s} \cos(\delta + \beta) \sin \gamma + \frac{\partial(\delta + \beta)}{\partial s} \cos \gamma \right] &= \sin(\delta + \beta).
\end{aligned} \right\} (7.9)$$

До рівнянь (7.4)-(7.9), в загальному випадку слід приєднати (6.30), (6.31), прирівняти витрати рідини в трубі і затрубному просторі у привибійній зоні

$$S_1 v_1^2 = S_2 v_2^r, \quad (7.10)$$

що дає можливість знаходити величину швидкості v_2^r на вибої свердловини.

Сукупність рівнянь (7.4)-(7.10), (6.30), (6.31) є найбільш загальною. Вона враховує зосереджені сили і моменти, сили інерції, опір стінок свердловини, анізотропію і адгезію розбурюваних порід, характер руху колони. Задаючи певним чином функції $\alpha(s)$, $\delta(s)$, будемо мати рівняння конкретних ділянок свердловини. Так для вертикальних ділянок $\alpha(s)=0$, $\delta(s)=0$; для горизонтальних – $\alpha(s)=\frac{\pi}{2}$, $\delta(s)=const$, для похилих – $\alpha(s)=const$, $\delta(s)=const$, а на закруглених хоча б одну з функцій $\alpha(s)$, $\delta(s)$, треба задати у вигляді \tilde{s}/R_3 , де \tilde{s} – поточна координата осі виділеної ділянки свердловини, а R_3 – радіус заокруглення.

Запропонована математична модель взаємодії бурильної колони зі стінками і вибоєм свердловини дозволяє визначати внутрішні сили і моменти в довільному перерізі, кривину і кручення пружної лінії компоновки, переміщення фіксованого перерізу труби за комплексного навантаження колони та цілий ряд інших параметрів.

Підкладаючи третє рівняння (1.1) в друге та враховуючи розглянуті навантаження, одержимо систему трьох векторних рівняння, для розв'язку яких треба мати граничні умови

$$\bar{F}(l_1), \bar{u}(l_1), \alpha(l_1), \beta(l_1), \gamma(l_1), \bar{F}(l_2), \bar{u}(l_2), \alpha(l_2), \beta(l_2), \gamma(l_2), \quad (7.11)$$

де l_1, l_2 – значення дугової координати s на кінцях виділеної ділянки труби.

Якщо вісь свердловини орієнтована довільно у просторі, то до сукупності (7.11) слід додати умови

$$\delta(l_1), \delta(l_2). \quad (7.12)$$

Граничні умови (7.12) можна переписати в еквівалентній, більш зручній формі

$$\bar{F}(l_1), \bar{M}(l_1), \bar{u}(l_1), \bar{F}(l_2), \bar{M}(l_2), \bar{u}(l_2). \quad (7.13)$$

В місцях з'єднання ділянок бурильної колони прирівнюємо вектори переміщень, внутрішніх сил і моментів.

Отже, згідно принципу звільнення від в'язей, слід відкинути умови з'єднання або закріплення ділянки труб і замінити їх дію силами і моментами в'язей.

Під час розв'язування деяких задач умовної рівноваги ділянок бурильної колони, зв'язаних з визначенням внутрішніх сил і моментів в s -перерізі колони, рівняння для переміщень можна не брати до уваги, т.б. з числа граничних виключити умови $\bar{u}(l_1), \bar{u}(l_2)$.

Одержані рівняння умовної рівноваги бурильної колони через громіздкість розв'язувати аналітично доволі складно. Тому для розв'язку конкретних прикладних задач рівняння доцільно звести до безрозмірної форми і розробляти комп'ютерні програми, передбачаючи в них ряд коректувальних коефіцієнтів, які б дозволяли оперативно вносити поправки за результатами порівняння розрахункових та експериментальних даних.

Висновки

1. Складемо систему рівнянь умовної рівноваги ділянки бурильної колони, що взаємодіє зі стінками свердловини орієнтованої довільно у просторі.

2. Обґрунтовано необхідність введення чотирьох кутів $\alpha, \delta, \beta, \gamma$ для вивчення просторової орієнтації осі свердловини і пружної лінії бурильної колони. Встановлено взаємозв'язки між кутами α і δ з одного боку та зенітним і азимутальним кутами свердловини з другого боку, знайдено залежності для визначення вектора повної кривини пружної лінії та інтенсивності викривлення осі свердловини.

3. Знайдено зв'язок між швидкістю руху ділянки колони у свердловині та вектором повної кривини її пружної лінії. Векторне рівняння цього зв'язку спроектовано на осі розрахункової системи координат; враховані осьове переміщення, переносне та відносне обертання ділянки колони.

4. Одержимо нові залежності для визначення нормальної складової розподілених по довжині колони сили тиску труби на стінку свердловини, інерційного навантаження від обертання ділянки навколо осі розглядуваної циліндричної виробки, сил опору стінки свердловини з урахуванням адгезії, анізотропії та характеру руху колони.

5. Складено рівняння, які дозволяють вивчати просторові форми рівноваги ділянок бурильної колони у вертикальній та похилій свердловинах за очистки вибоєм газом або повітрям.

6. Вивчено кінематику руху промивальної рідини в бурильних трубах і затрубному просторі. Знайдено залежності між векторами внутрішніх сил і моментів з одного боку і розподіленими по довжині ділянки колони силами взаємодії бурильної труби з промивальною рідиною з другого боку. Вказано шляхи врахування впливу рідини на параметри пружної лінії колони при роторному бурінні та бурінні вибійним двигуном.

7. Під час складання загальних рівнянь умовної рівноваги пружної лінії невідомої бурильної колони у свердловині, віссю якої є просорова крива, враховано найбільш повний комплекс силових і моментних навантажень, що визначають напруження і деформації виділеної ділянки бурильної колони. Сукупність систем рівнянь (7.4)-(7.10), (6.30), (6.31) дає можливість проаналізувати розв'язок ряду прикладних задач, зв'язаних з визначенням внутрішніх сил і моментів, нормальної складової сили тиску бурильних труб на стінку свердловини, параметрів пружної лінії

колони; розробити практичні рекомендації з удосконалення компоновок бурильного інструменту і технології процесу буріння.

Література

1. Мойсишин В.М. Про рівняння рівноваги пружної лінії бурильної колони / В.М. Мойсишин // Прикарпатський вісник НТШ. Число. – 2010. – №1(9). – С. 56-74.
2. Ніколенко І.В. Диференційні рівняння рівноваги вільних і невільних тонких стержнів / І.В. Ніколенко // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. астрономії, математики та механіки. – 1958. – Вип.1. – С. 47-56.
6. Александров М.М. Силы сопротивления при движении труб в скважине / М.М.Александров. – М.: Недра, 1978. – 208 с.
7. McLean R.H. Displacement Mechanics in Primary Cementing / R.H.McLean, C.W.Manry, W.W.Whitaker // Transacting of the Society of Petroleum Engineers of the AIME. – 1967. – Vol.240. – 10 p.

Стаття надійшла до редакційної колегії 29.11.2011 р.

Рекомендовано до друку д.т.н., професором Лисканичем М.В.

COMPLETE SYSTEM OF EQUALIZATIONS OF CONDITIONAL EQUILIBRIUM OF AREAS OF BORING COLUMN IN MINING HOLE ORIENTED ARBITRARILY IN SPACE

V. M. Moisyshyn, V. I. Vekeryk

Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;

76019, Ivano-Frankivs'k, Carpat'ska st., 15;

ph. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua

At this work common equalizations of equilibrium of area of boring column of oriented are shown out in space arbitrarily; the distributed are taken into account on length of force of weight, friction of pipes o walls of mining hole, motion of washing liquid, rotator and forward motions of column.

The features of formation of flat and spatial forms of equilibrium of resilient line of boring column are trained, dependences are got for finding of its crooked and twisting, the kinematics of rotation of areas of columns and motion of washing liquid in pipes and out of pipes is trained space.

Key words: *equalization of equilibrium, resilient line of boring column, corners Euler-Krylov, crook, twisting, bending a moment, twisting moment, moving, internal force, internal moment.*

УДК 517.9

СИМЕТРИЙНІ МЕТОДИ В МАТЕМАТИЧНІЙ ФІЗИЦІ

М. І. Сєров, М. М. Сєрова*Полтавський національний технічний університет
ім. Ю. Кондратюка; e-mail: mserov@ukr.net*

Наведено деякі напрямки досліджень в галузі симетрійного аналізу диференціальних рівнянь, що проводяться групою науковців кафедри вищої математики Полтавського національного університету імені Юрія Кондратюка. Запропоновано процедуру нелінійної суперпозиції розв'язків, яке дозволяє будувати ланцюжки розв'язків типу односолітонних для рівнянь синус-Гордон. Досліджено зв'язок деяких відомих та одержаних розв'язків з операторами умовної симетрії рівняння синус-Гордон, за допомогою яких побудовано класи точних розв'язків даного рівняння. Знайдено оператори умовної симетрії та відповідні їм класи розв'язків для багатовимірного хвильового рівняння синус-Гордон.

Ключові слова: *симетрійний аналіз нелінійних рівнянь математичної фізики, багатовимірне рівняння синус-Гордон, солітон, анзац.*

Одним з нових напрямів у математиці є симетрійний аналіз нелінійних рівнянь математичної фізики. В Україні фундатором цього напрямку вважається В.І. Фущич. Доктор фізико-математичних наук, професор, член кореспондент НАН України, зав. відділом прикладних досліджень Інституту математики НАН України, лауреат кількох державних премій Фущич Вільгельм Ілліч добре відомий своїми науковими працями в області симетрійного аналізу диференціальних рівнянь не тільки в нашій країні, але й за її межами (у США, Канаді, Японії, Італії, Австралії, Німеччині та деяких інших країнах серед вчених, які займаються тематикою даного напрямку математичної фізики). Група вчених (47 кандидатів наук, 13 докторів наук) згуртована Вільгельмом Іллічем при відділі прикладних досліджень Інституту математики НАН України по праву заслуговує на ім'я наукової школи симетрійного аналізу рівнянь математичної фізики.

Незважаючи на те, що науковий шлях Вільгельма Ілліча починався з вивчення симетрійних властивостей лінійних рівнянь та систем математичної фізики, де він разом зі своїми учнями досяг значних успіхів, багато його наукових звершень відносяться до симетрійного аналізу рівнянь нелінійної математичної фізики. Перші нелегкі кроки в цьому напрямі були зроблені наприкінці 70-х – на початку 80-х років минулого століття. Кожне нелінійне рівняння, зі слів Вільгельма Ілліча, потребувало індивідуального підходу, вимагало розробки спеціальних методів його дослідження. Незважаючи на ці фундаментальні проблеми нелінійних рівнянь, Вільгельму Іллічу вдалося розробити ряд важливих підходів дослідження нелінійних диференціальних рівнянь і узагальнити їх

для цілих класів рівнянь та систем нелінійної математичної фізики.

В.І. Фушич відзначав важливість відбору серед усіх допустимих математичних моделей, які описують конкретні фізичні процеси, тих, які володіють широкими симетрійними властивостями, а саме задовольняють принципам відносності Галілея та Пуанкаре-Ейнштейна. У зв'язку з цим всі рівняння з частинними похідними він поділяв на два великих класи: рівняння релятивістської та нерелятивістської фізики. Багато робіт В.І. Фушича та його учнів присвячено цій проблемі.

Наукові ідеї Фушича Вільгельма Ілліча живуть і розвиваються в роботах його учнів і послідовників. Одним з осередків послідовників ідей В.І. Фушича є у м. Полтаві кафедра вищої математики Полтавського національного технічного університету імені Юрія Кондратюка, де протягом останніх десяти років в галузі симетрійного аналізу диференціальних рівнянь захищено 5 кандидатських дисертацій, 2 дисертації готуються до захисту. Наукові дослідження дисертаційних робіт присвячені як вивченню класичних літвських симетрій, так і пошуку нелітвських симетрій нелінійних диференціальних рівнянь, а також застосуванню нелокальних перетворень для побудови розв'язків нелінійних диференціальних рівнянь математичної фізики.

Як приклад ефективної роботи науковців нашої школи наведу один з вагомих результатів, здобутих її представниками, що одержав схвалення на семінарах Інституту математики НАН України.

Нелокальні формули розмноження розв'язків рівняння синус-Гордона

Розглянемо нелінійне хвильове рівняння

$$u_{00} - u_{11} + \sin u = 0, \quad (1)$$

де $u = u(x_0, x_1)$, яке в літературі відоме як рівняння синус-Гордон (СГ). З геометричної точки зору рівняння синус-Гордон виникло в диференціальній геометрії наприкінці XIX століття і пов'язане із задачею побудови чебишевських сіток на поверхнях від'ємної кривини [7]. У 1936 році вивченням розв'язків рівняння (1) займався німецький вчений Р. Штойрвальд, але результати його досліджень були відомі на той час лише небагатьом спеціалістам з геометрії [4, 19]. У фізиці рівняння СГ було застосоване в теорії дислокацій Я. Френкелем та Т. Канторовою. Воно описує розповсюдження обертань, умовних або дійсних, у різних фізичних системах [8, 9].

Рівняння СГ є одним з найбільш відомих рівнянь теорії солітонів, розвиток якої бере початок із спостереження фізичного явища “solitary wave” (відокремленої хвилі) британським інженером Д.С. Расселом у 1834 році. Однак його роботи на деякий час були забуті. Пізніше, в 1965 році в роботі Н. Забуського і М. Крускала [20] ця хвиля була названа солітоном.

Наприкінці XIX століття Беклунд [7, 14] запропонував нелокальні перетворення вигляду:

$$\left(\frac{u+u}{2}\right)_y = \frac{1}{\lambda} \sin \frac{u-u}{2}, \quad \left(\frac{u-u}{2}\right)_z = \lambda \sin \frac{u+u}{2} \quad (2)$$

для рівняння СГ (1), записаного в конусних змінних

$$u_{yz} = \sin u, \quad (3)$$

де

$$y = \frac{x_1 + x_0}{2}, \quad z = \frac{x_1 - x_0}{2}, \quad (4)$$

u^1, u^2 – два різні розв’язки рівняння (3), λ – довільна стала. Перетворення (2) зв’язують між собою два різні розв’язки рівняння СГ, вони є автоперетвореннями Беклунда (АПБ). Враховуючи те, що перетворення (2) задають неявний зв’язок між двома розв’язками u^1, u^2 рівняння (3), то їх важко використовувати для побудови точних розв’язків цього рівняння.

За допомогою АПБ (2) у літературі побудовано деякі точні розв’язки рівняння (3), які одержали назву солітонних розв’язків. Односолітонні

$$u = 4 \arctan e^{\theta_1} \quad (5)$$

та двосолітонні

$$u = 4 \arctan \left(\frac{\lambda_2 + \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \cdot \frac{e^{\theta_1} - e^{\theta_2}}{1 + e^{\theta_1 + \theta_2}} \right), \quad (6)$$

де $\theta_i = \lambda_i z + \frac{1}{\lambda_i} y + c_i$, λ_i, c_i — сталі, $i = 1, 2$, розв’язки даного рівняння [4, 5].

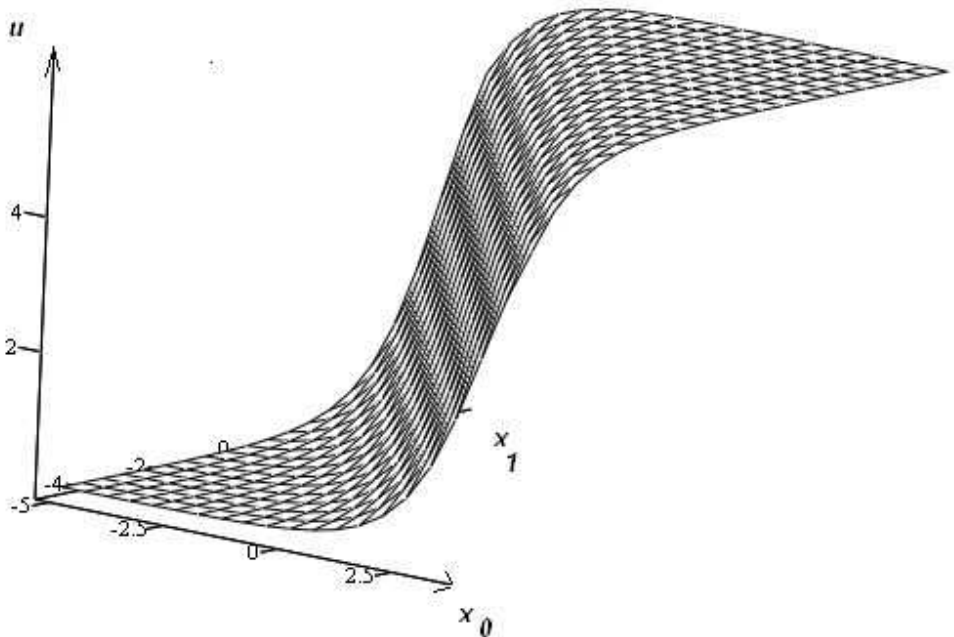


Рис.1. Графік функції $u = 4 \arctan e^{\theta_1}$

u

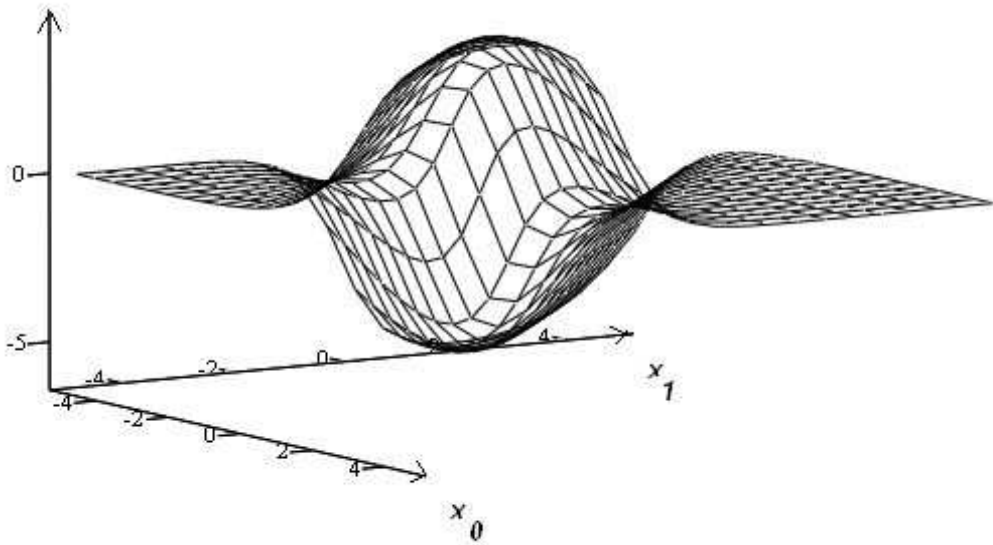


Рис.2. Графіки функції $u = 4 \arctan\left(\frac{\lambda_2 + \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \cdot \frac{e^{\theta_1} - e^{\theta_2}}{1 + e^{\theta_1 + \theta_2}}\right)$

У роботі [15] виведена формула знаходження N -солітонних розв'язків рівняння СГ:

$$\begin{aligned} \cos u(x_0, x_1) &= 1 - 2\left(\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\right) \ln F, \\ F &= \det(M_{ij}), \\ M_{ij} &= 2(a_i + a_j)^{-1} \cosh\left[\frac{1}{2}(\theta_i + \theta_j)\right], \\ \theta_j &= \gamma_j(x_0 - V_j x_1 - t_j), \\ a_j^2 &= (1 - V_j)(1 + V_j)^{-1}, \\ \gamma_j^2 &= (1 - V_j^2)^{-1}, \end{aligned} \quad (7)$$

де a_j, t_j – довільні параметри.

Ми пропонуємо дещо інший підхід до знаходження розв'язків рівняння СГ за допомогою АПБ (2).

Для спрощення прийемо $\lambda = 1$. Введемо функціональний параметр $\tau = \tau(y, z)$ за формулою:

$$\tau = \tan \frac{u^2 - u^1}{4}. \quad (8)$$

Це дає змогу записати зв'язок між розв'язками u^1, u^2 рівняння СГ у параметричному вигляді. Сформулюємо даний результат у вигляді теореми.

Теорема 1. Якщо u^1 – розв’язок рівняння (3), то його інший розв’язок u^2 знаходиться за формулою

$$u^2 = u^1 + 4 \arctan \tau, \quad (9)$$

де $\tau = \tau(y, z)$ – розв’язок системи диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} \tau_y &= -\frac{1}{2}(\tau^2 + 1)u_y^1 + \tau, \\ \tau_z &= -\frac{1}{2}(\tau^2 - 1)\sin u^1 + \tau \cos u^1. \end{aligned} \quad (10)$$

Теорема 1 доводиться безпосередньою підстановкою формул (9), (10) у рівняння (3).

Таким чином, згідно даної теореми побудову розв’язків рівняння СГ пропонується здійснювати в два етапи. Спочатку за відомим розв’язком u^1 потрібно знайти функціональний параметр $\tau = \tau(y, z)$, як розв’язок системи диференціальних рівнянь (10), а потім за допомогою розв’язку u^1 і знайденим за ним параметром τ та формулою (9) знаходимо u^2 – новий розв’язок рівняння СГ.

На перший погляд, формули (9), (10) спрощують знаходження розв’язку u^2 , однак при цьому, для знаходження параметра τ потрібно зінтегрувати систему диференціальних рівнянь (10), яка є системою рівнянь Ріккаті. Добре відомо, що немає загального методу розв’язування рівнянь Ріккаті. Тому за складністю формули (9), (10), вочевидь, не поступаються формулам (2). Але нам вдалося зауважити одну закономірність, за якою можна знаходити частинний розв’язок рівнянь Ріккаті (10) (див. лему нижче). Як відомо, наявність частинного розв’язку рівняння Ріккаті дозволяє звести його до рівняння Бернуллі, яке інтегрується у квадратурах.

Якщо для побудови розв’язків рівняння СГ формули (9), (10) використовувати послідовно декілька разів, то зрештою отримаємо рекурентні формули вигляду

$$u^{n+1} = u^n + 4 \arctan \tau^{n+1}, \quad (11)$$

$$\tau_y^{n+1} = -\frac{1}{2}((\tau^{n+1})^2 + 1)u_y^n + \tau^{n+1}, \quad (12)$$

$$\tau_z^{n+1} = -\frac{1}{2}((\tau^{n+1})^2 - 1)\sin u^n + \tau^{n+1} \cos u^n,$$

де u^n – розв’язок рівняння СГ на n -му кроці, u^{n+1} , τ^{n+1} – функції, що знайдені на $(n+1)$ -му кроці. Ми знайшли зв’язок між розв’язками системи рівнянь Ріккаті (12) на різних кроках. Сформулюємо цей зв’язок у вигляді наступного твердження.

Лема. Якщо за початковий розв'язок у формулах (11), (12) вибрати тривіальний розв'язок рівняння синус-Гордон $u = 0$, то для системи (12) справджується формула

$$\tau_0^{n+1}(y, z) = \tau_3^n(-y, -z), \quad (13)$$

де $\tau_3^n(y, z)$ – загальний розв'язок системи (2.11) на n -му кроці при спеціальному виборі сталої інтегрування, $\tau_0^{n+1}(y, z)$ – частинний розв'язок системи (12) на $(n+1)$ -му кроці, $n = 1, 2, 3, 4, 5$.

Опишемо знаходження точних розв'язків рівняння (1).

1-крок. $n = 1$:

$$u = 0, \quad (14)$$

тоді

$$u = 4 \arctan \tau, \quad (15)$$

де функціональний параметр τ є розв'язком такої системи диференціальних рівнянь із відокремлюваними змінними

$$\begin{aligned} \tau_y &= \tau, \\ \tau_z &= \tau. \end{aligned} \quad (16)$$

Розв'язавши (16) з точністю до перетворень (13) одержимо

$$\tau = e^{y+z}, \quad (17)$$

$$u = 4 \arctan e^{y+z}. \quad (18)$$

Цей розв'язок у літературі відомий як односолітонний розв'язок рівняння СГ [4].

2-крок. $n = 2$:

$$u = 4 \arctan e^{y+z}, \quad (19)$$

$$u = u + 4 \arctan \tau, \quad (20)$$

де параметр τ є розв'язком такої системи рівнянь Ріккати:

$$\tau_y = M((\tau)^2 + 1) + \tau, \quad (21)$$

$$\tau_z = N((\tau)^2 - 1) + L\tau,$$

де $M = -\frac{1}{\cosh(y+z)}$, $N = \frac{\sinh(y+z)}{\cosh^2(y+z)}$, $L = 2 \tanh^2(y+z) - 1$. Використавши лему, маємо

$$\tau_0^2(y, z) = \tau_3^1(-y, -z) = e^{-(y+z)}. \quad (22)$$

Здійснивши заміну:

$$\tau = w + e^{-(y+z)}, \quad (23)$$

де $w = w(y, z)$ — нова невідома функція, систему (21) зводимо до системи рівнянь Бернуллі

$$\begin{aligned} \cosh(y+z)w_y &= (\sin(y+z)-1)w - w^2, \\ \cosh^2(y+z)w_z &= (\sin^2(y+z)-1)w + \sinh(y+z)w^2. \end{aligned} \quad (24)$$

Загальний розв'язок системи (24) має вигляд

$$w = \frac{2\cosh^2(y+z)}{e^{y+z}(y-z+c_2) - \cosh(y+z)}. \quad (25)$$

Отже, використавши (25), одержуємо:

$$\tau = \frac{(y-z+c_2)e^{-(y+z)} + \cosh(y+z)}{y-z+c_2 - e^{-(y+z)} \cosh(y+z)}, \quad (26)$$

де c_2 — стала інтегрування. Підставивши τ , u , що задані формулами (26), (19) відповідно, у формулу (20), одержуємо

$$u = 4 \arctan \frac{-(y-z+c_2)}{\cosh(y+z)}. \quad (27)$$

З точністю до перетворень (1.3) можна вважати $c_2 = 0$. Отже,

$$\tau = \frac{(y-z)e^{-(y+z)} + \cosh(y+z)}{y-z - e^{-(y+z)} \cosh(y+z)}, \quad (28)$$

$$u = 4 \arctan \frac{-(y-z)}{\cosh(y+z)}. \quad (29)$$

Зауважимо, що розв'язок (29) одержано Новіковим С.П. в [3] із двосолітонного розв'язку (6), якщо в ньому перейти до границі при $\lambda_2 \rightarrow \lambda_1$.

3-крок. $n = 3$:

$$u = 4 \arctan \frac{-(y-z)}{\cosh(y+z)}, \quad (30)$$

$$u = u + 4 \arctan \tau. \quad (31)$$

Система рівнянь Ріккаті для знаходження τ має вигляд

$$\begin{aligned} \tau_y &= -\frac{2((y-z)\sinh(y+z) - \cosh(y+z))}{B}((\tau)^2 + 1) + \tau, \\ \tau_z &= \frac{2(y-z)\cosh(y+z)A}{B^2}((\tau)^2 - 1) + \frac{A^2 - 4(y-z)^2 \cosh^2(y+z)}{B^2} \tau, \end{aligned} \quad (32)$$

де $A = \cosh^2(y+z) - (y-z)^2$, $B = \cosh^2(y+z) + (y-z)^2$.

Використавши лему, маємо

$$\tau_0(y, z) = \tau_3(-y, -z) = \frac{(y-z)e^{y+z} - \cosh(y+z)}{y-z + e^{y+z} \cosh(y+z)}. \quad (33)$$

Скориставшись заміною

$$\tau = w + \frac{(y-z)e^{y+z} - \cosh(y+z)}{y-z + e^{y+z} \cosh(y+z)}, \quad (34)$$

де $w = w(y, z)$ – нова невідома функція, систему (32) зводимо до системи рівнянь Бернуллі

$$w_y = \frac{\beta B - 4\alpha C}{\beta B} w - \frac{2C}{B} w^2,$$

$$w_z = \frac{4(y-z)\alpha A \cosh(y+z) + \beta(A^2 - 4(y-z)^2) \cosh^2(y+z)}{\beta B^2} w + \frac{2(y-z)A \cosh(y+z)}{B^2} w^2, \quad (35)$$

де $\alpha = (y-z)e^{y+z} - \cosh(y+z)$, $\beta = y-z + e^{y+z} \cosh(y+z)$,

$C = (y-z) \sinh(y+z) - \cosh(y+z)$. Розв'язавши (35), одержуємо

$$\tau = \frac{-2B^2 + \alpha K}{\beta K}, \quad (36)$$

$$u = 4 \arctan e^{-y-z} \frac{P+B}{P-B}, \quad (37)$$

де

$$K = (y-z + e^{y+z} \cosh(y+z))((y-z)^2 e^{-(y+z)} - 2(y-z) \cosh(y+z) + f) - 4e^{y+z} \cosh^4(y+z),$$

$$f = \cosh(y+z)(e^{2(y+z)} + 2) + (y+z+c)e^{-(y+z)},$$

$$P = c + y + z + \cosh(y+z) \sinh(y+z).$$

Випишемо ланцюжок розв'язків рівняння синус-Гордон (3), одержаного в результаті застосування рекурентних формул (11), (12):

$$0 \rightarrow 4 \arctan e^{y+z} \rightarrow 4 \arctan \frac{-(y-z)}{\cosh(y+z)} \rightarrow$$

$$4 \arctan \left(\frac{e^{-(y+z)}(c + y + z + \cosh(y+z) \sinh(y+z) + \cosh^2(y+z) + (y-z)^2)}{c + y + z + \cosh(y+z) \sinh(y+z) - \cosh^2(y+z) - (y-z)^2} \right).$$

Таким чином, враховуючи зв'язок (2) між змінними y, z і x_0, x_1 , одержаний нами ланцюжок розв'язків для рівняння СГ (1) має вигляд

$$0 \rightarrow 4 \arctan e^{x_1} \rightarrow 4 \arctan \frac{-x_0}{\cosh x_1}$$

$$\rightarrow 4 \arctan e^{-x_1} \frac{c + x_1 + \cosh x_1 \sinh x_1 + \cosh^2 x_1 + x_0^2}{c + x_1 + \cosh x_1 \sinh x_1 - \cosh^2 x_1 - x_0^2}.$$

Побудуємо графіки розв'язків u^2 і u^3 , виокремивши графіки при фіксованих значеннях змінної x_0 .

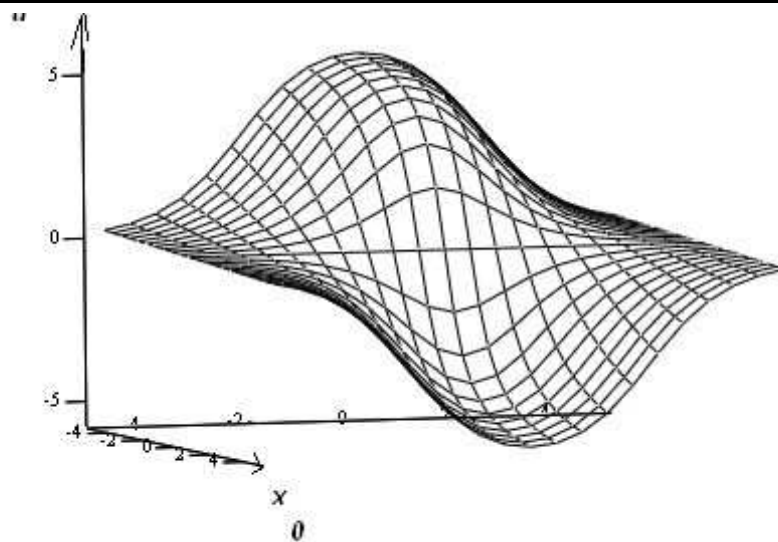


Рис.3. Графік функції $u = 4 \arctan \frac{-x_0}{\cosh x_1}$

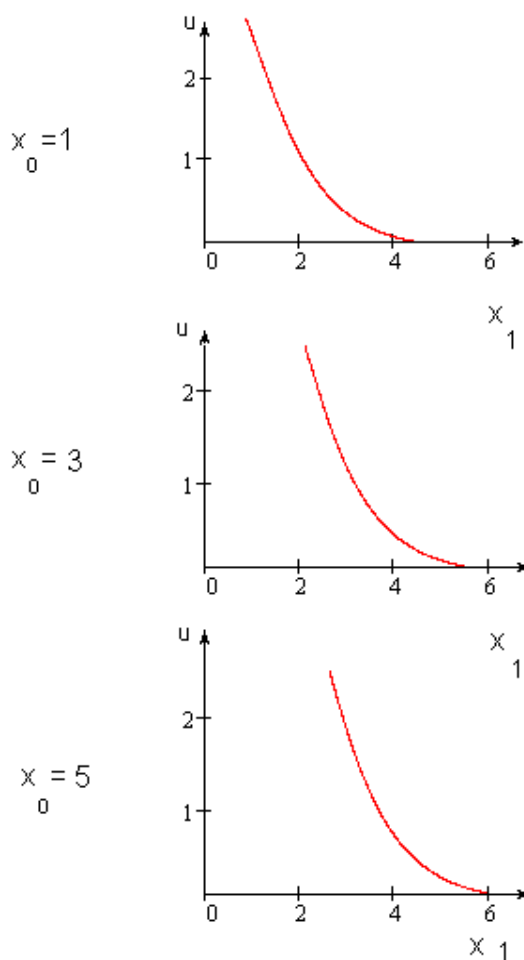


Рис.4. Графіки функції u при фіксованих значеннях змінної x_0

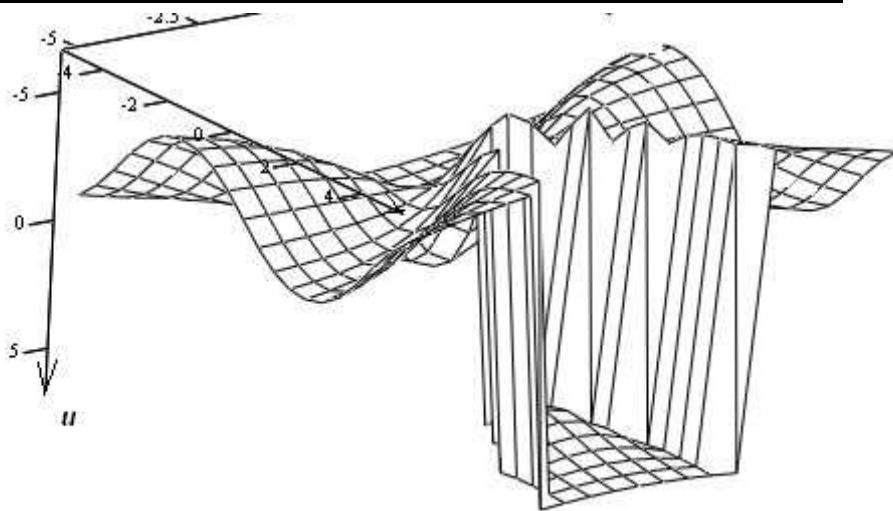


Рис.5. Графіки функції $u = 4 \arctan e^{-x_1} \frac{c + x_1 + \cosh x_1 \sinh x_1 + \cosh^2 x_1 + x_0^2}{c + x_1 + \cosh x_1 \sinh x_1 - \cosh^2 x_1 - x_0^2}$

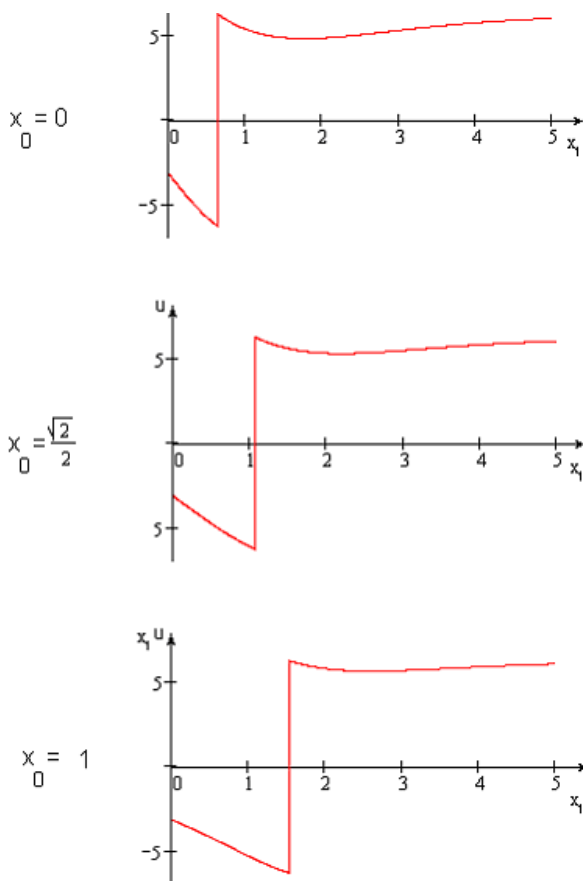


Рис.6. Графіки функції u при фіксованих значеннях змінної x_0

Оскільки побудовані графіки одержаних розв'язків u^2 , u^3 зберігають форму єдиної хвилі з ростом часової змінної x_0 , то можна припустити, що ці розв'язки є розв'язками солітонного типу рівняння синус-Гордон.

Зауваження 1. З кожним наступним кроком процедури розмноження розв'язків рівняння СГ, запропонованої в теоремі (1), різко зростає громіздкість перетворень даного алгоритму. Тому було природно наступні кроки доручити ЕОМ.

За допомогою програми Maple нам вдалося допрацювати ще два кроки вказаного алгоритму і одержати такі розв'язки

$$u^4 = 4 \arctan \frac{\left(\frac{2}{3}x_0^3 + 2x_0 + c_4\right) \cosh x_1 - 2x_0x_1 \sinh x_1}{\frac{1}{3}x_0^4 - c_4x_0 + x_1^2 + \cosh^2 x_1}, \quad (38)$$

$$u^5 = 4 \arctan e^{x_1} \frac{(\cosh^2 x_1 + A - B)e^{2x_1} + C + D}{\cosh^2 x_1 + A + B + (C - D)e^{2x_1}}, \quad (39)$$

де $A = \frac{1}{9}x_0^6 + \frac{1}{6}x_0^4 + \frac{3}{2}x_0^2 + x_0^2x_1^2 - \frac{1}{2}x_1^2 + 2c_5x_1,$

$$B = \frac{1}{3}x_0^4x_1 + 2x_0^2(x_1 + c_5) - x_1(x_1^2 + 1) + c_5,$$

$$C = \frac{1}{6}x_0^4 + \frac{3}{2}x_0^2 + \frac{1}{2}x_1^2, \quad D = (x_0^2 + 1)x_1 - c_5.$$

Побудуємо графіки розв'язків u^4 і u^5 , виокремивши графіки при фіксованих значеннях змінної x_0 .

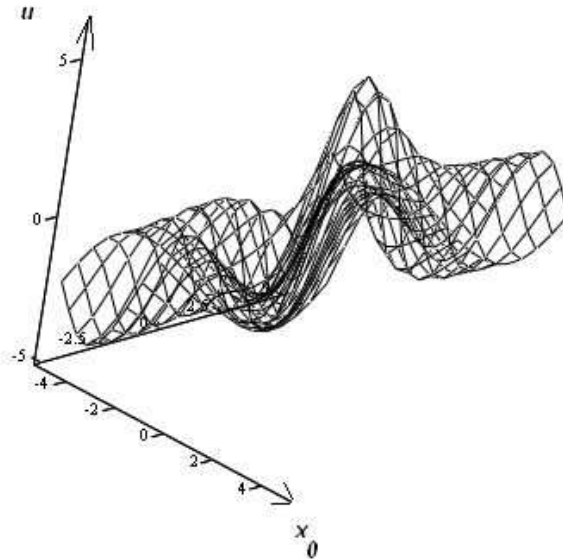


Рис.7. Графіки функції $u^4 = 4 \arctan \frac{\left(\frac{2}{3}x_0^3 + 2x_0 + c_4\right) \cosh x_1 - 2x_0x_1 \sinh x_1}{\frac{1}{3}x_0^4 - c_4x_0 + x_1^2 + \cosh^2 x_1}$

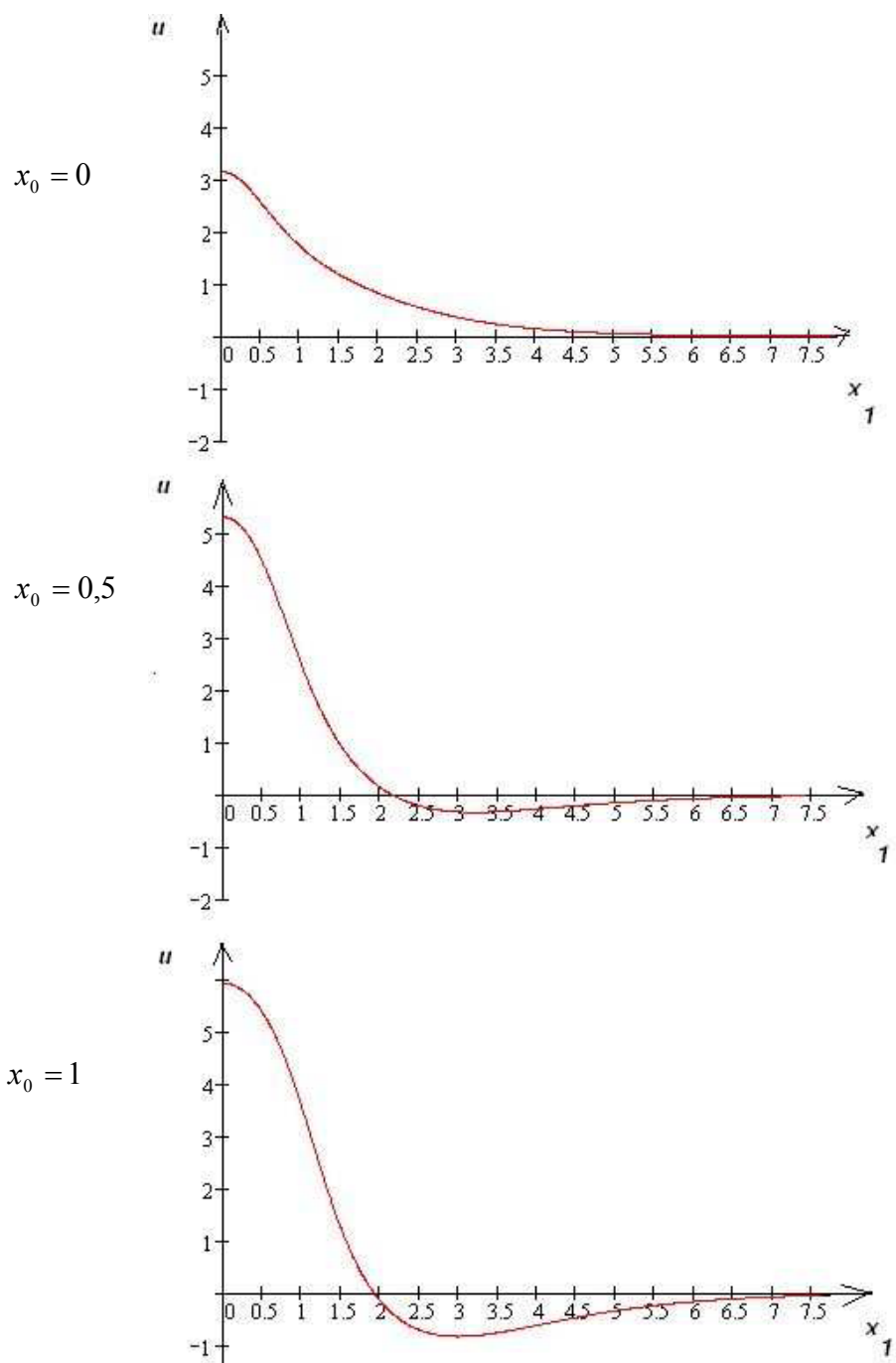


Рис. 8. Графіки функції u при фіксованих значеннях змінної x_0 .

Проаналізувавши графіки одержаних розв'язків та їх проєкцій, робимо висновок, що всі вони мають вигляд хвилі, яке не змінює свою форму з плином часу. Отже, знайдені нами розв'язки $u^2 - u^5$, як і u^1 , є розв'язками солітонного типу рівняння синус-Гордон.

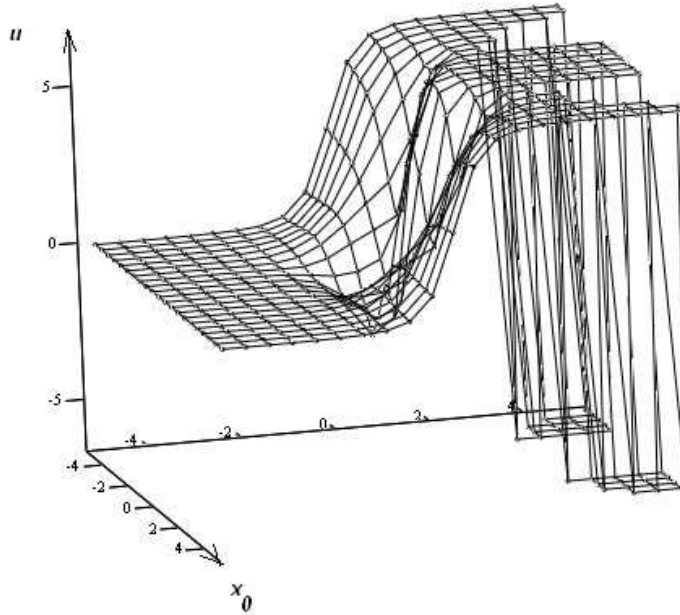


Рис.9. Графіки функції $u = 4 \arctan e^{x_1} \frac{(\cosh^2 x_1 + A - B)e^{2x_1} + C + D}{\cosh^2 x_1 + A + B + (C - D)e^{2x_1}}$

Умовна інваріантність багатовимірного рівняння синус-Гордон
Розглянемо багатовимірне рівняння СГ

$$\Delta u + \sin u = 0, \tag{40}$$

де $u = u(x)$, $x = (x_0, \vec{x})$, $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$. Як і для одновимірного рівняння СГ, доводиться наступне твердження.

Теорема 2. Рівняння (40) інваріантне відносно оператора

$$Q = \partial_n + \eta(x_n, u)\partial_u \tag{41}$$

при додаткових умовах

$$u_\mu u^\mu + \Phi(x_n, u) = 0, \tag{42}$$

$$Qu = u_n - \eta = 0, \tag{43}$$

де

$$\Phi = \frac{1}{\eta_{uu}} T, \quad \eta_{uu} \neq 0, \tag{44}$$

$$T = \eta \cos u - \eta_u \sin u - 2\eta\eta_{uu} - \eta_{nn}, \tag{45}$$

$$\frac{1}{\eta_{uu}^2} (\eta_{nnu} + \eta\eta_{uuu} + 2\eta_u\eta_{uu})T - \frac{1}{\eta_{uu}} (T_n + \eta T_u) + 2\eta\eta_n = 0. \tag{46}$$

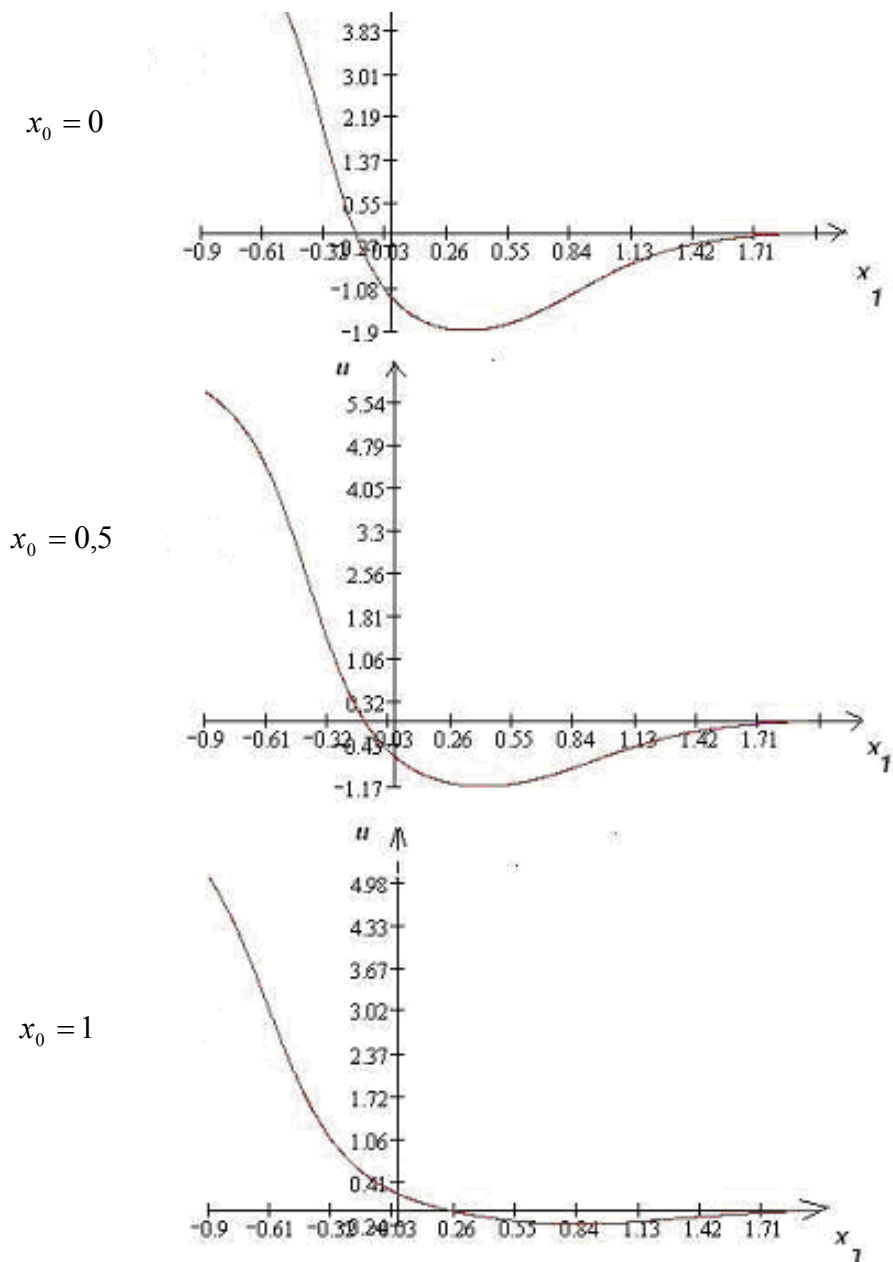


Рис.10. Графіки функції u при фіксованих значеннях змінної x_0

Зауваження 2. За допомогою прямої перевірки можна переконалися, що оператори

$$Q = \partial_n + 2 \sin \frac{u}{2} \partial_u, \quad (47)$$

$$Q = \partial_n - 2 \tanh x_n \sin \frac{u}{2} \partial_u, \quad (48)$$

$$Q = \partial_n + \eta \partial_u,$$

$$\eta = -2 \left(\sin \frac{u}{2} - 2 \cosh x_n \frac{\cos \frac{u}{2} + \sinh x_n \sin \frac{u}{2}}{c + x_n + \cosh x_n \sinh x_n} \right) \quad (49)$$

задовольняють умовам теореми 2, тобто є операторами умовної симетрії рівняння (40).

Оператору (47) відповідає анзац

$$u = 4 \arctan(e^{x_n} \varphi(x_0, \dots, x_{n-1})), \quad (50)$$

який редукує рівняння (40) до системи рівнянь

$$\begin{aligned} W\varphi &= 0, \\ \varphi_s \varphi^s &= 0, s = \overline{0, n-1}. \end{aligned} \quad (51)$$

Оператору (48) відповідає анзац

$$u = 4 \arctan \frac{\varphi(x_0, \dots, x_{n-1})}{\cosh x_n}, \quad (52)$$

який редукує рівняння (40) до системи рівнянь

$$\begin{aligned} W\varphi &= 0, \\ \varphi_s \varphi^s - 1 &= 0, s = \overline{0, n-1}. \end{aligned} \quad (53)$$

Оператору (49) відповідає анзац

$$u = 4 \arctan e^{-x_n} \frac{c + x_n + \cosh x_n \sinh x_n + \cosh^2 x_n + \varphi^2}{c + x_n + \cosh x_n \sinh x_n - \cosh^2 x_n - \varphi^2}, \quad (54)$$

де $\varphi = \varphi(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$. Анзац (54) редукує рівняння (40) також до системи рівнянь (53).

Узагальнимо анзаці (50), (52) наступним чином

$$u = 4 \arctan \varphi \psi, \quad (55)$$

де $\varphi = \varphi(x_0, \dots, x_{n-1})$, $\psi = \psi(x_n)$ – невідомі функції. Підставивши (55) у рівняння (40), одержимо

$$\varphi^2 W\varphi - 2\varphi \varphi_s \varphi^s - \varphi^3 + \frac{1}{\psi^2} (W\varphi + \varphi) - \frac{\ddot{\psi}}{\psi^3} \varphi + \left(2 \frac{\dot{\psi}^2}{\psi^2} - \frac{\ddot{\psi}}{\psi} \right) \varphi^3 = 0, \quad (56)$$

де $s = \overline{0, n-1}$. Врахувавши, що функції φ , ψ залежать від різних аргументів, з рівняння (56) отримуємо два суттєво різні випадки:

$$\begin{aligned} \ddot{\psi} - 2\lambda_1 \psi^3 &= 0, \\ \psi \ddot{\psi} - 2\dot{\psi}^2 + 2\lambda_2 &= 0, \\ S_3 - 2\lambda_1 \varphi &= 0, \end{aligned} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} S_4 + 2\lambda_2 \varphi^3 &= 0; \\ \ddot{\psi} - 2\lambda_1 \psi &= 0, \\ \psi \ddot{\psi} - 2\dot{\psi}^2 + 2\lambda_2 \psi^2 &= 0, \\ S_3 + 2\lambda_2 \varphi^3 &= 0, \\ S_4 - 2\lambda_1 \varphi &= 0, \end{aligned} \quad (58)$$

де λ_1, λ_2 – довільні сталі, $S_3 = \varphi^2 W\varphi - 2\varphi\varphi_s\varphi^s - \varphi^3$, $S_4 = W\varphi + \varphi$. Розглянемо кожен із отриманих випадків окремо. Із (57) випливає, що вигляд функції ψ визначаються, як

$$\int \frac{d\psi}{\sqrt{\lambda_1\psi^4 + \lambda_2}} = x_n. \quad (59)$$

Провівши заміну

$$w = \int \frac{d\varphi}{\sqrt{\lambda_2\varphi^4 + \varphi^2 + \lambda_1}} \quad (60)$$

з двох останніх рівнянь системи (57), одержимо

$$\begin{aligned} Ww &= 0, \\ w_s w^s + 1 &= 0, \quad s = \overline{0, n-1}. \end{aligned} \quad (61)$$

Зауваження 3. Якщо у формулах (59), (60) $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0$, то одержимо розв'язок рівняння СГ, який виражається через елементарні функції та функцію w за формулою

$$u = -4 \arctan \frac{\sinh w}{x_n}. \quad (62)$$

Якщо ж в формулах (59), (60) $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 1$, то одержимо такий розв'язок

$$u = -4 \arctan \frac{x_n}{\sinh w}, \quad (63)$$

який за допомогою перетворень (1.4), (1.5) зводиться до (62). За всіх інших значень параметрів λ_1, λ_2 розв'язки рівняння СГ вигляду (55) виражаються через еліптичні функції (див., наприклад, [2]).

З (58) при $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{2}$ одержимо наступний розв'язок

$$u = 4 \arctan e^{x_n} \varphi(x_0, \dots, x_{n-1}), \quad (64)$$

де функція φ виражається з (60), а функція w є розв'язком системи

$$\begin{aligned} Ww &= 0, \\ w_s w^s &= 0, \quad s = \overline{0, n-1}. \end{aligned} \quad (65)$$

Повний аналітичний опис множини гладких розв'язків систем (51), (53), (61), (65) у випадку $n = 4$ зроблено Фушичем В.І., Ждановим Р.З., Ревенком І.В. в роботі [10], а також здійснено в роботі [13]. У результаті цього в даній роботі отримано цілі класи точних розв'язків багатовимірного рівняння синус-Гордон.

Таким чином, ми запропонували процедуру нелінійної суперпозиції розв'язків, яка дозволяє будувати ланцюжки розв'язків типу односолітонних для рівняння синус-Гордон. Досліджено зв'язок деяких відомих та одержаних розв'язків з операторами умовної симетрії рівняння синус-Гордон, за допомогою яких побудовано класи точних розв'язків даного рівняння. Знайдено оператори умовної симетрії та відповідні їм

класи розв'язків для багатовимірного хвильового рівняння синус-Гордон.

Література

1. Абловиц М. Солитоны и метод обратной задачи / М.Абловиц, Х.Сигур. – М.: Мир, 1987. – 480 с.
2. Ахиезер Н.И. Элементы теории эллиптических функций / Н.И.Ахиезер. – М.: Наука, 1970. – 304 с.
3. Теория солитонов / В.Е.Захаров, С.В.Манаков, С.П.Новиков, Л.П.Питаевский // Метод обратной задачи. – М.: Наука, 1980. – 324 с.
4. Новиков С.П. Солитоны / С.П.Новиков. – М.: Мир, 1983. – 408 с.
5. Новокшенов В.Ю. Математические модели в естествознании / В.Ю.Новокшенов. – Уфа: УГАТ ун-т, 1999. – 98 с.
6. Ньюэлл А. Солитоны в математике и физике / А. Ньюэлл. – М.: Мир, 1989. – 323 с.
7. Позняк Э.Г. Уравнение синус-Гордона: геометрия и физика / Э.Г.Позняк, А.Г.Попов. – М.: Знание, 1991. – 48 с.
8. Филиппов А.Т. Многоликий солитон / А.Т.Филиппов. – М.: Наука, 1990. – 288 с.
9. Френкель Я. О теории пластической деформации и двойникования / Я.Френкель, Т.Конторова // Физический журнал. – 1939. – №1. – С. 137-145.
10. Фущич В.И. Решения нелинейного волнового уравнения и уравнения эйконала / В.И.Фущич, Р.З.Жданов, И.В.Ревенко // УМЖ, 43. – 1991. – №11. – С. 1471-1487.
11. Фущич В.И. Симметричный анализ и точные решения уравнений нелинейной математической физики / В.И.Фущич, В.М.Штельень, Н.И.Серов. – Киев: Наукова думка, 1989. – 339 с.
12. Theory and applications of the sine-Gordon equation / A.Barone, F.Eposito, C.Magee, A.Scott // Riv. Nuovo cimento. – 1971. – №1. – С. 227-267.
13. Barannyk A.F. On a new method for constructing exact solitons of the nonlinear differential equations of mathematical physics / A.F.Barannyk, I.I.Yurik // J. Phys. A: Math. Gen. 31. – 1998. – P. 4899-4907.
14. Bäcklund A.V. Om Ytor med konstant negativ Krökning / A.V.Bäcklund // Lund Universitets Arsskrift. 19. – 1883. – P. 1-48.
15. Caudrey P.J. The sine-Gordon equations a model field theory / P.J.Caudrey, J.C.Eibeck, J.D.Gibbon // Nuovo Cimento. – 25. – 1975. – P. 497-512.
16. Skyrme T.H.R. A Non-Linear Theory of Strong Interactions / T.H.R.Skyrme // Proc. Roy. Soc. 247. – 1958. – №1249. – P. 260-278.
17. Smirnov V.I. New method for solving a plane problem of elastic oscillations / V.I.Smirnov, S.L.Sobolev // Proc. Of the Seismologicalinstitute of the Academi of Sciences USSR. 20. – 1932. – P. 37-42.
18. Smirnov V.I. On application of a new method to the study of elastic oscillations in a space with the axial symmetry / V.I.Smirnov, S.L.Sobolev

- // Proc. of the Seismological Institute of the Academy of Sciences USSR, 29. – 1933. – P. 43-51.
19. Steurwald R. Uber Ennepersche Flichen und bicklund'sche Transformation, München.: Abh. Bayer Akad. Wiss. – 40. – 1936. – 105 p.
20. Zabusky N.J. Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states / N.J.Zabusky, M.D.Kruskal // Phys. Rev. Lett., 15. – 1965. – P. 240-243.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 28.12.2011 р.
Рекомендовано до друку д.т.н., професором **Мойсишиним В.М.***

SYMMETRIC METHODS IN MATHEMATICAL PHYSICS

M. I. Serov, M. M. Serova

*Poltava National Technical University by Yu. Kondratiuk;
e-mail: mserov@ukr.net*

Some directions of researches are resulted in industry of symmetric analysis of differential equalizations, which are conducted by the group of research workers of department of higher mathematics of the Poltava National Technical University by Yu. Kondratiuk. Procedure of nonlinear superposition of decisions is offered, which allows to build the chainless of decisions of type of onesolitonnih for equalizations sine-Gordon. Communication of some known and got decisions with the statements of conditional symmetry of equalization is explored sine-Gordon, which the classes of exact decisions of the given equalization are built by. It is found statements of conditional symmetry and classes of decisions for multidimensional wave equalization proper to them sine-Gordon.

Key words: *symmetries ache analysis of nonlinear equalizations of mathematical physics, equalization is a sine-Gordon, fliton, anzats.*

Фізика і хімія твердого тіла

УДК 621.315.592

НАНОСТРУКТУРОВАНІ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ МАТЕРІАЛИ (ОГЛЯД)

**Д. М. Фреїк, М. А. Лоп'янок, І. К. Юрчишин,
Ю. В. Лисюк, О. Л. Соколов**

*Прикарпатського національного університету імені В. Стефаніка;
фізико-хімічний інститут; 76018, Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57;
e-mail: freik@pu.if.ua*

Проведено огляд робіт, присвячених квантовим розмірним ефектам у матеріалах пониженої розмірності, зокрема: металах, напівметалах та напівпровідниках. Особлива увага приділяється здатності матеріалу досягати одночасного збільшення коефіцієнта потужності і зменшення теплопровідності в одному напрямку. Досліджено перспективні напівпровідникові сполуки для побудови надграток квантових точок, дротів, ям та наноструктурних композитів.

Ключові слова: наноструктури, квантово-розмірні ефекти, термоелектрика.

Зміст

Вступ

1. Стратегії і концепції покращення термоелектричних характеристик.
 - 1.1. Енергетичне дроселювання носіїв на бар'єрах.
 - 1.2. "Carrier-rocket" інженерія.
 - 1.3. Перехід напівметал-напівпровідник.
2. Квантово-розмірні ефекти.
 - 2.1. Умови існування квантово-розмірних ефектів у наноструктурах.
 - 2.2. Прояви квантово-розмірних ефектів у металах, напівметалах та напівпровідниках.
3. Наноструктуровані термоелектричні матеріали.
 - 3.1. Надгратки.
 - 3.2. Композити.
 - 3.3. Нанооб'єкти: квантові ями, дроти і точки.

Висновки

Вступ

Проблеми перетворення енергії загальновідомі. Вони отримали новий напрямок і поглиблення у зв'язку з інтенсивними розробками нанотехнологій. Не оминуло це і термоелектрику. Сьогодні вкрай гостро стоїть питання підвищення ефективності перетворення теплової енергії в електричну, насамперед шляхом використання твердотільних термоелектричних модулів на базі напівпровідникових сполук. Генератори на їх основі мають ряд переваг над традиційними: простота конструкції, відсутність рухомих частин і, відповідно, безшумність роботи та висока надійність, можливість мініатюризації без втрати ефективності. Але через достатньо низький ККД (6-9 %) вони не набули широкого використання, окрім спеціальних областей: космічні апарати, кораблі, електроніка, портативні холодильні агрегати, охолодження інфрачервоних датчиків тощо [1, 2].

Ефективність матеріалів, що використовуються в термоелектричних перетворювачах, визначається величиною безрозмірної термоелектричної добротності:

$$ZT = \frac{\sigma S^2 T}{k} \quad (1)$$

Тут σ – питома електропровідність, S – коефіцієнт Зеєбека, k – теплопровідність, $T=(T_1+T_2)/2$ – робоча або середня температура (T_1 і T_2 – температури гарячого і холодного контактів відповідно). Таким чином, для мінімізації непродуктивних витрат енергії у перетворювачах (омічні і за рахунок теплопровідності) необхідно забезпечити низьку теплопровідність та високі значення електропровідності σ і коефіцієнта Зеєбека S матеріалу.

Практичний сенс мають матеріали, для яких $ZT \approx 1$. При $ZT \approx 2-3$ ККД ≈ 20 , що призвело б до різкого зростання попиту (при $T=300$ К), а при $ZT \approx 3-4$ термоелектричні перетворювачі могли б конкурувати із звичайними електричними генераторами. Коефіцієнт Зеєбека і електропровідність визначаються тільки електронною підсистемою ($P=S^2\sigma$ – коефіцієнт потужності). Теплопровідність визначається електронною і фонною підсистемами ($k=k_e+k_L$). Величини k_e і σ пов'язані між собою законом Відемана-Франца

$$\frac{k_e}{\sigma} = L_0 T, \quad (2)$$

де L_0 – стала Лоренца. При цьому збільшення провідності супроводжується не тільки ростом k_e , але і спадом коефіцієнта S .

У масивних зразках основним способом підвищення фактора потужності $P=S^2\sigma$ є легування, а методом зниження теплопровідності k підбір оптимальних компонентів сплаву. За останні півстоліття не було досягнуто потрібних значень ZT . Так, для області кімнатних температур успішно використовуються сплави на основі телуридів вісмуту і сурми, для температур (500-700) К – телурид свинцю (рис.1) [3, 4]. Передбачається певна перспектива для складних сплавів на основі германію, срібла, кобальту (рис.2) [5].

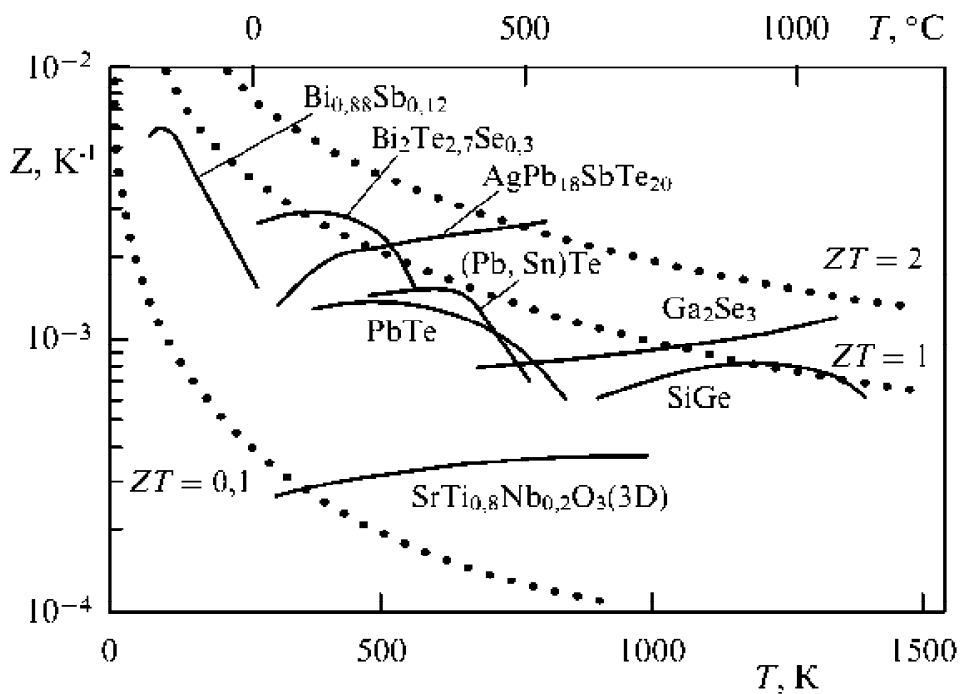


Рис.1. Термоелектрична добротність перспективних матеріалів як функція температури [2]

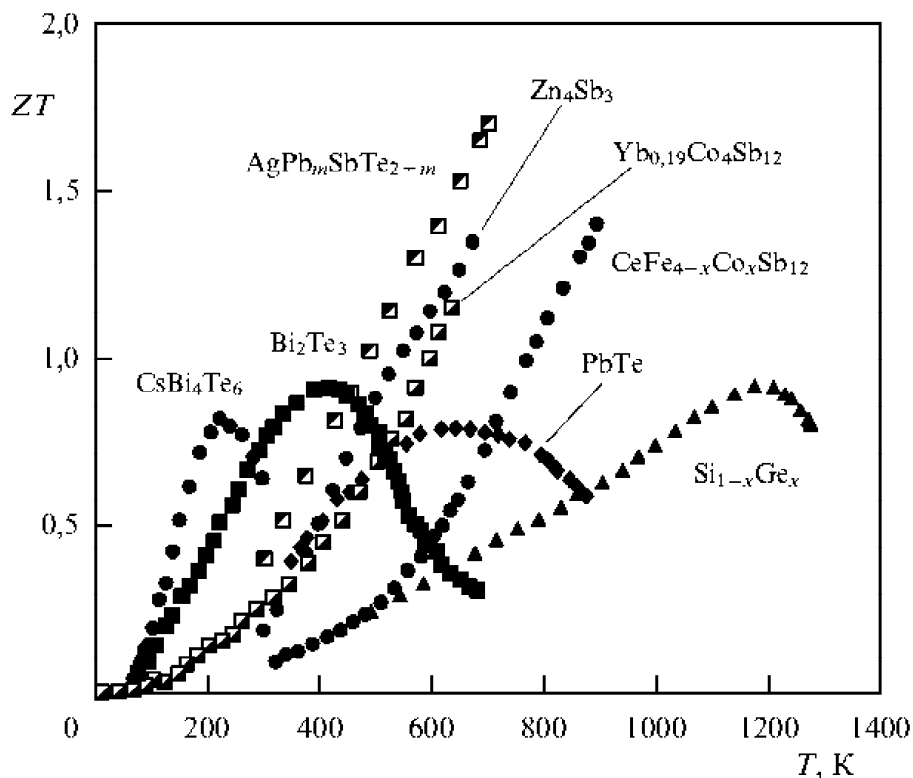


Рис.2. Безрозмірна термоелектрична добротність перспективних матеріалів як функція температури [5]

В останні роки виник новий напрям покращення термоелектричних характеристик матеріалів, в якому було досягнуто прогресу і який дав новий імпульс відповідним дослідженням у цій області. Даний підхід полягає у використанні просторово-неоднорідних структур із включеннями, розміри яких порівнянні з характерними довжинами хвиль електронів і фононів, тобто знаходяться у нанометровій області. Зменшення розмірів системи до нанометрового масштабу викликає різкі відмінності в густині електронних станів (рис.3), що створює нові можливості для варіації S , σ і k квазінезалежно. Складові нанометрового розміру спричинюють квантово-розмірний ефект (КРЕ), який підвищує коефіцієнт потужності $S^2\sigma$, а компонування внутрішніх границь в наноструктурі дозволяє зменшити теплопровідність в порівнянні з електропровідністю, що базується на відмінностях між фононною і електронною довжинами розсіювання. На цій основі створюють системи з квантовими ямами, дротами, точками та різноманітні композити з неупорядкованими включеннями нанометрового розміру.

Метою даної роботи є огляд досліджень термоелектричних властивостей наноструктурованих матеріалів.

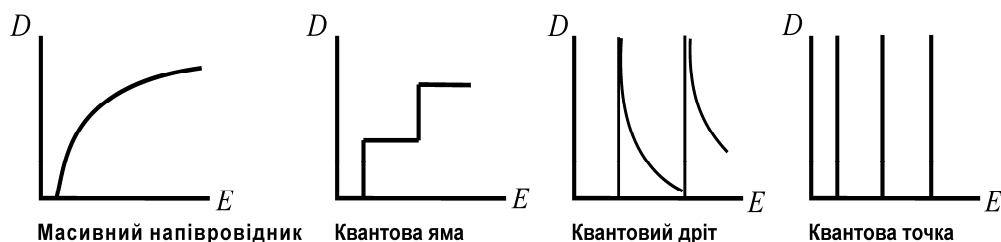


Рис.3. Залежність густини станів від енергії для масивних зразків, квантових ям, дротів і точок [1]

1. Стратегії і концепції покращення термоелектричних характеристик

Теоретичні випробування моделі двомірної періодичної системи квантових ям [5], а відтак одомірної системи квантового дроту [6] і їх наступне експериментальне підтвердження [7, 8] дозволили в області низькорозмірної термоелектрики ввести дві стратегії:

- використання квантово-розмірних явищ для підвищення коефіцієнта Зеєбека та незалежного контролю значень S і σ ;
- введення значної кількості меж, що розсіюють фонони, є більш ефективним ніж тих, що розсіюють, до того ж електрони, розсіюють переважно фонони, що роблять найбільший внесок у теплопровідність.

Здатність системи низькорозмірних матеріалів підвищувати термоелектричну (ТЕ) добротність вперше була продемонстрована для надгратки квантових ям (НГКЯ) $PbTe$ з бар'єрами $Pb_{1-x}Eu_xTe$ n-типу [7] і пізніше для аналогічної надгратки p-типу [9]. При цьому отримано задовільне узгодження між теоретичною і експериментальною залежностями S^2n від ширини ями (побудова залежності S^2n замість $S^2\sigma$ пояснюється тим, що n і σ пов'язані формулою $\sigma = ne\mu$, де e – заряд електрона,

n – концентрація носіїв, а їх рухливість μ дуже чутлива до зовнішніх факторів, таких, як дефекти, в той час як S^2n більш тісно пов'язана з внутрішніми параметрами матеріалів). Підвищення S^2n було продемонстровано не тільки для напівпровідникових надграток PbTe, але й для квантових ям Si в системах Si/SiGe [10], де також було досягнуто доброго узгодження між теорією і експериментом. Експериментальні дослідження поперечного транспорту у надгратках $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ показали, що розсіювання фононів на межах знизило теплопровідність більшою мірою, ніж електропровідність [11, 12]. Цим доведено принциповість другої стратегії, яка забезпечує більший ріст ZT в порівнянні з тим випадком, коли зростання ZT здійснюється за рахунок росту S^2n .

Після експериментального підтвердження правомірності вищезазначених стратегій дослідження ведуться у двох різних напрямках. У першому напрямку намагаються досягти поступу у конструкції і вирощуванні надграток, а в другому – отримувати впорядковані структури меншої розмірності (одномірні квантові дроти і 0-мірні квантові точки). Застосування низькорозмірних матеріалів для підвищення термоелектричної ефективності отримало більше можливостей за рахунок використання наступних концепцій: енергетичне дроселювання носіїв на бар'єрах; “carrier-pocket” інженерія; перехід від напівметалу до напівпровідника. Зазначимо, що всі ці концепції і стратегії в даний час використовуються для підвищення ефективності наноструктурованих термоелектричних матеріалів в ході фундаментальних і прикладних досліджень у цій області.

1.1. Енергетичне дроселювання носіїв на бар'єрах

Концепція енергетичної фільтрації носіїв вводиться з метою підвищення термоелектричного коефіцієнта потужності $S^2\sigma$ і полягає у введенні відповідних бар'єрів у вигляді меж, які обмежують енергію носіїв матеріалу. Носії з середньою енергією, істотно вищою рівня Фермі E_F , будуть переважно проходитимуть через межу, тим самим підвищуючи коефіцієнт Зеєбека, який залежить від надлишку енергії $(E-E_F)$ носіїв у зразку. Процедура введення додаткових бар'єрів призводить до зниження провідності σ , яке в даному підході з надлишком компенсується ростом S . Таким чином, процес енергетичної фільтрації призводить до зростання $S^2\sigma$ [12, 13].

1.2. “Carrier-pocket” інженерія

Суть технології “carrier-pocket” [14] полягає в розробці структури надгратки таким чином, щоб один тип носія був квантово обмежений в області квантової ями, а інший тип носія того ж знаку – в області бар'єру. Цю концепцію було введено для випадку Γ -точки електронів квантових ям GaAs та для X-точки електронів бар'єрів AlAs [15] у надгратках квантових ям GaAs/AlAs [14]. Вона також застосовується для 2-мірних надграток Si/SiGe [16] і, в певному розумінні, – в самоорганізованих наноструктурованих композитах.

1.3. Перехід напівметал-напівпровідник

Концепція переходу напівметал-напівпровідник в першу чергу стосується вісмуту і пов'язаних з ним матеріалів. Незважаючи на те, що Ві володіє високим коефіцієнтом Зеєбека у L-точці електронів [15], той факт, що він є напівметалом і, відповідно, володіє обома носіями заряду – електронами і дірками, призводить до зменшення S . Перетворення напівметалу вісмуту у напівпровідник n-типу може бути здійснено шляхом використання низькорозмірних структур на його основі або сплавів з сурмою. Розвиткові двовірних надграток квантових ям на основі Ві заважає проблема у пошуку придатного для бар'єру матеріалу. Тому низькорозмірні матеріали, базовані на Ві і сплавах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ використовуються у вигляді впорядкованих рядів 1-вимірних квантових дротів всередині пор анодних зразків алюмінію [17]. Щодо механізму переходу напівметал-напівпровідник, то при зменшенні діаметра дроту відбувається розщеплення енергетичних рівнів на окремі підзони, що супроводжується рухом краю найнижчої підзони провідності угору і краю найвищої валентної підзони вниз за енергією. Коли ці енергетичні рівні перетинаються, матеріал робить перехід від напівметалу до напівпровідника з певною забороненою зоною [17-19]. З метою досягнення значного домінування певного типу носія у напівпровідниковій фазі матеріал легують. Такий перехід напівметал-напівпровідник був прогнозований [20] і пізніше експериментально виявлений для нанодротів Bi-Sb [20, 21].

2. Квантово-розмірні ефекти

Квантово-розмірним ефектом (КРЕ) називається залежність термодинамічних властивостей і кінетичних коефіцієнтів твердих тіл від їх характерних розмірів, коли останні стають співмірними з ефективною довжиною хвилі де Бройля елементарних збуджень. Сьогодні інтерес до дослідження КРЕ зумовлений інтенсивним прогресом в області нанотехнологій. Теоретичні основи КРЕ закладені у роботах 50-60-х років Ліфшица, Косевича, Сандомирського, Тавгера та Демиховського [22-28], а повідомлення про їх експериментальне підтвердження з'явилося у 1966р. (Огрін, Луцкій, Елінсон) [29, 30] і стосувалося тонких плівок вісмуту, властивості яких досліджували в широкому інтервалі товщин. Зважаючи на складність спостереження ефекту в реальних плівках, експериментальні досягнення виявились суттєво скромнішими за теоретичні передбачення. Першопочатково в роботах з квантово-розмірного ефекту найчастіше розглядалась ситуація, коли заселена тільки одна підзона з квадратичним законом дисперсії. Така модель використовувалась для розрахунку електропровідності і гальвано-магнітних властивостей розмірно-квантованих напівпровідникових та напівметалічних плівок [31]. Розвиваючи теорію КРЕ, В.Б. Сандомирський у 1967 р. на прикладі ізотропного напівметалу припустив, що розсіяння носіїв заряду в ньому відбувається на δ -подібному потенціалі, і отримав зубчастоподібну функцію часу релаксації від енергії [32]. Таким чином, роботи по розрахунку товщинних залежностей (d) ТЕ параметрів тонких плівок

пов'язані з розрахунком часу релаксації, а також густини станів для різних умов. Осциляція густини станів від товщини плівок визначає осциляції відповідних ТЕ параметрів. Густина станів залежить від енергії Фермі системи, що пояснює значну кількість робіт з розрахунку цієї енергетичної характеристики [33].

В.Б. Сандомирським було показано, що наявність скінченної мінімальної енергії, яка визначається товщиною плівки [32], є причиною зменшення перекриття в напівметалах і при певній товщині d_0 може призвести до переходу напівметалу у напівпровідник [34]. В моделі прямокутної ями з нескінченно високими стінками для ізотропного напівметалу товщина d_0 збігається з періодом осциляцій Δd . В роботі [33] розраховано критичну товщину переходу для вказаної моделі при різних орієнтаціях плівок вісмуту і сурми. У 1982 р. автори [35] експериментально спостерігали перехід напівметал-напівпровідник при зміні товщини плівок сплаву вісмут-сурма. Так, для плівок $\text{Bi}_{0,83}\text{Sb}_{0,17}$ він спостерігається за товщини 7-8 мкм. Зараз ведеться робота зі встановлення такого переходу для плівок чистого вісмуту.

При дослідженні квантового розмірного ефекту також використовують тунельну спектроскопію. Г.А. Гогодзе та І.О. Кулик у 1965 р. показали, що тунельний струм із розмірно-квантованої плівки є осцилюючою функцією зміщення, яка відображає особливості густини станів [36]. Також було показано, що провідність тунельної системи при зміні товщини плівки монотонно змінюється, причому області швидкого і повільного спаду провідності чергуються між собою [36, 37].

Для практичного спостереження КРЕ слід враховувати, що структура та електронні властивості тонких плівок значною мірою визначаються технологічними факторами (типом і температурою підкладки, складом шихти, взаємодією із киснем і т.д.), що визначає необхідність вивчення впливу цих факторів на прояв осциляційних ефектів. У теоретичних роботах, як правило, розглядається ідеалізована модель монокристалічної плівки з дзеркальними гладкими поверхнями. Наявність дефектів у об'ємі плівки, шорсткості поверхні призводять до зменшення амплітуди квантово-розмірних осциляцій [38]. У роботі [39] розглянута зміна характеру розсіювання електронів на фонах в квантованій плівці, яка пов'язана з наявністю поверхні. У випадку взаємодії електронів з домішками залежності ТЕ параметрів від товщини при розмірному квантуванні досить ускладнюються, хоча зберігають осцилюючий характер [40].

2.1. Умови існування квантово-розмірних ефектів у наноструктурах

Співмірність довжини хвилі де Бройля з характерними розмірами наноструктур зазвичай має місце у напівметалічних та напівпровідникових структурах. Існують також певні вимоги щодо умов експерименту і матеріалу структури. Розглянемо ці умови на прикладі тонкої плівки.

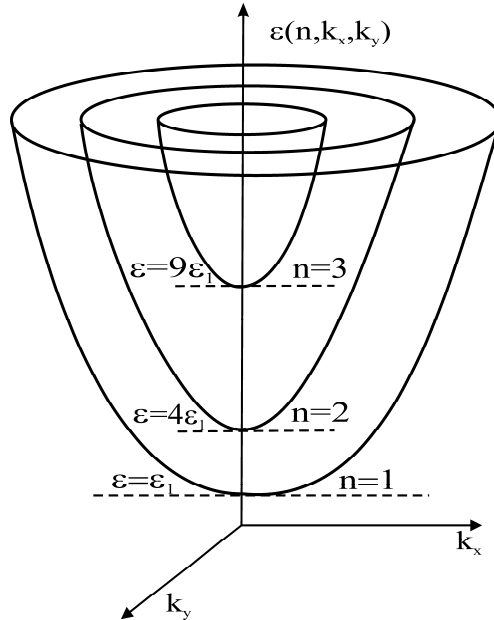


Рис.4. Частково квантований спектр носіїв струму в тонкій плівці [41]

Як видно з рис.4, спектр носіїв у плівці складається з зон, які перекриваються. При цьому характерною особливістю спектра плівки є наявність скінченної мінімальної енергії ε_1 . Коли носії струму займають велику кількість цих зон, квантування спектру не повинно відігравати суттєвої ролі. Розмірне квантування може проявлятися лише в тому випадку, коли середня енергія електрона провідності $\bar{\varepsilon}$ має той самий порядок, що й характерна енергія квантування ε_1 [41, 42]:

$$\varepsilon_1 \equiv \varepsilon(n=1, k_x = k_y = 0) = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{\pi^2}{d^2}, \quad (3)$$

де n – розмірне квантове число; m_{\perp} – ефективна маса носіїв струму в напрямку, перпендикулярному до площини плівки; товщиною d . Тобто носії повинні займати невелику кількість підзон (під підзоною в даному випадку слід розуміти ті значення, яких набуває енергія ε при даному значенні квантового числа n .) Отже, необхідною умовою прояву КРЕ є:

$$\bar{\varepsilon} \approx \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{\pi^2}{d^2} \text{ або } d \approx \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_{\perp}\bar{\varepsilon}}} \approx \lambda_D, \quad (4)$$

де λ_D – довжина хвилі де Бройля. В умові (4) для виродженого електронного газу $\bar{\varepsilon}$ має той самий порядок, що й енергія Фермі ζ_F , а для невивродженого $\bar{\varepsilon} \approx k_0 T$. Таким чином, для прояву розмірного квантування товщина плівки має бути співмірною з довжиною хвилі де Бройля λ_D для носіїв. Також з (4) видно, що для прояву КРЕ при реальних товщинах вимагається мала ефективна маса, невелике заповнення спектру або низькі температури. Розрахунки за формулою (4) дають нереальні товщини для металічних і реальні – для напівпровідникових та напівметалевих плівок.

Процес розсіювання носіїв струму призводить до часткового розмиття квазідискретного спектру на величину h/τ , де τ – час релаксації. Для збереження дискретності спектру необхідне виконання умови:

$$\frac{h}{\tau} \ll \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n, \quad \frac{h}{\tau} \ll (2n+1)\varepsilon_1. \quad (5)$$

У (5) друга умова впливає з першої за рахунок заміни $\varepsilon_n = \varepsilon_1 n^2$. Умова існування квазідискретного спектру в плівці (5) є найбільш строгою і виконується тільки в досить досконалих і чистих плівках, де носії мають велику довжину вільного пробігу. Прямо пропорційний зв'язок рухливості з часом релаксації $\mu = e\tau/m$ накладає на неї наступну умову

$$\mu \gg \frac{ed^2}{\pi\hbar}. \quad (6)$$

Крім того, плівка має бути досить однорідною по товщині, щоб зміна положення розмірних рівнів у різних її частинах внаслідок випадкового розкиду товщини була значно меншою за відстань між ними. Для цього відносний розкид товщини має задовольняти умові [41]:

$$\frac{|\Delta d|}{d} \ll \frac{(2n+1)}{2n^2}, \quad (7)$$

де n – номер підзони. При відносно великих n , як видно з (7), розкид товщини $|\Delta d|$ має бути меншим за d/n , щоб плівкові підзони різних ділянок не перекривались. Однорідність плівки по товщині необхідна також для забезпечення дзеркального розсіювання носіїв від поверхні, коли проекція квазіімпульсу при відбитті від її поверхні не змінюється. Для цього розмір неоднорідності $|\Delta d|$ має бути менший за довжину хвилі де Бройля для носіїв струму.

Для спостереження осциляційних КРЕ носії струму в плівці мають бути вироджені $k_0 T \ll \zeta_F$, а розмиття фермієвського розподілу (границя Фермі) – значно меншою за відстань між сусідніми підзонами [41, 42]:

$$k_0 T \ll (2n+1)\varepsilon_1 < \zeta_F. \quad (8)$$

Остання нерівність у (8) висвітлює той факт, що для спостереження осциляційних КРЕ під рівнем Фермі має знаходитись хоча б декілька плівкових підзон.

Таким чином, загалом для наноструктур можна стверджувати, що для реалізації КРЕ потрібні матеріали з малою ефективною масою носіїв, з малим заповненням (рівнем Фермі), з високою рухливістю та дзеркальним поверхневим розсіюванням (однорідність по товщині), а експерименти бажано проводити за низьких температур (8).

2.2. Прояви квантово-розмірних ефектів у металах, напівметалах та напівпровідниках

Як вже було сказано, умовам реалізації КРЕ найкраще відповідають напівметалеві і напівпровідникові структури. Однак це не виключає необхідність вивчення КРЕ у металах, адже металеві включення є важливою складовою сучасних наноструктурованих матеріалів (наприклад, металеві включення у напівпровідниковій матриці нанокompatитів або алюмінієві шаблони нанодротів Bi).

У 1968 р. автори [43] виявили ефект Блатта-Томпсона в тонких плівках олова, який полягав в тому, що при зміні товщини плівки критична температура і надпровідна щілина осцилювали з затухаючою амплітудою. Ефект теоретично пояснено немонотонною залежністю густини станів від товщини плівки. Період осциляцій був рівний півхвилі де Бройля.

У роботі [44], в області температур рідкого гелію (4,2 К), показано наявність невеликих осциляцій прозорості плівки алюмінію як функції товщини. Підвищення температури до температури рідкого азоту призвело до зменшення амплітуди коливань і до її цілковитого зникнення за кімнатної температури. Згідно передбачення авторів отримана немонотонна варіація прозорості від товщини є наслідком квантування. Алюміній формує хорошу оптичну поверхню, здатну до дзеркального відбиття електронів, а спин-орбітальна взаємодія, яка зумовлює розмиття ефекту квантування, в алюмінію є дуже малою [44]. Тому немонотонна зміна прозорості дійсно може бути наслідком квантування, а зменшення амплітуди коливань з ростом температури може відбуватися за рахунок зменшення середньої довжини вільного пробігу електронів. Важливі висновки щодо можливості прояву КРЕ в плівках золота зроблені авторами [45]. У зв'язку з невеликим значенням довжини хвилі де Бройля і, відповідно, малим періодом осциляцій для їх вирощування необхідно використовувати специфічні технологічні засоби або, так звані, сурфактантні підкладки (наприклад, з підшаром Bi_2O_3 , Al, Ge та ін.). Розмірні залежності питомого опору плівок міді ($d \approx 4\text{-}30$ нм), напилених при високому вакуумі (10^{-7} Па) навіть за низьких температур (78 К) не демонструють осциляцій. Неспостережуваність осциляцій було пояснено наявністю неоднорідностей поверхні та особливостями динаміки росту плівки [46]. Таким чином, у металах прояв розмірного квантування повинен спостерігатись, коли розмір відповідного включення стає меншим за 4-5 нм, бо саме ці розміри є співмірними з довжиною хвилі де Бройля носіїв струму. У випадку тонких металевих плівок для отримання однорідних суцільних шарів таких малих товщин необхідно подолати ряд технологічних проблем.

Що стосується квантово-розмірних ефектів в напівметалах, то на даний час найбільш дослідженим в цій області є вісмут. Так, товщинні залежності опору, коефіцієнта Холла, магнітоопору, а також концентрації для тонких плівок вісмуту на слюді при 300, 78 і 4,2 К мають осциляційний характер з приблизно однаковим періодом ($\Delta d = 400\text{-}500$ Å) і амплітудою коливань [29, 47]. За кімнатних температур осциляції суттєво згладжуються в порівнянні з низькими температурами. При цьому структурні характеристики епітаксійних плівок Ві на слюді свідчать про їх високу досконалість [48]. Результати було пояснено розмірним квантуванням.

Згідно теоретичних викладок В.Б. Сандомирського [32] d -залежність електропровідності тонких плівок вісмуту є осцилюючою функцією, що спадає зі зменшенням товщини. Водночас з тим автори [49] за низької температури (4,2 К) спостерігати аномальний розмірний ефект,

який характеризується тим, що в полікристалічних тонких плівках вісмуту провідність зростає зі зменшенням їх товщини. Таку аномальну залежність можна пояснити ростом структурної досконалості плівки, але це майже неможливо при зменшенні товщини. Автори [49] пояснили такий хід кривої $\sigma(d)$ ростом діркового і електронного часу релаксації при зменшенні товщини плівки. Ріст часу релаксації призводить до росту рухливості і провідності носіїв. Значно пізніше [50] цими ж авторами було показано що легування плівок вісмуту сурмою (4 ат. %) призводить до росту середнього опору на всьому проміжку досліджуваних товщин, а також до росту його амплітуди і періоду осциляцій від ~ 260 до 650 \AA , тобто більше ніж у два рази. Такі результати дозволили прийти до принципового висновку, що в структурно досконалих плівках вісмуту осциляції опору пов'язані саме з параметрами спектру, а не з якимись іншими випадковими причинами.

Хід осциляційної залежності електропровідності від товщини тонких плівок сурми повністю узгоджується з відповідною теоретичною залежністю В.Б. Сандомирського [32] – електропровідність спадає зі зменшенням товщини [51]. Цим вона якісно відрізняється від відповідної залежності для плівок вісмуту з аномальним розмірним ефектом. Зниження σ у плівках сурми може бути пов'язано з погіршенням структурних характеристик плівок при зменшенні товщини, про що свідчать зменшення амплітуди і розмиття квантових осциляцій.

Авторами [52] для плівок вісмуту показано, що амплітуда осциляцій залежить від їх структурної досконалості і ϵ , як правило, більшою для ділянок поблизу максимальної товщини, де якість плівок вища у зв'язку з перпендикулярним падінням молекулярного пучка. Згідно даних експерименту амплітуда осциляцій для плівок товщиною, меншою за 100 нм , зі зниженням товщини помітно спадає замість значного зростання, який передбачала теорія. Автори припустили, що згасання осциляцій пов'язано з деформацією спектра поблизу поверхні під впливом поверхневих станів.

У [30] методом тунельної спектроскопії оцінено значення енергії Фермі в плівці вісмуту в межах $(0,02 \div 0,027) \text{ eV}$, а також оцінено значення ефективної маси електронів у Ві $m_{\text{efBi}} \sim 0,012m_0$. Як видно, значення енергії Фермі у плівках Ві є близькими до відомих значень енергії Фермі у масивному вісмуті, а вимірювання ефективної маси методом тунельної спектроскопії добре узгоджується з відомим значенням цієї величини із вимірювань ефекту де Гааза-ван Альфена. У роботі [53] для плівок Ві на підкладках КВг виявлено зміщення червоної межі оптичного поглинання зі зміною товщини плівки, тобто зміну ширини забороненої зони, що є наслідком КРЕ.

Згідно [54] визначальний вплив на осциляційні залежності кінетичних коефіцієнтів від товщини плівок Ві, напилених у вакуумі на підкладки зі слюди, має температура підкладки під час вирощування. Так, зниження температури підкладки від $T_{\text{п}}=380 \text{ K}$ до кімнатної призводить до згладжування осциляцій і до зменшення максимальних величин кінетич-

тичних коефіцієнтів. Це явище пояснено вищим ступенем структурної досконалості плівок, вирощених при вищій температурі підкладки. Також в роботі відмічено зростання усіх кінетичних з ростом товщини плівки до ~ 200 з подальшим виходом на насичення. Припускається, що критична товщина плівок V_i , які відповідає переходу “напівметал-напівпровідник”, становить $d=25\pm 5$ нм.

Явище КРЕ в області напівпровідникових матеріалів характеризується найбільшою кількістю робіт, особливо щодо сполук IV-VI. Значна кількість цих робіт має не тільки наукове, але й прикладне значення, тому основний акцент на дані праці поставлено в наступному розділі даної роботи.

Однією з умов спостереження КРЕ в напівпровідниках є виродження електронного газу. Експериментальні і теоретичні дослідження свідчать, що в напівпровідникових тонких плівках енергетичний спектр електронів має квазідискретний характер. Мала величина густини станів в зоні провідності призводить до виродження у ній електронного газу. Так, залежності питомого опору ρ , коефіцієнта Холла R_H , рухливості $\mu=R_H/\rho$, від товщини d плівок InSb n-типу мають осциляційний характер. При $d\leq 300$ Å спостерігається різке зростання ρ , здебільшого обумовлене, зменшенням концентрації носіїв. Авторами це явище інтерпретується як зняття виродження електронного газу [55].

Процеси окислення, які відбуваються в структурі тонкої плівки, мають дуже серйозний вплив на її властивості. Так, у наших попередніх роботах [56, 57] і в роботах О.І. Рогачової було показано, що дія кисню на тонкі плівки халькогенідів свинцю спричинює у них ріст концентрації носіїв n-типу. В кінцевому випадку у плівках початково n-типу це призводить до інверсії знаку переважаючого носія від n до p. Виходячи з результатів робіт [58-61], можна стверджувати, що покриття плівок тонким шаром EuS (≈ 30 нм) повністю захищає їх від окислення. У даних роботах досліджено осциляції термоелектричних параметрів у тонких плівках IV-VI PbSe, PbS, PbTe. Підкладка KCl (слюда для PbTe) та поверхневий шар EuS (Al_2O_3 для PbTe) забезпечували квантову яму (КЯ) для носіїв у шарі плівки. Оцінка періоду осциляцій Δd ТЕ параметрів за відомим значенням ефективної маси носіїв заряду та енергії Фермі (ϵ_F) демонструє добре узгодження з експериментом для КЯ PbTe, і не чітке співпадіння з експериментом для КЯ PbSe, PbS. Таке неспівпадіння експериментального і теоретично обчисленого періоду осциляцій автори пояснюють спрощеннями у використаній моделі, а саме: ізотропністю і параболічністю зони провідності, дзеркальним розсіюванням носіїв заряду, ідентичністю та безмежною висотою стінок квантової ями. Порівняння d-залежностей ТЕ параметрів наноструктур стехіометричного і з 2 ат.% додаткового свинцю (001) KCl/PbTe/EuS показало, що надлишок свинцю призводить до росту концентрації носіїв n-типу, до збільшення максимального значення коефіцієнта термоелектричної потужності $S^2\sigma$, а також до зміщення максимумів осциляційних залежностей $\sigma(d)$ та $S^2\sigma(d)$ вправо у сторону більшої товщини конденсату PbTe, а

для $S(d)$ – вліво [62]. Таким чином, зміна концентрації носіїв заряду зберігає загальний осциляційний характер d -залежностей термоелектричних параметрів в квантових ямах наноструктури $KCl/PbTe/EuS$, хоча позиції екстремумів при цьому зміщені.

Хороше узгодження між експериментальним і теоретичним періодом осциляцій в моделі КЯ з безмежними стінками спостерігається у залежностях ТЕ параметрів від товщини шару p - $SnTe$ в гетероструктурі KCl/n - $PbTe/p$ - $SnTe/n$ - $PbTe/EuS$. При цьому товщини нижнього і верхнього шарів $PbTe$ зберігалась постійними ($d_{PbTe}^1 \approx 40$ нм і $d_{PbTe}^2 \approx 10$ нм), а товщина шару $SnTe$ змінювалася в межах $d_{SnTe} = (0,5 - 6,0)$ нм [63].

d -залежності ТЕ параметрів наноструктур p - $SnTe$ [64,65], $PbTe:Bi$ [66] на слюді і $PbTe$ на поліаміді [67] без зовнішнього захисного шару також мають осциляційний характер. У цьому випадку квантова яма для носіїв реалізується за рахунок двох бар'єрів: підкладки і сильно збагаченого на акцепторні центри шару на поверхні структури. У випадку полікристалічної структури дифузія кисню може супроводжуватися утворенням тонкого адсорбованого шару на поверхні кожного нанокристаліту; тоді квантування енергетичного спектру носіїв матиме місце в межах кожного кристаліту. Автори згаданих вище робіт зауважують, що максимуми в d -залежностях електричних і кінетичних параметрів також визначаються механізмами росту конденсату.

3. Наноструктуровані термоелектричні матеріали

У напівпровідниковому наноматеріалознавстві вводяться три основні нанооб'єкти: двомірні квантові ями, одномірні квантові дроти і нульмірні квантові точки. На базі цих трьох об'єктів сьогодні конструюють надгратки і композити різного типу. Розрахунки показують, що зміною характерних розмірів квантових ям, дротів і точок можна значно підвищити значення коефіцієнтів термоелектричної потужності $P = S^2\sigma$ і добротності ZT . Це в першу чергу пов'язано з тим, що зниження розмірності призводить до зміни електронної густини станів.

3.1. Надгратки

Експериментальне підтвердження можливості підвищення коефіцієнта Зеебека, з яким спочатку були пов'язані основні сподівання, що покладалися на системи пониженої розмірності, було продемонстровано у надгратках квантових ям (НГКЯ) $PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe$ [7]. Методом молекулярно-променевої епітаксії на підкладках (111) BaF_2 спочатку вирощували буферний шар $PbTe/Pb_{0.958}Eu_{0.042}Te$ товщиною 200 нм і потім, власне, надгратку КЯ $PbTe/Pb_{0.927}Eu_{0.073}Te$ з кількістю періодів від 100 до 150. Товщини шарів $PbTe$ варіювалися між 17 і 55 Å, а товщина бар'єрних шарів $Pb_{0.958}Eu_{0.042}Te$ становила близько 450 Å. Концентрація носіїв варіювалася з використанням донорних атомів Bi у матеріалі бар'єру. У такий спосіб добивалися провідності n -типу у зоні провідності квантової ями. Вимірювання опору, коефіцієнтів Холла і Зеебека проводили в напрямку, паралельному до площин шарів надгратки при 300 К. В результаті зафіксовано ріст ТЕ потужності при зменшенні товщин шарів $PbTe$ і при збільшенні концентрації носіїв n -типу (рис.5).

Експеримент також показав, що коефіцієнт Зеебека одинарної КЯ PbTe з бар'єрами Pb_{0.958}Eu_{0.042}Te рівний S зразка багатократних квантових ям. При цьому експериментальні точки для ТЕ потужності S²n досить добре лягли на теоретичну криву для КЯ PbTe/Pb_{0.927}Eu_{0.073}Te (рис.5).

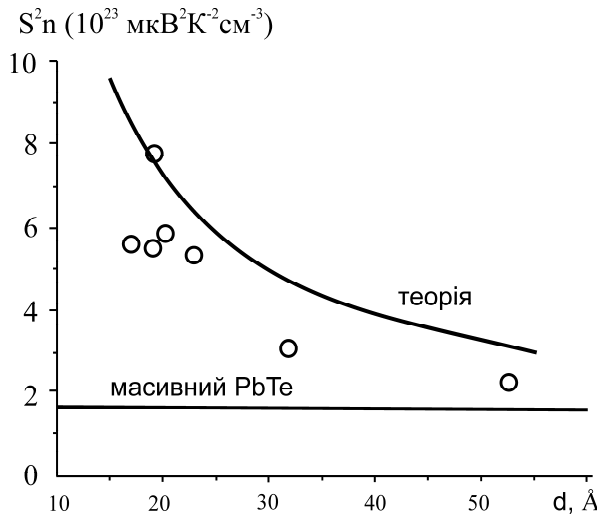


Рис.5. Експериментально визначений коефіцієнт S²n для НГКЯ PbTe/Pb_{0.927}Eu_{0.073}Te як функція товщини шару PbTe при T=300 K. Суцільна лінія представляє теоретичну модель [7]

Важливою характеристикою надграток є їхня здатність зменшувати граткову теплопровідність у порівнянні з масивними матеріалами. У поперечному до площини шарів напрямку спостерігається селективне пропускання височастотних фонових [68]. Так, теплопровідність НГКЯ Si/Ge з періодом (130-300) Å має величину близько 2 Вт (м К)⁻¹, тобто є вдвічі нижчою, ніж у плівок сплаву Si_{0.85}Ge_{0.15} з теплопровідністю (4-5) Вт (м К)⁻¹. Крім того, зменшення величини періоду такої надгратки призводить до росту граткової теплопровідності [69]. Таке ж дворазове зменшення теплопровідності у перпендикулярному до шарів напрямку спостерігалось у НГКЯ Bi₂Te₃/Sb₂Te₃ з періодами (40-120) Å [70], що має теоретичне підтвердження [71].

Теоретичні розрахунки свідчать, що в надгратках зі складною структурою елементарної комірки, кожен період якої складається з трьох, чотирьох і більшої кількості шарів, можливе ще більш значне зменшення теплопровідності [72, 73]. Рекордне значення термоелектричної добротності спостерігалось в НГКЯ Bi₂Te₃/Sb₂Te₃ р-типу ZT=2,4 при 300 K з товщинами шарів Bi₂Te₃ і Sb₂Te₃ 10 і 50 Å відповідно. При цьому граткова теплопровідність складала 0,22 Вт (м К)⁻¹, а сама структура надгратки жодним чином не впливала на рухливість дірок, яка була однаковою вздовж і уперек шарів та майже вдвічі перевищувала діркову рухливість в сплаві BiSbTe₃. В НГКЯ PbTe/PbTe_{0.75}Se_{0.25} n-типу з високою концентрацією електронів (10¹⁹ см⁻³), вирощених тепловим випаровуванням у вакуумі. Також спостерігається дворазове зменшення теплопровідності в порівнянні з плівками сплаву PbTe_{0.75}Se_{0.25} до

величини $0,5 \text{ Вт (м К)}^{-1}$. ТЕ добротність для такої надгратки становить $ZT=0,63$ при 300 К у перпендикулярному до шарів напрямку і $ZT=1,75$ при 425 К – паралельно до шарів, що значно перевищує відповідні значення для об'ємного PbTe .

Нові технологічні процедури, зокрема молекулярно-променева епітаксія та реалізація механізму росту Странські-Крастанова, дали можливість створювати структури із квантових точок. До недавнього часу основною областю застосувань масивів квантових точок вважалася оптоелектроніка. Починаючи з 2000 р. з'явилися теоретичні і експериментальні роботи, які передбачали, що у надгратках квантових точок (НГКТ) можливий значний ріст термоелектричної добротності, що експериментально підтверджувалось [74, 75]. Цінність таких надграток у тому, що в них одночасно реалізуються дві стратегії: розсіювання фононів на плоских шарах випадковим чином розподілених квантових точок без суттєвого впливу на електронну підсистему, а також підвищення коефіцієнту потужності $S^2\sigma$ за рахунок квантово розмірних ефектів.

Робота [76] підтверджує вищесказане. На підкладках BaF_2 методом молекулярно-променевої епітаксії вирощували НГКТ $\text{PbSe}_{0.98}\text{Te}_{0.02}/\text{PbTe}$ товщиною 100 мкм , площею $(1,8 \times 1,8) \text{ см}^2$. Типовий зразок такої надгратки складався з 8005 періодів товщиною 13 нм кожен. При цьому, за рахунок легування вісмутом з джерела ефузійної комірки Vi_2Te_3 отримували НГКТ n-типу. Власне квантові точки формувалися у шарах $\text{PbSe}_{0.98}\text{Te}_{0.02}$. Зміною рівня легування і параметрів росту отримано 15 зразків НГКТ $\text{PbSeTe}/\text{PbTe}$ з різною термоелектричною добротністю ZT та коефіцієнтом Зеебека S (рис.6) [76]. Видно, що ріст коефіцієнта Зеебека супроводжує збільшення величини ZT від $\sim 1,4$ до $\sim 1,7$. Для зразка з найвищою ZT в атмосфері нітрогену за тиску $\sim 1 \text{ атм}$ виявлено домінування металічного ходу (росту) питомого опору із температурою над зростанням коефіцієнта Зеебека, що є причиною зменшення величини $S^2\sigma$ (рис.7). Зазначимо також, що у 2002 р. авторами [76] було повідомлено $ZT=2$ при 300 К у НГКТ $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-y}\text{Sn}_y\text{Te}_{1-x}\text{Se}_x$ з $x=98\%$, $y=16\%$ [77].

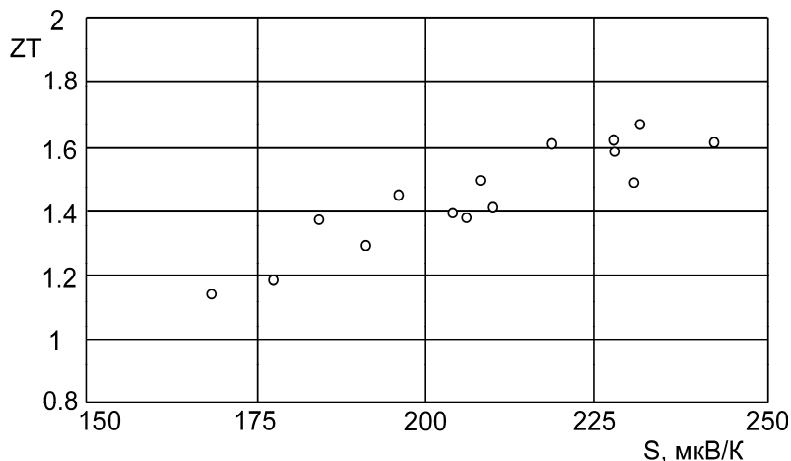


Рис.6. Залежність термоелектричної добротності від коефіцієнта Зеебека для різних зразків НГКТ $\text{PbSe}_{0.98}\text{Te}_{0.02}/\text{PbTe}$ n-типу при 300 К [76]

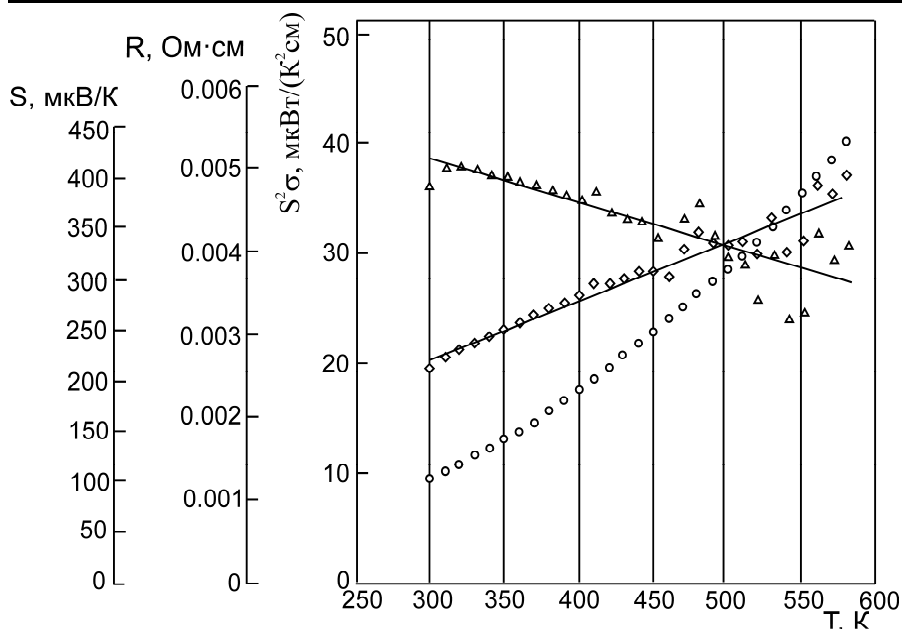


Рис.7. Залежність коефіцієнту Зеебека, електричного опору і коефіцієнту потужності від температури для різних зразків НРКТ $\text{PbSe}_{0.98}\text{Te}_{0.02}/\text{PbTe}$ n-типу при 300 К [76]

◊ – коефіцієнт Зеебека, ○ – електричний опір, △ – коефіцієнт потужності.

Розглянемо більш детально механізми, що є відповідальними за ці результати. По-перше, для НГКТ $\text{PbSeTe}/\text{PbTe}$ сильне пониження ґраткової теплопровідності (k_L) дає значення загальної теплопровідності в діапазоні (0,58-0,62) Вт/(м К) [77]. Оцінка електронної теплопровідності k_E разом з використанням закону Відемана-Франца дозволяє отримати $k_L \approx 0,33$ Вт/(м К) (ще нижчі величини можливі у кватернарі НГКТ $\text{Pb}_{0.84}\text{Sn}_{0.16}\text{Se}_{0.98}\text{Te}_{0.02}/\text{PbTe}$). Зважаючи на те, що ґраткова теплопровідність еквівалентного неупорядкованого сплаву PbSeTe $k_L \approx 1,25$ Вт/(м К), можна стверджувати, що ефект квантових точок полягає у пониженні k_L майже у 4 рази і, ймовірно, ще більше для кватернару НГКТ. З іншого боку, до концентрації $2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ рухливість носіїв у халькогенідах свинцю слабо залежить від рівня легування [77]. Другий механізм, відповідальний за підвищення ZT у НГКТ полягає у зростанні коефіцієнта Зеебека, який виявляється більшим ніж у масивних матеріалах з тією ж густиною носіїв. У НГКТ $\text{Pb}_{0.98}\text{Sn}_{0.02}\text{Se}_{0.13}\text{Te}_{0.87}$ при рухливості вищій за $500 \text{ см}^2/(\text{В с})$ досить великий коефіцієнт ТЕ потужності $S^2\sigma$. Задачею подальших теоретичних робіт є пояснення такого ходу, який, очевидно, пов'язаний з квантово-розмірними ефектами.

Також теоретичні підрахунки свідчать, що у випадку виконання умов утворення мінізон у НГКТ Ge в Si p-типу і підбору параметрів НГ таким чином, щоб транспортування відбувалося вздовж однієї мінізони достатньої ширини, можливе підвищення рухливості носіїв, коефіцієнта Зеебека, і, відповідно, ТЕ добротності [78].

Зазначимо, що попри існування науки теоретичних робіт з дослідження ТЕ властивостей окремих нанодотів, на даний час не існує тех-

нології вирощування надграток на їх основі. Натомість сьогодні наявна технологія створення масивів одномірних нанодротів, зокрема на основі сплавів вісмуту, всередині пор анодних зразків алюмінію [79].

Композити

Дослідженням механізмів теплопровідності у надгратках дійшли висновку, що для зниження теплопровідності періодична структура не є необхідною. Це стало причиною для розвитку композитних термоелектричних матеріалів [80]. Наноккомпозит – це масивний термоелектричний матеріал (господар), який містить в собі компоненти нанометрового масштабу. Введення багатьох поверхонь у матеріал-господар дозволяє за рахунок розсіюючої поверхні зменшити теплопровідність, а також з допомогою енергетичної фільтрації носіїв або квантового обмеження збільшити коефіцієнт Зеєбека S . При цьому, ріст S повинен з надлишком компенсувати зниження електропровідності, тим самим приводячи до збільшення коефіцієнта TE потужності. Такі матеріали легко обробляються і можуть бути об'єднані в ряд бажаної форми для їх використання у приладах. Конструкція наноккомпозитів має забезпечувати у них нижчу теплопровідність, ніж у сплавів того ж номінального складу компонентів.

Різні дослідницькі групи запропонували різноманітні методики синтезу та обробки цих матеріалів [81, 82], які об'єднані рядом загальних засадничих понять, але відрізняються в деталях їхнього виконання. Наприклад, для підготовки наночастинок використовують методи мокрої хімії або кулькового помолу, або ж метод конденсації інертного газу [83]. Так, для сплаву Si_xGe_{1-x} підготовлені нанометрові частинки Si і мікрOMETРОВІ частинки Ge в гарячому стані були пресовані під тиском плазми або в середовищі аргону при 1333 К. Ця методика дозволила отримати тверді, механічно міцні масивні наноккомпозити з густиною, близькою до теоретичної. Так був підготовлений диск діаметром 2,54 см та зразки інших форм. Для контролю цілісності наночастинок на всіх етапах обробки використовували технології X-променів, скануючої електронної мікроскопії (СЕК) і трансмісійної електронної мікроскопії (ТЕМ). Такі дослідження підтвердили попередні теоретичні передбачення важливості досягнення в експериментальному зразку максимально близької до теоретичної густини TE наноккомпозитів, особливо по відношенню до нанометрових частинок [83].

Модельні розрахунки, які використовуються для вибору оптимальних технологічних параметрів в процесі підготовки наноккомпозитних матеріалів, базуються на двох підходах: 1) розв'язку рівняння Больцмана для одиначної комірки, що містить вирівняні в лінію наночастинок, з періодичними граничними умовами, введеними відносно напрямку теплового потоку, і з фіксованою різницею температур через кожну комірку, а також з відбивною здатністю поверхні і часом релаксації, що використовуються як вхідні параметри [80]; 2) у випадку неупорядкованого розміру, орієнтації і розподілу частинок також використовують метод Монте-Карло [84]. Такі підрахунки показують, що у наноккомпозитах

$\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ в діапазоні $0,2 < x < 0,8$ у випадку, коли наночастинки мають розмір порядку 10 нм, теплопровідність може бути значно знижена в порівнянні зі сплавом того ж складу. Крім того, з ростом об'ємної частки наночастинок Si у матеріалі-господарі Ge відбувається спад теплопровідності, що цілком відрізняється від сплаву $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$, теплопровідність якого росте з ростом концентрації Si [85]. Це пояснюється тим, що розмір наночастинок 50 нм і менше створює відповідне обмеження для довжини вільного пробігу, тому теплопровідність k стає більш чутливою до швидкості звуку і питомої теплоємності. Зі збільшенням об'ємної частки Si основним механізмом зниження ефективної теплопровідності кременію є розсіювання [85].

Окрім композитів з невпорядкованим розподілом наночастинок, які при досить малих розмірах можна вважати квантовими точками, існують також композити з випадковим чином розподіленими нанодротоми. Розрахунки показують, що нанокompозити Si-Ge з діаметром дроту Si 10-50 нм можуть мати нижчу теплопровідність, ніж у надгратках (полішарах) Si-Ge того ж розміру товщини плівки і у тій же стехіометрії $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ (при $x > 0,60$) [86]. Це вказує на можливість заміни дорогих надграток рентабельними нанокompозитами з нижчою теплопровідністю. На рис. 8 показано отриману моделюванням Монте-Карло залежність теплопровідності від площі межі розділу на одиницю об'єму наночастинок і нанодротів Si в матеріалі-господарі Ge [1]. Величина мінімальної теплопровідності бралася з роботи [87]. Як бачимо, коли площа границі на одиницю об'єму перевищує $0,08 \text{ нм}^{-1}$, теплопровідність нанокompозиту є нижчою ніж в об'ємному сплаві для цих же видів зразків. Ці результати свідчать про те, що для досягнення низької теплопровідності впорядковані структури не є обов'язковими.

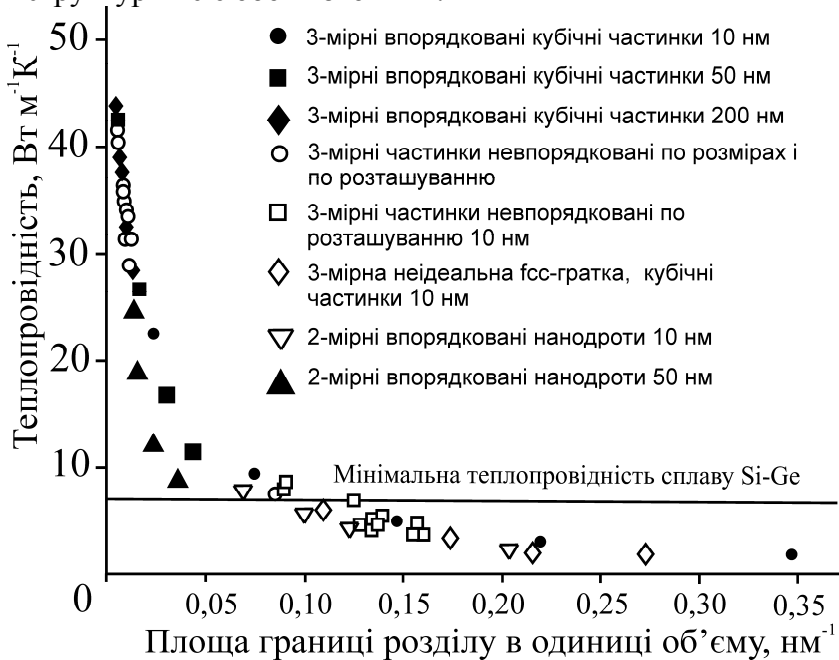


Рис.8. Розрахункова теплопровідність наноструктурованих матеріалів з неоднорідностями різного розміру і форми [1]

Теоретична модель, побудована в роботі [88], показала, що короткохвильові фонони у нанокompозиті в основному розсіюються на точкових дефектах матеріалу-господаря, тоді як наночастинки розсіюють фонони з середніми та великими довжинами хвиль. В цій же роботі для сплаву $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ з нановключеннями ErAs було експериментально виявлено значне зниження теплопровідності і, відповідно, збільшення ТЕ добротності цього матеріалу в два рази. Зниження теплопровідності також було зафіксовано для нанокompозиту $\text{Zr}_{0,5}\text{Hf}_{0,5}\text{Ni}_{0,8}\text{Pd}_{0,2}\text{Sn}_{0,99}\text{Sb}_{0,01}$ від $3,6 \text{ Вт (м К)}^{-1}$ за відсутності і до $2,5 \text{ Вт (м К)}^{-1}$ за наявності об'ємного вмісту частинок ZrO_2 при $T=700 \text{ К}$. Причому збільшення вмісту часток ZrO_2 призвело до росту модуля коефіцієнта Зеебека і до величини ТЕ добротності $ZT=0,75$. Встановлено, що теплопровідність наноструктурованих зразків Si з розміром гранул $10\text{-}30 \text{ нм}$ зменшувалася на порядок по відношенню до масивного кремнію, а введення 5% атомів Ge зменшило теплопровідність ще удвічі – до величини $5\text{-}6 \text{ Вт (м К)}^{-1}$. ТЕ добротність такого зразка $\text{Si}_{0,95}\text{Ge}_{0,05}$ становила $0,95$ при 900 К [89]. Легування PbTe сріблом і сурмою призводить до утворення сполуки $\text{AgPb}_{2n}\text{SbTe}_{2n+2}$ разом з нанорозмірними включеннями AgSb , що в результаті дає $ZT=2,2$ при 800 К [90]. Ріст S і зниження теплопровідності к спостерігається також у спечених полікристалічних зразках PbTe n -типу при зменшенні розміру зерен від 4 до $0,7 \text{ мкм}$ [91]. Це ж спостерігається у наногранульованих зразках PbTe з розміром зерен $30\text{-}50 \text{ нм}$.

Зазначимо, що за кімнатних температур значення ТЕ добротності нанокompозитів залишається досить незначним в порівнянні з надгратками, тому в цьому напрямку зараз ведеться інтенсивна робота.

3.2. Нанооб'єкти: квантові ями, дроти і точки

Дослідження окремих нанооб'єктів в області термоелектрики має ряд завдань. По перше, вивчення термоелектричних характеристик окремої квантової ями дозволяє підібрати оптимальні характеристики надгратки з досить високими бар'єрами у випадку транспорту вздовж площин її шарів. Те ж можна стверджувати про квантовий дріт у масивах КД деякої матриці. Інформація про оптимальні геометричні характеристики окремого нанодрота може бути використана для синтезу композитів з їх випадковим розподілом. Крім того, важливим є розуміння транспорту у наноструктурах з періодичною послідовністю квантових точок. Також, потреба в таких дослідженнях зумовлена чисто науковим інтересом до квантово-розмірних ефектів і процесів розсіювання у наноструктурах.

Авторами [92] проведено систематичний теоретичний аналіз електронних станів і транспортних процесів у квантових ямах $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ n -типу. При цьому враховувалося розсіювання носіїв на оптичних і акустичних фононах. Беручи до уваги міжпідзонні переходи, за допомогою варіаційного методу розв'язано кінетичні рівняння і визначено залежності термоелектричних параметрів від ширини ями для структур КЯ з кристалографічними орієнтаціями (100) і (111) і з різними густинами заряду. Виявлено, що коефіцієнт потужності $(S^2\sigma)$ більший

для КЯ із орієнтацією (100). При цьому збільшення потенціального бар'єру (U), при сталій густині заряду, призводить до зменшення коефіцієнту потужності. Однак, останній можна підвищити за рахунок збільшення дозволеної концентрації носіїв. Отже, при $U=250$ меВ, $d=20$ Å, $n=5 \cdot 10^{18}$ см⁻³ очікувані величини коефіцієнту потужності становлять 175 мкВт см⁻¹ К⁻² та 108 мкВт см⁻¹ К⁻² для орієнтацій (100) і (111) відповідно. Експериментальне підтвердження отриманих раніше результатів для d -залежностей термоелектричних параметрів КЯ (111) PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe з $x=0,073$ ($U=171$ меВ) при 300 К наведено у [93]. В роботі зафіксовано зменшення коефіцієнта потужності з ростом висоти потенціального бар'єру від $U=171$ меВ до $U=250$ меВ при сталій концентрації n . Цей ефект пояснюється спадом σ і S , який спричинюється більш локалізованими хвильовими функціями у глибшій потенціальній ямі. Однак у глибших ямах з'являється можливість підняття оптимальної густини носіїв. Виявлене деяке неспівпадіння експериментальних і розрахункових даних пояснено появою нової підзони, близької до висоти потенціального бар'єру, яка з'являється при $d=50$ Å, а так як неперервний спектр не взято до уваги, то для цієї d обчислення менш точні. У [94] розв'язок кінетичних рівнянь методом ітерацій дозволив проаналізувати термоелектричну добротність КЯ PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe у широкому діапазоні ширини ями і концентрацій носія (рис.9). Як видно, при максимальній концентрації носіїв ($n=10^{19}$ см⁻³) і за орієнтації (100) ZT досягає значення 1,3 при $T=300$ К.

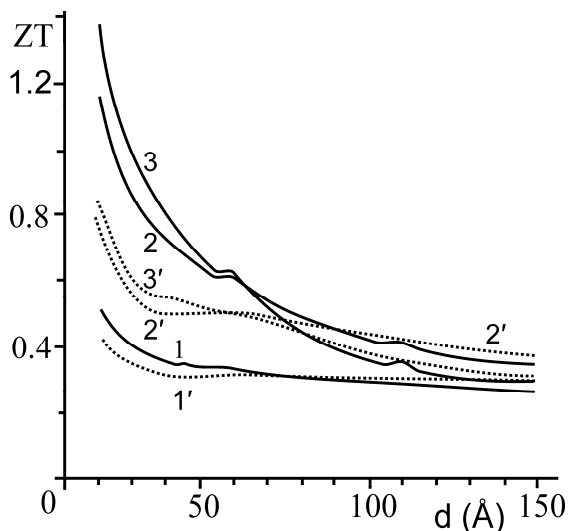


Рис.9. Залежність термоелектричної добротності квантових ям PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe від ширини ями для орієнтацій (100) (криві 1,2,3) і (111) (криві 1',2',3'). Концентрація носіїв n , см⁻³: 10^{18} – криві 1,1'; $5 \cdot 10^{18}$ – криві 2,2'; 10^{19} – криві 3,3'; $T=300$ К [94]

У зв'язку зі складністю вимірювання теплопровідності тонких плівок експериментальні роботи з вимірювання ТЕ параметрів у них часто обмежуються значенням коефіцієнта термоелектричної потужності $S^2\sigma$. Порівняння товщинних залежностей $S^2\sigma$ тонких плівок IV-VI показує,

що найвище значення цього коефіцієнта може бути досягнуто в плівках PbSe $S^2\sigma \approx 90$ мкВт см⁻¹ К⁻² [58-63]. Крім того, роботи [62, 66] експериментально підтверджують вищезазначені теоретичні прогнози щодо збільшення $S^2\sigma$ за рахунок росту концентрації основного носія. В роботі [62] концентрацію носіїв n-типу в плівках PbTe збільшували за рахунок надлишку Pb у вихідній шихті, а у [66] – легуванням телуриду свинцю вісмутом. Хоча плівки PbTe, леговані Ві, не були захищені від окислення, максимальні значення $S^2\sigma$ в обидвох випадках виявились співставними ($S^2\sigma \approx 30$ мкВт см⁻¹ К⁻²). Таке значення $S^2\sigma$ виявляється більшим ніж у інших відомих наноструктур на основі PbTe і Ві (рис.10).

Необхідно звернути увагу на наступне. Теоретично розраховані періоди осциляцій ТЕ параметрів у КЯ за відомою енергією Фермі для масивних зразків, не завжди збігаються із експериментально визначеними. Це, зокрема може бути пов'язано зі значною спрощеністю моделі: неврахуванням присутності домішок та інших дефектів як на поверхні, так і в об'ємі, анізотропності енергетичних рівнів і непараболічної залежності енергії носіїв заряду від квазіімпульсу. Крім того модель не бере до уваги специфічну шарувату структуру та неідентичність бар'єрів на поверхнях розділу.

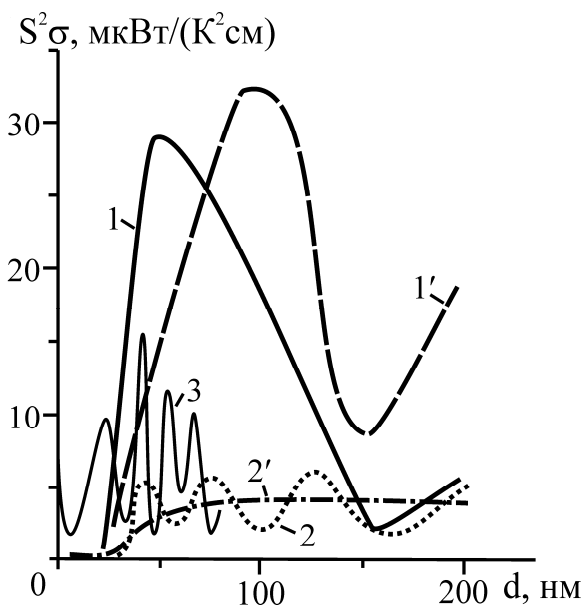


Рис.10. Залежності коефіцієнта термоелектричної потужності $S^2\sigma$ від товщини шару: стехіометричного (крива 1) і з 2 ат.часткою додаткового свинцю (крива 1') PbTe у наноструктурі KCl/n-PbTe/EuS [62]; Ві, вирощеного при $T_{n1} = 380$ К (крива 2) і $T_{n2} = 300$ К (крива 2') у структурі слюда/n-Vi/EuS [54]; та Ві у гетероструктурі слюда/PbTe/Vi/Al₂O₃ ($d_{PbTe}=50$ нм) (крива 3) [54] при $T=300$ К

Що стосується квантових дротів, то, як вже згадувалося, найбільші перспективи в цьому напрямку пов'язують з матеріалами на основі вісмуту. Теоретичні обрахунки показують, що зменшення діаметра нанодроту призводить до росту його ZT. Зокрема, у [95] показано, що при ді-

аметрі в 5 Å в дротині Bi_2Te_3 при кімнатній температурі $ZT=14$. Ці результати було підтверджено у теоретичних роботах [96, 97] для квантового дроту Bi . Зазначимо, що обчислення у всіх цих роботах проводились в наближенні сталого часу релаксації. В теоретичних роботах [98, 99] для вільних нанодротин GaAs та Si було виявлено зниження її теплопровідності при зменшенні діаметра. Обрахунки [99, 100] для напівпровідників III-V і II-VI показали, що величина зниження теплопровідності нанодротин по відношенню до масивних зразків залежить від співвідношення мас атомів компонентів сполуки. При цьому найбільшого значення ТЕ добротності можна досягнути у вільних КД InSb та InAs $ZT \approx 6$ (рис.11) [101, 102].

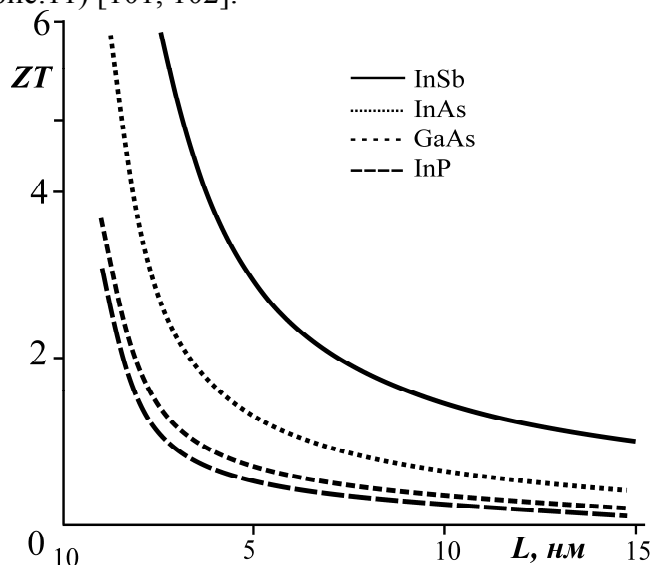


Рис.11. Залежність розрахованої добротності ZT від діаметра нанодротів InSb , InAs , GaAs , InP [102].

Експериментальні дослідження температурної залежності електричного опору нанодротів Bi діаметром 9 і 15 нм в матриці окису алюмінію показують, що такі зразки володіють напівпровідниковими властивостями з шириною забороненої зони 0,17-0,4 еВ. Коефіцієнт Зеєбека при кімнатній температурі виявився більшим у зразків з діаметром 9 нм і становив $2 \cdot 10^4$ мкВ K^{-1} . ТЕ добротність пресованого порошку із нанотрубок Bi_2Te_3 , отриманого гідротермічним синтезом, при $T=450-500$ К приблизно рівна одиниці [103]. Вимірювання ТЕ добротності зручних для виробництва кремнієвих нанодротин діаметром 20-300 нм за рахунок зниження їх теплопровідності на два порядки по відношенню до масивних зразків дало їй значення $ZT \approx 0,6$ при кімнатній температурі [104]. У роботах [105-108] показано можливість експериментального синтезу надграток з квантових точок вздовж нанодротів (інші назви: стеки квантових точок, надгратки у квантовому дроті), а в [109] – проведені обрахунки із зазначенням параметрів, які повинні контролюватися для підвищення ефективності роботи цього типу награток. Встановлено, що завдяки незалежній від діаметру енергії підзони області потенціального

бар'єру і ями масивної гетероструктури можуть бути інвертовані у стеки квантових точок (СКТ). При цьому залежність термоелектричної добротності ZT від довжини сегменту нанодротів має немонотонний осциляційний характер (рис.12). Видно, що оптимальна довжина сегменту СКТ n -PbSe/PbS становить близько 3 нм для обох орієнтацій [001] та [111] з величиною ZT 4,4 і 3,7 відповідно (рис.12,а). Зазначимо, що СКТ p - і n -типу відповідних діаметрів мають подібну залежність ZT від довжини сегменту (рис.12,а,б). При цьому ZT для СКТ p -PbSe/PbS становить 6,2 і 4,4 з довжинами сегментів ~ 2 нм та ~ 4 нм для [001] та [111] орієнтацій відповідно (рис.12,б). СКТ p -PbSe/PbS мають дещо більшу величину ZT , ніж дроти n -типу (рис.12,а,б). Причиною цього може бути менша ефективна маса дірок ніж електронів у PbSe і PbS. З рис.12,в видно, що для СКТ n -PbSe/PbTe діаметром 10 нм осциляторна поведінка є слабше виражена, ніж для 5 нм. Для цих СКТ діаметром 5 нм оптимальні значення ZT 6.4 та 8.1 для сегментів довжиною 2 нм і для обох орієнтацій [001] і [111] (рис.12,в). Загалом, можна відзначити, що СКТ PbSe/PbTe володіють кращою термоелектричною добротністю, ніж їхні аналоги PbSe/PbS, причиною чого є більша анізотропія носіїв і менші ефективні маси PbTe, ніж у PbS, які забезпечують більшу густину станів, а також менші ефективні маси у нанодротах, ніж у масивних матеріалах [109].

В 2010 р. у теоретичних роботах В. Фоміна і П. Кратзера було виявлено високу чутливість коефіцієнта ZT до значення енергії Фермі і, відповідно, концентрації носіїв у СКТ InAs/GaAs. Так, при певних значеннях енергії Фермі величина ZT СКТ InAs/GaAs практично рівна нулю, а при інших, досить близьких до попередніх, значеннях ТЕ добротність досягає значення $ZT=3$ [110, 111].

Висновки

В роботі проведено огляд основних теоретичних та експериментальних робіт щодо впливу квантово-розмірних ефектів на термоелектричні властивості наноструктурованих матеріалів. Висвітлено основні стратегії і концепції в цьому напрямку. Показано, що основним чинником відродження інтересу до термоелектрики на початку 90-их стала можливість підвищення термоелектричної добротності за рахунок зниження розмірності матеріалу. Експериментальні вимірювання ТЕ добротності надграток на основі квантових ям і точок, композитів на основі квантових дротів і точок, масивів нанодротів, а також окремих наноб'єктів частково підтвердили попередні теоретичні передбачення.

Для розуміння шляхів покращення термоелектричної добротності основна задача на сьогодні полягає у розробці теоретичних моделей впливу квантово-розмірних ефектів на електронну і фононну підсистему наноструктур. Необхідною умовою досягнення бажаної термоелектричної добротності є розробка технології отримання наноструктур із заданим середнім розміром часток, розподілом їх за розмірами та густиною, які повинні підтримуватись як на етапі створення і обробки, так і протягом часу їх експлуатації.

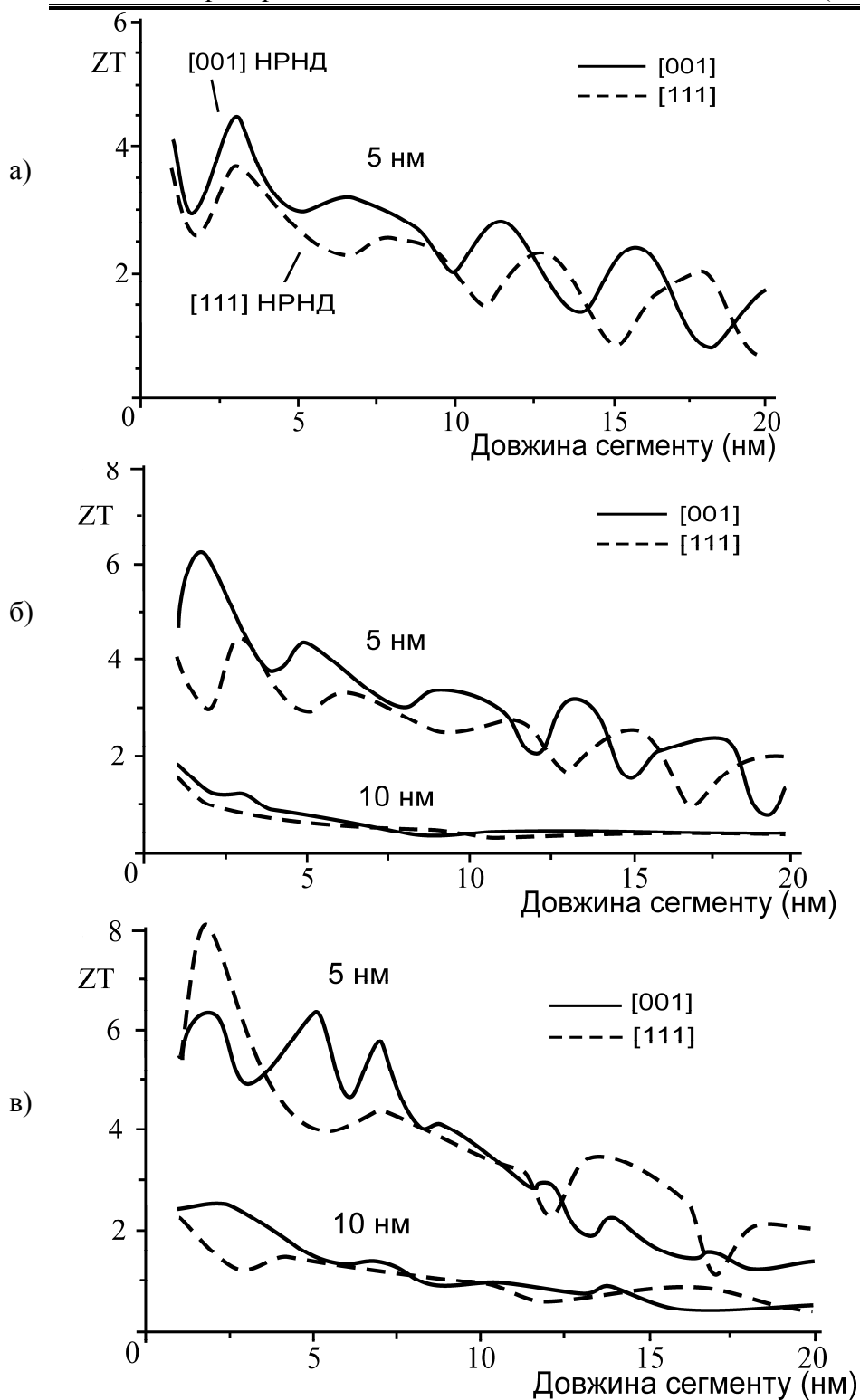


Рис.12. Залежність термоелектричної добротності ZT надграток нанодротів n -PbSe/PbS (а), p -PbSe/PbS (б) та n -PbSe/PbTe (в) різних діаметрів від довжини сегменту гетероструктури для орієнтацій [001] (—) і [111] (---) при 77 К [109]

Література

1. New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials / M.S.Dresselhaus, G.Ghen, M.I.Rang, R.Yang, H.Lee, D.Wang, Z.Ren, J.-P.Fleurial, P.Gogna // *Adv. Mater.* – 2007. – №19. – P. 1043-1053.
2. Дмитриев А.В. Современные тенденции развития физики термоэлектрических материалов / А.В.Дмитриев, И.П.Звягин // *УФН.* – 2010. – Т.180, №8. – С. 821-838.
3. Ohita H. Thermoelectrics based on strontium titanate Thermoelectric energy conversion technology is attracting great / H.Ohita // *Materials Today* – 2007. – V10. – P. 44-49.
4. Шперун В.М., Фреїк Д.М., Запухляк Р.І. Термоелектрика телуриду свинцю та його аналогів / В.М.Шперун, Д.М.Фреїк, Р.І.Запухляк. – Івано-Франківськ: Плай. – 2000. – 250 с.
5. Tritt T.M. Thermoelectric Materials, Phenomena, and Applications: A Bird's Eye View / T.M.Tritt, M.A.Subramanian // *MRS Bulletin* – 2006. – V.31. – P. 188-198.
6. Transport properties of Bi nanowire arrays / Y.-M.Lin, S.B.Cronin, J.Y.Ying, M.S.Dresselhaus, J.P.Heremans // *Appl. Phys. Lett.* – 2000. – V.76. – P. 3944.
7. Experimental study of the effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit / L.D.Hicks, T.C.Harman, X.Sun, M.S.Dresselhaus // *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* – 1996. – V.53. №16 – P.10493.
8. Experimental proof-of-principle investigation of enhanced $Z_{3D}T$ in (001) oriented Si/Ge superlattices / T.Koga, S.B.Cronin, M.S.Dresselhaus, J.L.Liu, K.L.Wang // *Appl. Phys. Lett.* – 2000. – V.77. – P.1490.
9. Proc. for the 18th Int. Conf. on Thermoelectric / T.C.Harman, P.J.Taylor, D.L.Spears, M.P.Walsh. – AIP, New York, 1999.
10. Venkatasubramanian R. Recent Trends in Thermoelectric Materials Research III (Ed: TM Tritt) in Semiconductors and Semimetals / R.Venkatasubramanian. – Chapt. 4 – San Diego: Academic, CA. – 2001. – V.71. – P. 175-201.
11. Yang B. Beyond Bismuth Telluride in Chemistry / B.Yang, G.Chen // *Physics, and Materials Science for Thermoelectric Materials.* – New York: Kluwer Academic/Plenum Publisher. – 2003. – P. 147-167.
12. Humphrey T.E. Power optimization in thermionic devices / T.E.Humphrey, M.F.O'Dwyer, H.Linke / *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2004. – V.38. – P. 2051.
13. Ravich Y.I. CRC «Handbook of Thermoelectrics» (Ed: DM Rowe) / Y.I.Ravich. – New York: CRC Press. – 1995. – P. 67-73.
14. Koga T. Carrier pocket engineering to design superior thermoelectric materials using GaAs/AlAs superlattices / T.Koga, X.Sun, S.B.Cronin, M.S.Dresselhaus // *Appl. Phys. Lett.* – 1998. – V.73. – P. 2950.
15. Yu P.Y. Fundamentals of Semiconductors / P.Y.Yu, M.Cardona // *Physics and Material Properties.* - 3rd edition – Berlin: Springer. – 2001. – P. 22.

16. Koga T. Carrier pocket engineering applied to “strained” Si/Ge superlattices to design useful thermoelectric materials / T.Koga, X.Sun, S.B.Cronin, M.S.Dresselhaus // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – V.75. – P.2438.
17. Lin Y.-M. *Advances in Chemical Engineering* / Y.-M.Lin, M.S.Dresselhaus, J.Y.Ying; Ed: K. Ricci). – York: Academic, PA, 2001. – Ch.5. – P. 167-203.
18. Takaoka S. Studies of Far-Infrared Properties of Thin Bismuth Films on BaF₂ Substrate / S.Takaoka, K.Murase // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1985. – V.54. – P. 2250.
19. Bismuth nanowire arrays: Synthesis and galvanomagnetic properties / J.Heremans, C.M.Thrush, Y.-M.Lin, S.Cronin, Z.Zhang, M.S.Dresselhaus, J.F.Mansfield // *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* – 2000. – V.61. – P. 2921.
20. Hicks L.D. Use of quantum well superlattices to obtain a high figure of merit from nonconventional thermoelectric materials / L.D.Hicks, T.C.Harman, M.S.Dresselhaus // *Appl. Phys.Lett.* – 1993. – V.63. – P. 3230.
21. Heremans J. Resistance, Magnetoresistance, and Thermopower of Zinc Nanowire Composites / J.Heremans, C.M.Thrush, D.T.Morelli, M.-C.Wu // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – V.91. – P. 076-804.
22. Лифшиц И. М., Косевич А.М. // *ДАН СССР.* – 1953. – №91 – С. 795.
23. Лифшиц И. М. Об осцилляциях термодинамических величин для вырожденного ферми-газа при низких температурах / И.М.Лифшиц, А.М.Косевич // *Изв. АН СССР. Сер. физ.* – 1955. – №19. – С. 395.
24. Косевич А.М. Эффект де-Гааза-ван Альфена в тонких слоях металлов / А.М.Косевич, И.М.Лифшиц // *ЖЭТФ.* – 1955. – №29. – С. 743.
25. Лифшиц И.М. *Успехи физических наук*/ И.М.Лифшиц, А.М.Косевич. – 1959. – №69. – С. 419.
26. Сандомирский В.Б. К теории квантовых эффектов в электропроводности полупроводниковых пленок / В.Б.Сандомирский // *Радиотехника и электроника.* – 1962. – №7. – С. 1971.
27. Сандомирский В.Б. О зависимости ширины запрещенной зоны в полупроводниковых пленках от их толщины и температуры / В.Б.Сандомирский // *ЖЭТФ.* – 1962. – V.43. – С. 2309.
28. Тавгер Б.А. О некоторых эффектах, обусловленных дискретностью энергетического спектра электрона в тонких пленках / Б.А.Тавгер, В.Я.Демиховский // *ФТТ.* – 1963. – Т.5, №2. – С. 644-648.
29. Огрин Ю.Ф. О наблюдении квантовых размерных эффектов в пленках Bi / Ю.Ф.Огрин, В.Н.Луцкий, М.И.Елинсон // *Письма в ЖЭТФ.* – 1966. – №3. – С. 114-118.
30. Луцкий В.Н. О наблюдении квантовых размерных эффектов в пленках висмута методом туннельной спектроскопии / В.Н.Луцкий, Д.Н.Корнеев, М.И.Елинсон // *Письма в ЖЭТФ.* – 1966. – №4. – С. 267-270.
31. Тавгер Б.А. Квантовые размерные эффекты в полупроводниковых и полуметаллических пленках / Б.А.Тавгер, В.Я.Демиховский // *Успехи физических наук.* – 1968. – Т.96, №1. – С. 61-86.

32. Сандомирский В.Б. Квантовый эффект размеров в пленке полуметалла / В.Б.Сандомирский // ЖЭТФ. – 1967. – №52. – С. 158.
33. Каганов М.И. К теории квантовых размерных эффектов / М.И.Каганов, С.С.Недорезов, А.М.Рустамова // ФТТ. – 1970. – №12. – С. 2277.
34. Луцкий В.Н. Об особенностях оптического поглощения металлических пленок в области превращения металла в диэлектрик / В.Н.Луцкий // Письма в ЖЭТФ. – 1965. – №2. – С. 391-395.
35. Бухштаб Е.И. Переход полуметалл-полупроводник при изменении толщины пленок сплава висмут-сурьма / Е.И.Бухштаб, Ю.Ф.Комник, Ю.В.Никитин // Физика низких температур. – 1982. – Т8, №5. – С. 513-517.
36. Гогодзе Г.А. Осцилляции туннельного тока из тонких металлических слоев / Г.А.Гогодзе, И.О.Кулик // ФТТ. – 1965. – №7. – С. 432.
37. Роговская Э.Т. Влияние размерного квантования на проводимость систем металл-оксид-полупроводник / Э.Т.Роговская // ФТП. – 1973. – №7. – С. 1209.
38. Malone F. The role of defects in the quantum size effect // Thin Solid Films / F.Malone, W.D.Deering. – 1975.– № 27. – P. 177.
39. Баскин Э.М. Локализованные состояния электронов в тонких слоях, обусловленные геометрическими дефектами поверхности / Э.М.Баскин, А.В.Чаплик, М.В.Энтин // ЖЭТФ. – 1972. – №63. – С. 1077.
40. Чаплик А.В. О примесном рассеянии электронов в квантовых пленках / А.В.Чаплик // ЖЭТФ. – 1970. – №59. – С. 2110.
41. Аскеров Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках / Б.М.Аскеров. – М.:Наука.Гл.ред.физ.-мат. лит. – 1985. – 320 с.
42. Шик А.Я. Физика наноразмерных систем / А.Я.Шик, Г.Б.Бакуева, С.Ф.Мусихин. – Санкт-Петербург: Наука. – 2001. – 160 с.
43. Комник Ю.Ф. «Квантовые размерные эффекты в тонких пленках олова» / Ю.Ф.Комник, Е.И.Бухштаб // Письма в ЖЭТФ. – № 8. – 1968. – С. 9-13.
44. Alekseevskii N.E. Dependence of the transparency of aluminium on the thickness / N.E.Alekseevskii, S.I.Vedeneev // ZhETF Pis'ma. – Т6, №9. – 1967. – P. 865-868.
45. Класичний і топологічний розмірні ефекти в оптичних властивостях тонких плівок золота / М.Л.Дмитрук, О.С.Кондратенко, С.А.Коваленко, І.Б.Мамонтова // Фізика і хімія твердого тіла. – 2006. – Т7, №1. – С. 39-44.
46. Бігун Р.І. Перехід від квантового до класичного переносу заряду в тонких плівках міді / Р.І.Бігун, З.В.Стасюк // Фізика і хімія твердого тіла. – 2005. – Т6, №3. – С. 414-417.
47. Комник Ю.Ф. Особенности магнетосопротивления тонких пленок висмута / Ю.Ф.Комник, В.В.Андриевский, Е.И.Бухштаб // ФТТ. – 1970. – Т12, №11. – С. 3266-3269.
48. Квантовые размерные эффекты в тонких пленках висмута / Ю.Ф.Огрин, В.Н.Луцкий, Р.М.Шефталь, М.У.Арифова, М.И.Елинсон // Радиотехника и электроника. – 1967. – №12. – С. 748.

49. Комник Ю.Ф. Наблюдение квантового и классического размерных эффектов в поликристаллических тонких пленках висмута / Ю.Ф.Комник, Е.И.Бухштаб // ЖЭТФ. – 1968. – Т.54, №1. – С. 63-68.
50. Комник Ю.Ф. Квантовый размерный эффект в тонких пленках висмута с добавлением сурьмы / Ю.Ф.Комник, Е.И.Бухштаб, Ю.В.Никитин // ФНТ. – 1975. – Т1, №2. – С. 243-246.
51. Комник Ю.Ф. Обнаружение квантовых осцилляций проводимости в тонких пленках сурьмы / Ю.Ф.Комник, Е.И.Бухштаб // Письма в ЖЭТФ. – 1967. – №6. – С. 536-540.
52. Комник Ю.Ф. Особенности температурной зависимости сопротивления тонких пленок висмута / Ю.Ф.Комник, Е.И.Бухштаб, Ю.В.Никитин // ЖЭТФ. – 1971. – Т.60, №2. – С. 669-687.
53. Луцкий В.Н. Особенности оптических характеристик пленок висмута в условиях квантового размерного эффекта / В.Н.Луцкий, Л.А.Кулик // Письма в ЖЭТФ. – 1968. – №8. – С. 133-137.
54. Любченко С.Г. Явища переносу і квантові розмірні ефекти в тонких плівках телуриду свинцю та вісмуту та структурах на їх основі // Автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. фіз.-мат. наук: спец. 01.04.10 “Фізика напівпровідників та діелектриків”, Г.С.Любченко. – Харків, 2007. – 20 с.
55. Филатов О.Н. Квантовые размерные эффекты в тонких пленках InSb / О.Н.Филатов, И.А.Карпович // Письма в ЖЭТФ. – 1969. – №10. – С. 224-226.
56. Термоелектричні властивості тонких плівок PbTe при витримці на повітрі / Д.М.Фреїк, І.К.Юрчишин, В.В.Бачук, Л.Т.Харун, Ю.В.Лисюк // Фізика і хімія твердого тіла. – 2010. – Т.11, №3. – С. 598-603.
57. Вплив кисню на профілі електричних параметрів монокристалічних плівок телуриду свинцю / Ю.В.Кланічка, Б.С.Дзундза, Л.Т.Харун, Г.Д.Матеїк // Фізика і хімія твердого тіла. – 2009. – Т.10, №2. – С. 303-306.
58. Effect of oxidation on the thermoelectric properties of PbTe and PbS epitaxial films / E.I.Rogacheva, I.M.Krivulkin, O.N.Nashchekina, A.Yu.Sipatov, V.V.Volobuev, M.S.Dresselhaus // Applied Physics Letters. – 2001. – Т.78, №12. – P. 1661-1663.
59. Quantum size effects in PbSe quantum wells / E.I.Rogacheva, T.V.Tavrina, O.N.Nashchekina, S.N.Grigorov, K.A.Nasedkin // Applied Physics Letters. – 2002. – V.80, №15. – P. 2690-2692.
60. Effect of thickness on the thermoelectric properties of PbS thin films / E.I.Rogacheva, O.N.Nashchekina, Y.O.Vekhov, M.S.Dresselhaus, S.B.Cronin // Thin Solid Films. – №423 – P. 115-118.
61. Percolation transition of thermoelectric properties in PbTe thin films / E.I.Rogacheva, I.M.Krivulkin, O.N.Nashchekina, A.Yu.Sipatov, V.A.Volobuev, M.S.Dresselhaus // Appl. Phys. Let. – 2001. – V.78, №21 – P. 3238-3240.
62. Oscillatory behaviour of the transport properties in PbTe quantum wells / E.I.Rogacheva, O.N.Nashchekina, S.N.Grigorov, M.S.Dresselhaus,

- S.B.Cronin // Institute of Physics Publishing. Nanotechnology. – 2003. – №14 – P. 53-59.
63. Quantum size effects in n-PbTe/p-SnTe/n-PbTe heterostructures / E.I.Rogacheva, O.N.Nashchekina, A.V.Meriuts, S.G.Lyubchenko, M.S.Dresselhaus G.Dresselhaus // Applied Physics Letters. – 2005. – №86. – P. 063103.
64. Oscillations in the Thickness Dependences of the Room-Temperature Seebeck Coefficient in SnTe Thin Films / E.I.Rogacheva et al. // Thin Solid Films. – 2005. – V.484, №1-2. – P. 433-437.
65. Розмірні ефекти у термоелектричних параметрах наноструктур телуриду олова / І.К.Юрчишин, І.І.Чав'як, Ю.В.Лісюк, Л.Т.Харун // Фізика і хімія твердого тіла – 2010. – Т.11, №4. – С. 898-903.
66. Квантові розмірні ефекти термоелектричних параметрів наноструктур на основі PbTe і Bi / Д.М.Фреїк, І.К.Юрчишин, Ю.В.Лісюк, Г.Д.Матеїк, О.Р.Надрага // Фізика і хімія твердого тіла. – 2011. – Т.12, №3. – С. 650-655.
67. Наноструктури на основі сполук IV-VI для термоелектричних перетворювачів енергії / Д.М.Фреїк, І.К.Юрчишин, В.М.Чобанюк, Р.І.Никируй, Ю.В.Лісюк // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології. – 2011. – Т.2, №8. – С. 41-54.
68. Selective Transmission of High-Frequency Phonons by a Superlattice: The "Dielectric" Phonon Filter / V.Narayanamurti et al. // Phys. Rev. Lett. 1979. – V.43. – P. 2012.
69. Thermal conductivity of Si-Ge superlattices / S-M.Lee, D.G.Cahill, R.Venkatasubramanian // Appl. Phys. Lett. – 1997. – V.70 – P 2957.
70. Thermal characterization of Bi₂Te₃/Sb₂Te₃ superlattices / M.N.Touzelbaev et al. // J. Appl. Phys. – 2001. – V.90. – P. 763.
71. Venkatasubramanian R. Lattice thermal conductivity reduction and phonon localizationlike behavior in superlattice structures / R.Venkatasubramanian // Phys. Rev. B. – 2000. – V.61. – P. 3091.
72. Landry E.S. Complex superlattice unit cell designs for reduced thermal conductivity / E.S.Landry, M.I.Hussein, A.J.H.McGaughey // Phys. Rev. B. – 2008. – V.77. – C. 184-302.
73. Dmitriev A.V. Electron spectrum and infrared transitions in semiconductor superlattice with a unit cell allowing for quasi-localized carrier states / A.V.Dmitriev, R.Keiper, V.V.Makeev // Physica E. – 2001. – V.11. – P. 391.
74. In-plane lattice thermal conductivity of a quantum-dot superlattice / A.Khitun et al. // J. Appl. Phys. – 2000. – V.88. – P. 696.
75. Quantum Dot Superlattice Thermoelectric Materials and Devices / T.C.Harman et al. // Science. – 2002. – V.297. – 2229.
76. Nanostructured thermoelectric materials / T.C.Harman, M.P.Walsh, B.E.LaForge, G.W.Turner // J. of Electronic Mater. – 2005 – V.34, №5. – L19L22.

77. Quantum Dot Superlattice Thermoelectric Materials and Devices / T.C.Harman, P.J.Taylor, M.P.Walsh, B.E.LaForge // *Science*. – 2002. – №297 – P. 2229.
78. Balandin A.A. Mechanism for thermoelectric figure-of-merit enhancement in regimented quantum dot superlattices / A.A.Balandin, O.L.Lazarenkova // *Appl. Phys. Lett.* – 2003. – V.82 – P. 415.
79. Bismuth quantum-wires arrays fabricated by electrodeposition in nanoporous anodic aluminum oxide and its structural properties / Yong Peng, Dong-Huan Qin, Rong-Lie Zhou, Hu-Lin Li // *Materials Science and Engineering*. – 2000. – V.77. – P. 246-249.
80. Yang R.G. Thermal conductivity modeling of periodic two-dimensional nanocomposites / R.G.Yang, G.Chen // *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* – 2004. – V.69. – P. 195316.
81. Heremans J.P. // *Materials and Technologies for Direct Thermal-to-Electric Energy Conversion MRS Proceedings*. - Materials Research Society, Pittsburgh. – 2005. –V. 886. – P. 0886-F04-10.1.
82. Shakouri A. *Thermoelectric Materials 2005 - Research and Applications*», MRS Symp. Proc / A.Shakouri // Materials Research Society Press, Pittsburgh. – 2005. – P. F7.1.
83. Dresselhaus M.S., Chen G., Tang M. Y., Yang R.G., Lee H., Wang D.Z., Ren Z.F., Fleurial J.P., Gogna P. // *Materials and Technologies for Direct Thermal-to-Electric Energy Conversion*, MRS Symp. Proc. - Materials Research Society Press, Pittsburgh. – 2005. – P. 3-12.
84. Modeling the Thermal Conductivity and Phonon Transport in Nanoparticle Composites Using Monte Carlo Simulation / M.S.Jeng, R.G.Yang, D.Song, G.Chen // *J. Heat Transfer*. –2008. – V.130. – 042410.
85. Yang R. Thermal conductivity of simple and tubular nanowire composites in the longitudinal direction / R.Yang, G.Chen, M.S.Dresselhaus // *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* – 2005. – V.72. – 125418.
86. Yang R. Thermal conductivity modeling of periodic two-dimensional nanocomposites / R.Yang, G.Chen // *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* – 2004. – V. 69. – 195316.
87. Abeles B. Lattice Thermal Conductivity of Disordered Semiconductor Alloys at High Temperatures / B.Abeles // *Phys. Rev.* – 1963. –V.131. – P.1906.
88. Thermal Conductivity Reduction and Thermoelectric Figure of Merit Increase by Embedding Nanoparticles in Crystalline Semiconductors / W.Kim et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – V. 96. – 045901.
89. Increased Phonon Scattering by Nanograins and Point Defects in Nanostructured Silicon with a Low Concentration of Germanium / G.H.Zhu et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – N.102. – 196803.
90. Cubic $\text{AgPb}_m\text{SbTe}_{2+m}$: Bulk Thermoelectric Materials with High Figure of Merit / K.F.Hsu et al. // *Science*. – 2004. – N.303. – P. 818.
91. Kishimoto K. Preparation of sintered degenerate n-type PbTe with a small grain size and its thermoelectric properties / K.Kishimoto, T.Koyanagi // *J. Appl. Phys.* – 2002. – V. 92. – P. 2544.

92. Thermoelectric properties of PbTe/PbEuTe quantum wells / A.Casian, I.Sur, H.Scherrer, Z.Dashevsky // *Phys. Rev.B.* – 2000. – V.61. – P. 15965-15974.
93. Harman T.C. High thermoelectric figures of merit in PbTe quantum wells / T.C.Harman, D.L.Spears, M.J.Manfra // *J. Electron. Mater.* – 1996. – V.25. – P. 1121-1127.
94. Sur I. Electronic thermal conductivity and thermoelectric figure of merit of n-type PbTe/PbEuTe quantum wells / I.Sur, A.Casian, and A.Baladin // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V.69. – 035306.
95. Hicks L.D. Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit / L.D.Hicks, M.S.Dresselhaus // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V.47. – 12727.
96. Sun X. Theoretical modeling of thermoelectricity in Bi nanowires / X.Sun, Z.Zhang, M.S.Dresselhaus // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – V.74. – 4005.
97. Lin Y.-M. Theoretical investigation of thermoelectric transport properties of cylindrical Bi nanowires / Y.-M.Lin, X.Sun, M.S.Dresselhaus // *Phys. Rev.* – 2000. – V.62. – P. 4610.
98. Lattice thermal conductivity of wires / S.G.Walkauskas et al. // *J. Appl. Phys.* 1998. – V. 85. – P. 2579.
99. Mingo N. Calculation of Si nanowire thermal conductivity using complete phonon dispersion relations / N.Mingo // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68. – 113308.
100. Lattice Thermal Conductivity Crossovers in Semiconductor Nanowires / N.Mingo, D.A.Broido // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V.93. – 246106.
101. Mingo N. Thermoelectric figure of merit and maximum power factor in III–V semiconductor nanowires / N.Mingo // *Appl. Phys. Lett.* – 2004. – V. 84. – 2652.
102. Mingo N. «Thermoelectric figure of merit and maximum power factor in III–V semiconductor nanowires» / N.Mingo // *Appl. Phys. Lett.* – 2006. – V.88. – 149902.
103. Bismuth telluride nanotubes and the effects on the thermoelectric properties of nanotube-containing nanocomposites / X.B.Zhao et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – V. 86. – 062111.
104. Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires / A.I.Hochbaum et al. // *Nature.* – 2007. – N.451. – P. 163.
105. Giant magnetoresistance in magnetic multilayered nanowires / L.Piroux, J.M.George, J.F.Despres, C.Leroy // *Appl. Phys. Lett.* – 1994. – V.65 – 2484.
106. Wu Y. Block-by-Block Growth of Single-Crystalline Si/SiGe Superlattice Nanowires / Y.Wu, R.Fan, P.Yang // *Nano Lett.* – 2002. – N.2. – P.83.
107. Growth of nanowire superlattice structures for nanoscale photonics and electronics / M.S.Gudiksen, L.J.Lauhon, J.Wang, D.Smith, C.M.Lieber // *Nature.* – 2002. – N.415. – P.617.
108. One-dimensional Steeplechase for Electrons Realized / M.T.Bjork, B.J.Ohlsson, T.Sass, A.I.Persson, C.Thelander, M.H.Magnusson,

- K.Deppert, L.R.Wallenberg, L.Samuelsen // Nano Lett. – 2002. – N.2. – P. 87.
109. Thermoelectric properties of superlattice nanowires / Yu-Ming Lin, M.S.Dresselhaus // Physical Review B. – 2003. – V. 68. – 075304.
110. Fomin V.M. Thermoelectric transport in periodic one-dimensional stacks of InAs/GaAs quantum dots / V.M.Fomin, P.Kratzer // Physical Review B. – 2010. – V.82. – 045318.
111. Fomin V.M. Modeling of minibands and electronic transport in one-dimensional stacks of InAs/GaAs quantum dots / V.M.Fomin, P.Kratzer // Physica E – 2010. – V.42. – P. 906-910.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 18.12.2011 р.
Рекомендовано до друку д.ф.-м.н., професором Рувінським М.А.*

NANOSTROUCTOUROVANI THERMO-ELECTRIC MATERIALS (REVIEW)

**D. M. Freik, M.A. Lop'yanko, I. K. Yurchyshyn,
Yu. V. Lysiuk, O. L. Sokolov**

*PreCarpathians National University by Vasyl Stefanyk;
76000, Ivano-Frankivs'k, Shevchenko st., 57;
e-mail: freik@pu.if.ua*

The review of the works devoted to the quantum size effects in materials of the brought dimension down is done, in particular: metals, semimetals and semiconductors. The special attention is spared to ability of material to achieve the simultaneous increase of coefficient of power and reduction of heat conductivity in one direction. Perspective semiconductor connections are explored for construction of over grate quantum points, wires, pits and nanostructuring composite.

Key words: *nanostructuring, quantum-size effects, thermo-electricity.*

УДК 539.2

**МЕТОДИ ДІАГНОСТИКИ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ
ПАРАМЕТРІВ ТВЕРДИХ ТІЛ (ОГЛЯД)****Д. М. Фреїк¹, М. О. Галушак², А. І. Ткачук²,
Ю. В. Лисюк¹, О. С. Криницький²**¹*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника;
76018, Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57; e-mail: freik@pu.if.ua*²*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76018, Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
e-mail: andrij.tkachyk@gmail.com*

Викладено основні методи вимірювання теплопровідності, а також інших термоелектричних параметрів (коефіцієнта Зеебека, електропровідність) твердих тіл і тонких плівок та конструкції установок для цих методів. Наведено ряд теоретичних та емпіричних формул для обчислення цих параметрів. Оцінено точність вимірювання для кожного з методів та проаналізовано причини, виникнення похибок при вимірюванні.

Ключові слова: термоелектрика, теплопровідність, методи вимірювання.

Зміст

Вступ

I. Стаціонарні методи

1.1. Порівняльні методи

1.1.1. Метод Стакс і Чесмара

1.1.2. Метод Бауерса

1.2. Абсолютні методи

1.2.1. Метод Розенберга при низьких температурах

1.2.2. Низькотемпературний метод

1.2.3. Метод вимірювання теплопровідності з низькою провідністю
тепла

1.2.4. Високотемпературний метод

1.2.5. Вимірювання термоелектричних параметрів у низькому діа-
пазоні температур

1.2.6. Метод з радіаційним екраном

1.2.7. Метод радіального теплового потоку

1.3. Метод Кольрауша

1.4. Метод динамічного калориметра

II. Динамічні та періодичні методи

2.1. Метод А.В. і А.Ф. Іоффе

2.2. Зондові методи

2.3. Метод Ангстрема

2.4. Метод Хармана

2.5. Методи регулярного режиму

2.6. Метод акалориметра

III. Методики визначення теплопровідності тонких плівок

3.1. Абсолютний метод визначення теплопровідності тонких плівок

3.2. 3ω -метод визначення теплопровідності тонких плівок

Висновки

Література

Вступ

Більшість методів, які використовуються при вимірюванні теплопровідності напівпровідників, принципово не відрізняється від методів, які використовуються для інших речовин в твердому стані. Виняток становлять напівпровідники, що володіють добрими термоелектричними властивостями. В пунктах 1.3 та 2.4 будуть наведені методи, придатні тільки для таких речовин, проте і їх теплопровідність, звичайно, вимірюється більш загальними способами. Доцільно перерахувати різні методи вимірювання, а потім на прикладах описати деякі установки, що використовуються для напівпровідникових матеріалів.

Методи вимірювання теплопровідності поділяються на стаціонарні і динамічні. В першому випадку вимірювання проводяться після встановлення рівноваги. Це вкрай важливо для досягнення високого ступеня точності, проте встановлення рівноваги, особливо для поганих провідників тепла, може виявитися дуже тривалим процесом. При цьому час, необхідний для вимірювань на даному зразку при декількох різних температурах, виявиться дуже великим. У разі застосування динамічного методу, що базується на залежності потоків тепла від температури, можна набагато швидше і детальніше провести вимірювання в широкому інтервалі температур. Проте динамічні вимірювання мають свої недоліки, оскільки з їх допомогою важко досягти дуже високого ступеня точності. Вельми зручний метод, в якому спостерігаються періодичні зміни температури, пов'язані з тепловими хвилями, був запропонований Ангстремом.

Слід розрізняти вимірювання абсолютні і порівняльні. В абсолютному методі безпосередньо вимірюється тепло, яке проходить через зразок. Зазвичай тепло передається зразку через один його кінець у вигляді електричної енергії. В порівняльному методі одна і та ж кількість тепла проходить через досліджуваний зразок і через зразок з відомою теплопровідністю, розташований послідовно з досліджуванним. Потік тепла обчислюється за градієнтом температури на еталонному зразку. Теплопровідності еталонного і досліджуваного матеріалів повинні бути величинами одного порядку. Абсолютні методи зазвичай застосовуються за температур нижчих кімнатної, проте унаслідок малих розмірів звичайних напівпровідникових зразків при більш високих температурах краще використовувати порівняльний метод. При цьому розсіювання тепла шляхом випромінювання в оточуючий простір виявляється не таким істотним.

Розмір і форма зразка, призначеного для вимірювань, суттєво залежать від порядку величини його теплопровідності. При виборі самих відповідних розмірів слід врахувати різні джерела похибок, що виникають при вимірюванні теплопровідності. При визначенні електропровідності напівпровідника припускають, що електричний струм тече тільки через зразок; навколишній простір практично є ідеальним ізолятором. При вимірюванні теплопровідності завжди існує імовірність витоку тепла через оточуюче середовище. Якщо таким середовищем служить повітря, то тепло може відводитися внаслідок теплопровідності і конвекції; навіть якщо зразок був поміщений в глибокий вакуум, тепло може відводитися випромінюванням. Щоб бічні втрати тепла зробити порівняно малими, найдоцільніше використовувати короткі зразки з великою площею поперечного перерізу. При цьому важко точно визначити градієнт температури. Якщо термометри були під'єднані безпосередньо до зразка, то вони порушуватимуть розподіл температури, крім того не завжди легко виміряти відстань між ними. Можна поступити і по-іншому: заміряти різницю температур блоків, між якими був укладений зразок; проте при цьому істотними стають температурні градієнти на контактах. З цієї точки зору, більш вигідні довгі зразки. Тому слід компроміс між двома взаємно протилежними вимогами. На практиці зазвичай використовують довгі бруски, якщо речовина є добрим провідником тепла [1,2], і короткі диски або пластинки, якщо речовина – поганий провідник тепла [3].

I. Стаціонарні методи

Методи визначення теплопровідності, в основному поділяються на стаціонарні і нестаціонарні (динамічні). До перших відносять методи з наявністю внутрішніх джерел теплоти й електричні стаціонарні методи, зокрема абсолютні і порівняльні методи, а також метод Кольрауша

1.1. Порівняльні методи

Ці методи відносяться до стаціонарних методів і полягають в тому, що кількість теплоти, яка пройшла через напівпровідник, визначається з відомих параметрів еталонного зразка, що знаходиться в ідеальному контакті з напівпровідником. Метод досить добре зарекомендував себе для різних матеріалів у досить широкому інтервалі температур: від кількох до 1000 К. Ознайомимось з двома модифікаціями цього методу

1.1.1. Метод Стакс і Чесмара

Метод, розвинутий Стакс і Чесмаром [4], привертає увагу своєю простотою і, крім того, забезпечує точність вимірювань до 10%. Він може бути використаний для температур вищих 400°C.

Схема приладу зображена на рис.1. Напівпровідниковий зразок і два зразки із речовини з відомою теплопровідністю затискалися між чотирма срібними блоками під джерелом тепла за допомогою навантаження, прикладеного через підшипник. Джерело тепла складалося з ніхромового дроту, навитого на циліндр із нержавіючої сталі. Ця колона, закріплена на важкій мідній підставі, разом із стінками була теплоприймачем, в якому підтримувалася однакова температура. Необхідна тем-

пература досягалася поміщенням приладу у вакуумну піч.

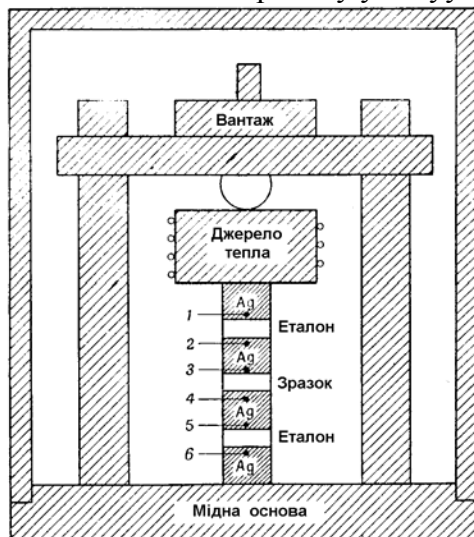


Рис.1. Прилад Стакс і Чесмара для порівняльних вимірювань теплопровідності [4]. 1-6 – термопары Ni–Cr/Ni–Al

Температура поблизу поверхні срібних блоків вимірювалася за допомогою шести хромонікелевих – нікельалюмінієвих термопар. Контакти термопар покривалися ізоляцією і вводилися в блоки через циліндричні отвори; щоб уникнути похибок при вимірюванні температури глибина занурення термопар повинна була принаймні у вісім разів перевищувати діаметр ізоляції. Тонкі дротини термопар перед виходом з приладу з'єднувалися з товстими дротинами з того ж матеріалу.

В ідеальному випадку через досліджуваний зразок і два еталонних повинна протікати однакова кількість тепла. Проте на практиці деяка кількість тепла неминуче втрачається через бічні поверхні зразків і срібних блоків. Поліруванням складових частин приладу втрати на випромінювання зменшувалися. Величина цих втрат оцінювалася порівнянням градієнтів температур на двох еталонних зразках. Вважалося, що тепловий потік через досліджуваний зразок рівний середньому значенню теплових потоків, який проходить через два еталонні зразки, і таким чином, враховувалися втрати тепла через бічну поверхню.

Зразки повинні, добре контактувати зі срібними блоками. Для цього недостатньо тільки відполірувати або навіть відшліфувати їх поверхні. Необхідний тепловий контакт може бути досягнутий за допомогою застосування індієвої амальгами.

Теплопровідність еталонних матеріалів повинна бути близькою до теплопровідності досліджуваних речовин. Стакс і Чесмар використовували еталони з неіржавіючої сталі, проте для вимірювань на напівпровідниках з низькою теплопровідністю вони пропонували використовувати кварц.

1.1.2. Метод Бауерса

Порівняльний метод був використаний Бауерсом та його співробітниками [5] для вимірювань на арсеніді індію і антимоніді індію до те-

мператур вище 800 С. Прилад, схема якого була запозичена у Франкля і Кінгері [6], зображений на рис.2. Потік тепла через колону підтримувався нагрівачами А і G. Решта нагрівачів, В, С, D, Е і F, використовувалися для того, щоб створити в циліндровому алундовому екрані такий же розподіл температур, як і в центральній колоні. Платина – платинові термодієві термопари (1-10) розташовувалися в показаних на рисунку положеннях. В еталонні блоки і в досліджувані зразки термопари вводилися через отвори діаметром 0,8 мм, які висвердлювалися ультразвуковим дрилем. Алундовий захист застосовувався запобіганню від забруднення термопар при високих температурах. Потік гелію через прилад оберігав його частини від окислення.

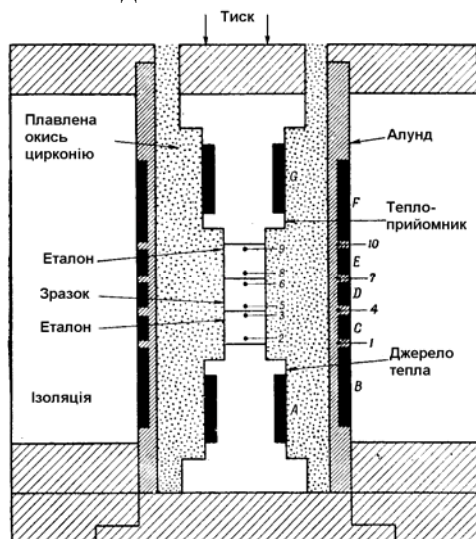


Рис.2. Прилад Бауерса і ін. [5] для порівняльних вимірювань теплопровідності

Поверхні блоків виконувалися гладкими і плоскими для поліпшення теплового контакту між ними. Похибки внаслідок теплового опору контактів зводилися до мінімуму приєднанням термопар безпосередньо до порівнюваних зразків. Це було показано в допоміжному експерименті, в якому поверхні покривалися колоїдним графітом; результати при цьому не змінювалися.

Як еталонний зразок застосовувався алунд. Його теплопровідність була визначена порівнянням з теплопровідністю заліза Армко.

Бауерс і його колеги виявили, що при кімнатній температурі отримані ними результати з точністю до 2% співпадають з результатами, отриманими для тих же самих матеріалів за абсолютним методом.

1.2. Абсолютні методи

Деякі напівпровідники мають теплопровідність того ж порядку, що і більшість металів. Інші напівпровідники при кімнатних температурах є не дуже добрими провідниками тепла, але при низьких температурах мають дуже велику теплопровідність. Тому важливо ознайомитися з абсолютним методом, який підходить для речовин з високою теплопровідністю. З другого боку, напівпровідники, що використовуються в термоелектричних приладах, мають малу теплопровідність, так що необ-

хідно також описати абсолютний метод, який використовується і для таких речовин.

Установки для вимірювання абсолютним методом дають надійні результати в інтервалі температур від 1,4 до 1300 К і мають кілька модифікацій: модифікація Розенберга, низькотемпературна, для вимірювання поганих провідників тепла і високотемпературна. Великою перевагою установок є можливість одночасного виміряти термо-е.р.с. і електропровідності, знання яких необхідно для розшифровки складових теплопровідності. Вимірювальні зразки мають діаметр 1 см або площу поперечного перерізу 1x1 і висоту 0,8-2 см у залежності від значення теплопровідності зразка.

1.2.1. Метод Розенберга за низьких температурах

Вимірювання температурного градієнта уздовж зразка проводилося за допомогою гелієвих газових термометрів 4. В інших дослідженнях часто застосовувалися вугільні термометри опору [9]; термометри стають нечутливими в області гелієвих температур. Кільцеві мідні контакти припаювалися до зразка і до мідних камер газових термометрів, кожна з яких мала об'єм близько 3 мл. Ці камери за допомогою капілярів з неіржавіючої сталі були пов'язані з U-подібними скляними трубками, що містять бутілфталат. Капіляри занурювалися в камеру з рідким гелієм 1. Загальний неробочий об'єм термометрів складав приблизно 1 мл.

Камера була відкачана, і зразок оточувався мідним радіаційним екраном 5, так що бічні втрати із зразка були дуже малі. Крім того, вакуум запобігав нагріванню гелієвого контейнера і, такий спосіб зменшувалися втрати рідкого гелію.

Інтервал температур від 1,4 до 4,2°К перекривався за допомогою гелію, що кипів при зниженому тиску. Область температур від 4,2 до 10°К досягалася шляхом розширення через голчастий клапан гелію, що знаходиться під високим тиском. Вище 10°К застосовувався рідкий водень, при 55°К – киплячий при зниженому тиску кисень. Для підтримки проміжних температур використовувався також дротяний нагрівач 2, навитий на мідний утримувач 3.

Розенберг [7] виміряв теплопровідність деяких металів на установці, показаній на рис.3. Цей же прилад був використаний ним для вимірювань теплопровідності кремнію і германію [8]. Ці роботи ілюструють не тільки принципи вимірювання теплопровідності добрих провідників тепла, але і техніку роботи при низьких температурах.

Кожен зразок мав форму стрижня завдовжки приблизно 5 см і діаметр від 1 до 3 мм. Джерелом тепла 6 слугувала дротина з опором 100 Ом, навита на один кінець зразка і скріплена з ним. Інший кінець зразка був міцно закріплений в мідному утримувачі 3, який прикріплювався до нижньої частини камери високого тиску зріджувача Симон 2, що працює за принципом розширення; під час вимірювань при найнижчих температурах ця камера містила рідкий гелій. Один з кінців деяких металевих зразків мав нарізку і угвинчувався в мідний утримувач 3, кінець інших зразків приварювався до штабіку, який вже угвинчувався в утримувач.

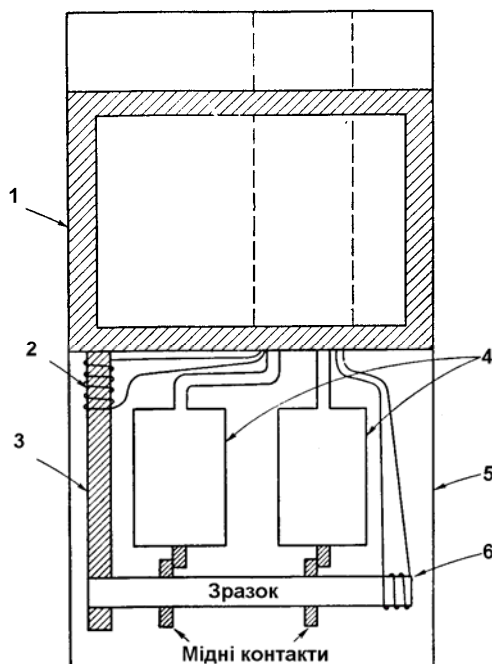


Рис.3. Прилад Розенберга для вимірювання теплопровідності при низьких температурах [8]

1.2.2. Низькотемпературний метод

Низькотемпературна модифікація установки призначена для роботи в інтервалі температур 80-480°K [10, 11]. Її схема зображена на рис. 4. Між вимірювальними зразками 6 розташований нагрівник 1 з площею поперечного перерізу, рівною площі перерізу зразків. Потужність нагрівника визначається шляхом вимірювання різниці потенціалів на його кінцях (провідник 3) і сили струму (провідник 2). Зразки і нагрівач за допомогою сільфону 8 притиснуті до фланця 5. Весь пристрій закритий герметичним ковпаком 7. Для проведення вимірювань установка відкачується до тиску 10-4 мм.рт.ст. Різниця температур на зразку вимірюється за допомогою мідь-константових термопар діаметром 0,15 мм, припаяних до срібних штифтів 4, що вставлені в отвори матеріалу. Для зменшення відтоку теплоти термопари виготовлені досить довгими.

За допомогою вимірювання температурної залежності теплопровідності вся установка поміщується або в посудину Дьюара, наповнену різними рідинами, або в піч. Різниця температур на зразку зазвичай складало 7-10°K. Відстань між термопарами – приблизно 0,6 см, і точно вимірюється.

При використанні цього методу теплопровідність обчислюється за формулою:

$$\chi = \frac{I\Delta U - Q_{тр}}{\frac{s_1}{\delta_1}(T_2 - T_1) + \frac{s_2}{\delta_2}(T_3 - T_4)} \tag{1.1}$$

де: I – струм через нагрівач; ΔU – напруга на нагрівачі; $Q_{\text{тп}}$ – теплові втрати з бічних сторін зразків; s_1 і s_2 – площі поперечного перерізу першого і другого зразків; δ_1 і δ_2 – товщини першого і другого зразків; T_1 і T_2 – температури на гарячому і холодному кінцях першого зразка; T_3 і T_4 – відповідні температури для другого зразка.

Теплові втрати для кожного зразка визначалися з рівняння $Q_{\text{тп}} = [T_x^4 - T_k^4 - 2T_x^3 \Delta T] E F_\delta$, де T_x – температура холодної сторони; T_k – температура кожуха приладу; ΔT – різниця температур на зразку; E – коефіцієнт випромінювання зразка; F_δ – площа поверхні зразка до перетину, де вимірюється температура холодного спаю.

Похибка вимірювань складається з похибок визначення геометричних розмірів ($\pm 0,8\%$), різниці температур ($\pm 2\%$), показів приладів ($\pm 2\%$), кількості прохідної теплоти ($\pm 2\%$) і в сумі досягає $\pm 7\%$.

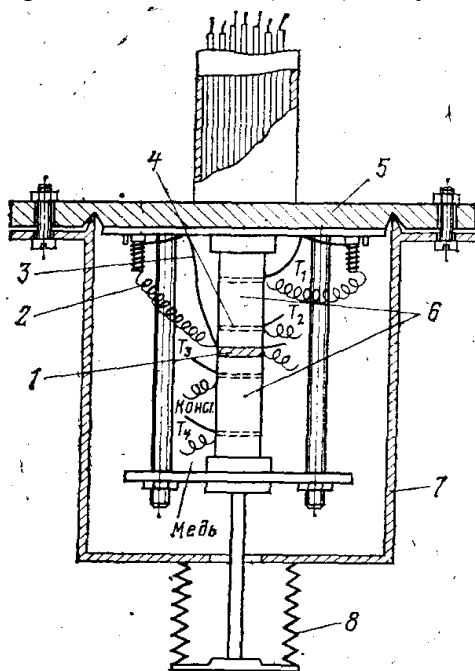


Рис.4. Низькотемпературна установка для вимірювання теплопровідності абсолютним методом [10]

1.2.3. Метод вимірювання теплопровідності з низькою провідністю тепла

Крім важливих термоелектричних застосувань, напівпровідники, які погано проводять тепло, є об'єктом для вивчення електронного внеску в теплопровідність, особливо коли носії струму знаходяться в стані слабкого виродження. При температурах вищих за кімнатну радіаційні втрати обмежують ступінь точності вимірювань. Тому частіше досліджується область температур нижче за кімнатну. Прилад, який ми опишемо, дозволяє проводити вимірювання при температурах від 130 до 330°K на речовинах, що мають теплопровідність в межах від менше

0,01 Вт/см·К до більше 0,1 Вт/см·К. Схема цього приладу була зображена на рис.5 [12].

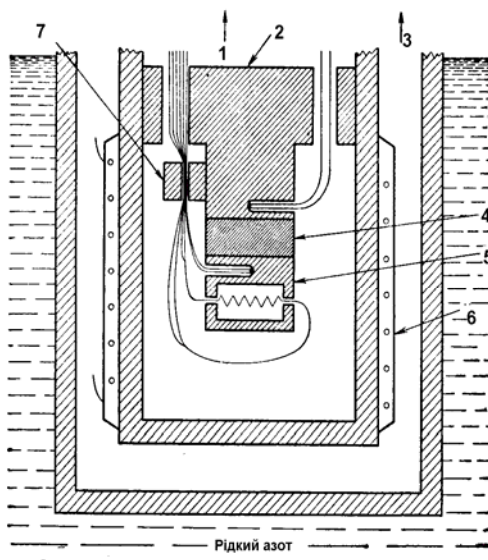


Рис.5. Прилад для вимірювання теплопровідності поганих провідників тепла абсолютним методом [12]

Джерело тепла 5 є ізольованою ніхромовою котушкою, укладеною всередині мідного блоку. Прикладена потужність визначається за вимірюваними величинам струму і напруги. Зразки 4 мали поперечний перетин близько 1 см². Їх поверхні шляхом електрополірування виконувалися плоскопаралельними. Тепловий контакт поліпшувався завдяки застосування сплаву Вуда. Теплоприймач 2 був мідним циліндром, який знизу переходив в менший циліндр, що безпосередньо з'єднувався з верхнім кінцем зразка. Температури джерела 5 і теплоприймачі 2 вимірювалися за допомогою мідно-константових термопар. Всі електричні введення входили в прилад при температурі теплоприймача. Прилад знаходився у відкачаному просторі 1. Втрати тепла від джерела, крім зразка 4, мали малу і відому величину. Ця величина вимірювалася у всьому інтервалі температур за відсутності зразка і добре співпадала з величиною, обчисленою на підставі геометрії приладу. Тому результати можна було розумно коректувати. Малий теплоопір контактів на межах зразка 4 визначався шляхом порівняння результатів, отриманих на зразках різної довжини.

Температура теплоприймача регулювалася зміною ступеня вакууму 3 в просторі, що відокремлює його від зовнішнього циліндра, зануреного в рідке повітря, а також зміною сили струму, що проходить через нагрівач. Було встановлено, що для зразків з теплопровідністю близько 0,02 Вт/см·К повна похибка не перевищує 3 % у всьому інтервалі температур. Похибки при вимірюванні термо-е.р.с., яку також можна проводити на цьому приладі одночасно з вимірюванням теплопровідності, повинні бути, мабуть, набагато меншими.

1.2.4. Високотемпературний метод

Високотемпературна модифікація установки використовується для вимірювання теплопровідності в інтервалі температур 300-1300 К [13,14]. Її схема подана на рис.6. Вимірюваний зразок 4 розміщується на підставці, що має вигляд сталевій шайби 6 з молібденовим осердям у центрі, для кращого відведення тепла. Зверху на зразок встановлюється градієнтна піч 3, площа поперечного перерізу якої дорівнює (як і в попередній модифікації) площі поперечного перерізу зразка. Бічні теплові втрати від градієнтної печі компенсуються охоронною піччю 2, що є молібденовим стаканом з електронагрівачем. Компенсація теплових втрат градієнтної печі досягається тим, що температура охоронної печі автоматично зрівнюється до температури градієнтної печі.

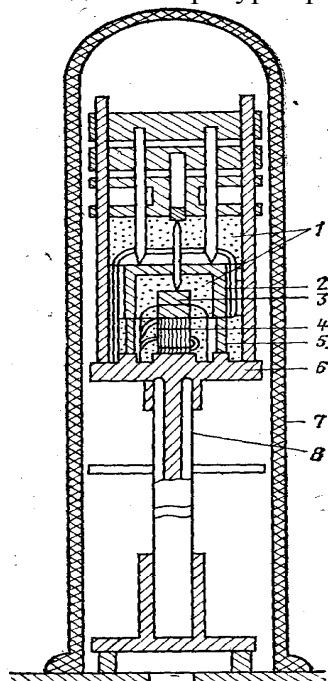


Рис.6. Високотемпературна установка для вимірювання теплопровідності абсолютним методом [13]

Охоронна піч “стає” на кварцове кільце 5, розташовані зовні зразка і має однакову з ним висоту. Перепади температур на зразку і кільці внаслідок подібностей їх теплопровідностей і площ поперечного перерізу приблизно однакові, а температури в однакових перетинах рівні, що усуває втрати теплоти з бічної поверхні зразка. З цією ж метою простір між кварцовим кільцем (екраном) і зразком заповнюється ізоляційною засипкою 1 з дуже низькою теплопровідністю, яка до того ж усуває втрати теплоти від зразка конвекцією і випромінюванням. Але при цьому потрібно враховувати теплоту, що надходить від градієнтної печі розміщеної паралельно до зразка за засипанням. Спосіб його розрахунку буде поданий нижче.

Всі контактні поверхні для зменшення теплового опору необхідно ретельно припасувати. Поліпшення теплового контакту досягається

притисканням за допомогою вантажу. Вимірювання температури на зразку проводиться способом, аналогічним до способу для низькотемпературної модифікації установки, тільки замість срібних штифтів встановлюються платинові, нікелеві або молібденові. Весь пристрій закріплюється на алундовій трубці 8, що має кілька екранів, через які виводяться термопарові та електричні провідники. У шайбі 6 встановлена термopapa для визначення загальної (фонової) температури установки. Установка закривається кварцовим ковпаком 7, з внутрішнього об'єму якого спочатку відкачується повітря до 10^{-3} мм.рт.ст., а потім об'єм заповнюється інертним газом. На кварцовий ковпак встановлюється загальна фонова піч, яка створює необхідну температуру.

Регулювання роботи фонової печі проводиться вручну за допомогою автотрансформатора й автоматично за допомогою електронного потенціометра. Конструкція установки, створеної авторами, складалася з двох однакових вимірювальних комірок («плечей» установки) з єдиним вимірювальним пультом і електричною схемою. Це викликано тим, що при використанні розглянутого методу на установку зразка, проведення досліду і розбивання вимірювальної комірки потрібно затратити значний час. Тому для пришвидшення експерименту під час проведення вимірювань на одному з плечей установки, на другому проводиться розбивання комірки й встановлення зразка.

Теплопровідність напівпровідника при використанні даної конструкції знаходиться за формулою: $\chi = \frac{(Q_{гр} - Q_{тв})^{\delta}}{\Delta T s'}$, де $Q_{гр}$ – кількість теплоти градієнтної печі, що проходить через зразок; δ – відстань між штифтами термopap; s' – площа поперечного перерізу зразка; ΔT – перепад температур на зразку, рівний 5-15 К; $Q_{тв}$ – теплові втрати.

Величина $Q_{тв}$ складається з декількох складових. По-перше, сюди входить потік теплоти по засипці вздовж зразка: $Q_{тв}^{зас} = \frac{1}{3} \chi_{зас} \frac{\Gamma_{зас} \Delta s}{L}$, де $\chi_{зас}$ – теплопровідність засипки; Δs – площа поперечного перерізу засипки між кварцовим кільцем і зразком; L – висота зразка; $\Delta T_{зас}$ – різниця температур засипання по висоті зразка.

Величина $\Delta T_{зас}$ – знаходиться з виразу $\Delta T = \frac{\Delta T_{зп} 4}{L} + \frac{\omega}{0,08}$, де ω – електрична потужність градієнтної печі, а коефіцієнт 0,08 враховує втрату потужності при тепловому контакті з зразком. Також необхідно врахувати теплові втрати від градієнтної печі і зразка на підвідних струмових і термopapових провідниках:

$$Q_{тв}^{гр} = \frac{\sum \chi_{пp} s_{пp} \Delta T_{пp}}{L_{пp}} \quad (1.1)$$

У формулі (1) усі величини під знаком суми відносяться до одного провідника. Величина $\Delta T_{пp}$ при температурах, близьких до кімнатної

визначається як $T_{гор} - T_{кім}$. При високих температурах для більш точного знаходження $Q_{тв}$ можна використовувати градуйовану криву.

Похибка вимірювання теплопровідності розглянутим методом складається з похибок визначення геометричних розмірів ($\pm 0,8\%$), температури ($\pm 1,7\%$), показів приладів ($\pm 2\%$). З врахуванням теплових втрат, які не піддаються розрахунку внаслідок складності температурних полів у вимірювальній комірці, повна похибка становить $\pm 5-7\%$.

Цей же метод застосовується для визначення теплопровідності аморфних тіл. Розглянемо найбільш вдалу, на наш погляд, схему, зображену на рис.7. Вимірювальна комірка поміщається в циліндричний металевий кожух 2 з нагрівачем 11. В якості холодильника служить масивний фланець 8, який охолоджується термостатуючою рідиною.

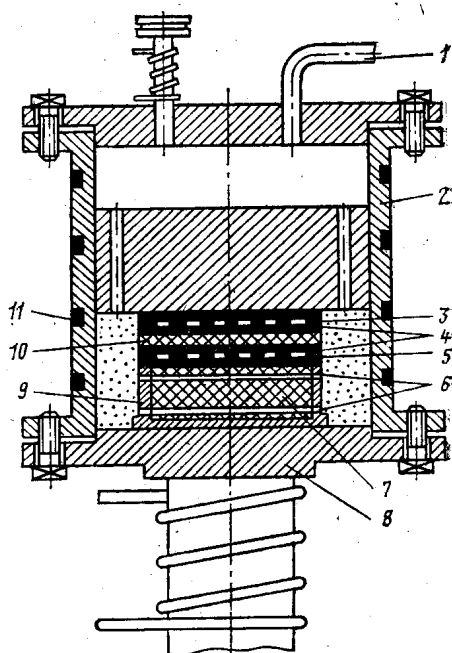


Рис.7. Схема установки для вимірювання теплопровідності аморфних тіл [15]

Досліджуваний зразок 7, поміщений в асбоцементну кювету 9. Нагрівання зразка здійснюється градієнтною піччю 5. Термопари, встановлені в кварцові або скляні капіляри, проходять через отвори 6. За допомогою цих термопар вимірюється різниця температур в зразку. Через трубку 1 проводиться відкачування системи і заповнення її інертним газом. Диференціальна термопара 4, спаї якої відділені теплоізоляційною пластиною 10, з'єднана з гальванометром. Сталість температури на спаях термопари підтримується регулюванням нагрівання компенсаційної печі 3. Відкрита поверхня зразка перед дослідом шліфується під один рівень з бортом кювети і щільно закривається тонкою графітовою пластиною.

Похибка визначення теплопровідності за допомогою цієї установки складає близько $\pm 10\%$.

1.2.5. Вимірювання термоелектричних параметрів у низькому діапазоні температур

У роботі запропоновано конструкції вимірювальних комірок, а також додаткові кріогенна система та фонові пічі, які забезпечують вимірювання термоелектричних параметрів у широкому інтервалі температур (77-1000)°К.

Фонові пічі (рис.8) виконують роль теплового захисного контура. Це дозволяє виконувати вимірювання термоелектричних параметрів у широкому діапазоні температур (77-1000)°К та забезпечити плавне регулювання температури зразка.

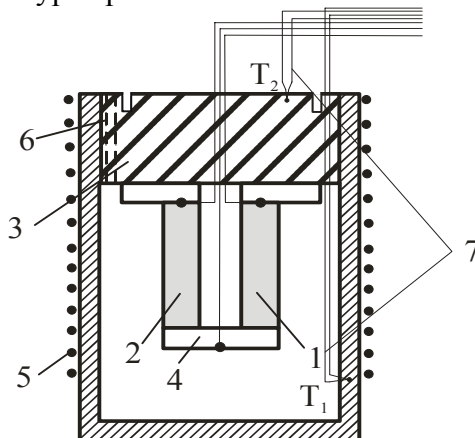


Рис.8. Комірка для вимірювань термоелектричних параметрів напівпровідникових матеріалів: 1, 2 – два зразки одного типу провідності з ідентичними розмірами і властивостями, 3 – термостатична основа, 4 – комутуюча металічна пластинка, 5 – фонові піч, 6 – наскрізний отвір, 7 – термопари хромель-алюмель [15]

Для забезпечення вимірювань основних термоелектричних параметрів комірка (рис.8) використовується в двох системах. Для вимірювань в діапазоні (77-500)°К комірка приєднується до кріогенної системи (рис.9). Для вимірювань в діапазоні (300-1000)°К комірка від'єднується від кріогенної системи і поміщається під ковпак вакуумного універсального поста типу ВУП-4.

Вимірювальна комірка (рис.8, 9) складається із двох циліндричних зразків 1 і 2 одного типу провідності з ідентичними розмірами і властивостями, термостатичної основи 3 (з якою зразки мають хороший тепловий контакт), металічної пластини 4 (яка комутує верхні кінці зразків), фоновієї печі 5 (для плавного нагрівання від 77°К до 1000°К). В термостатичній основі зроблений наскрізний отвір 6, що забезпечує вакуум при вимірюваннях у двох температурних режимах. Для контролю температури фоновієї печі і зразка використовуються термопари хромель-алюмель 7.

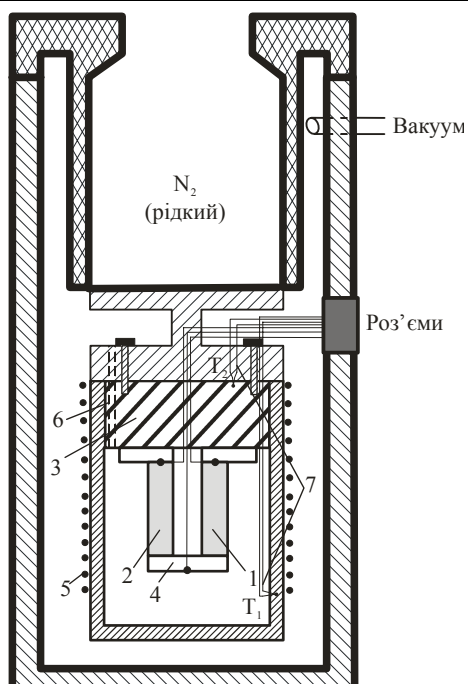


Рис.9. Вимірювальна комірка у криогенній системі (позначення ті ж, що і на рис.8)

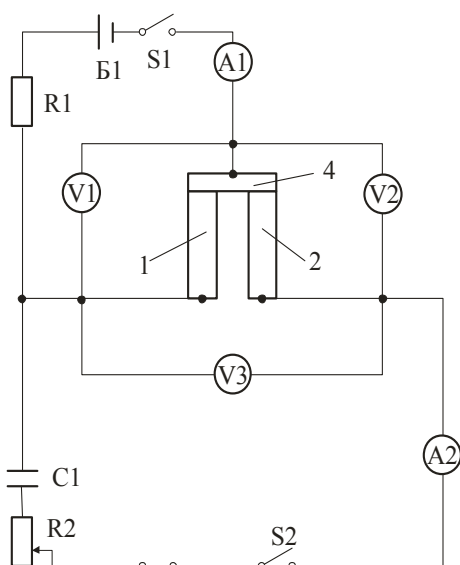


Рис.10. Електрична схема для вимірювання термоелектричних параметрів напівпровідникових матеріалів (позначення 1, 2, 4 відповідають рис.8)

Електрична схема вимірювань показана на рис.10. Вимірювання проводять у два етапи: при постійному і змінному струмах [15]. У першому випадку пропускають постійний струм через зразок $1 \left(j = 0,5 \frac{\text{А}}{\text{см}^2} \right)$. На зразку встановлюється перепад температур ΔT . Зниження напруг фіксують за допомогою вольтметрів V1, V2, V3 (рис.10). Параметри кіл в цьому випадку пов'язані співвідношеннями:

$$\begin{aligned} U_1 &= IR + \alpha\Delta T, \\ U_2 &= \alpha\Delta T, \\ U_3 &= U_1 - U_2 = IR, \end{aligned} \tag{1.2}$$

де U_1, U_2, U_3 – спади напруг, В; I – постійний струм, А; R – електричний опір зразка, Ом; α – термо-е.р.с., В/К.

Рівняння балансу тепла на холодному кінці зразка (контакті) має вигляд

$$\alpha IT = 2 \frac{\chi S}{l} \Delta T. \tag{1.3}$$

Тут χ – коефіцієнт теплопровідності, Вт/(см К); l – висота зразка, см; S – площа поперечного перерізу зразка, см².

Із (1.2) маємо:

$$\begin{aligned} \alpha\Delta T &= U_1 - IR, \\ \Delta T &= \frac{U_1 - IR}{\alpha}, \\ R &= \frac{U_3}{I}. \end{aligned} \tag{1.4}$$

Із (1.3) та врахуванням (1.4) отримаємо, що

$$\frac{\alpha^2 T I}{\chi} = 2 \frac{S}{l} (U_1 - IR) \tag{1.5}$$

Оскільки $\sigma = \frac{1}{\rho}$, $\rho = \frac{RS}{l}$, то $\sigma = \frac{l}{RS}$. Тоді вираз (1.5) перетворимо у

вигляд

$$\frac{\alpha^2 T I}{\chi} = 2 \frac{1}{\frac{l}{RS} R} (U_1 - IR), \text{ або } \frac{\alpha^2 \frac{l}{RS} T}{\chi} = 2 \frac{1}{IR} (U_1 - IR).$$

Так як $Z = \frac{\alpha^2 \sigma}{\chi}$, тоді

$$\begin{aligned} ZT &= 2 \frac{1}{IR} (U_1 - IR), \\ ZT &= 2 \left(\frac{U_1}{IR} - 1 \right), \\ ZT &= 2 \left(\frac{U_1}{U_3} - 1 \right). \end{aligned} \tag{1.6}$$

У другому випадку пропускають змінний струм $\left(\tilde{j} = 8 \frac{\text{А}}{\text{см}^2} \right)$ через зразки 1 і 2 до зникнення перепаду температур на них. Відсутність ΔT контролюють за зникненням термо-е.р.с. на зразку 2 за допомогою вольтметра V2.

У стаціонарному стані на холодному контакті виконується умова

теплого балансу $\alpha I T = \frac{1}{2} \tilde{I}^2 (R_1 + R_2) = \tilde{I}^2 R$,

або

$$\alpha = \frac{\tilde{I}^2 R}{I T} = \left(\frac{\tilde{I}}{I} \right)^2 \frac{I R}{T} = \left(\frac{\tilde{I}}{I} \right)^2 \frac{U_3}{T}. \quad (1.7)$$

Коефіцієнт теплопровідності визначають із співвідношення

$$\chi = \frac{\alpha^2 \sigma}{Z}. \quad (1.8)$$

Щоб виконати оцінку похибок вимірювань, необхідно виразити основні термоелектричні параметри через величини, що вимірюються.

Враховуючи, що $\sigma = \frac{1}{R_s}$ та $R = \frac{U_3}{I}$ маємо

$$\sigma = \frac{I}{U_3 S}. \quad (1.9)$$

Із виразів (1.7) і (1.8) можна стверджувати, що похибки обчислення термо-е.р.с. (α) та електропровідності (σ) залежать, в основному, від похибок вимірювальних приладів та похибок вимірювання геометричних розмірів зразків. Вони складають близько 0,5% при вимірюванні напруги, струму чи температури та 1-2% при вимірюванні геометричних розмірів. Це означає, що коефіцієнт термо-е.р.с. (α) та питома електропровідність (σ) можуть бути визначені з точністю 3-4%.

Підставляючи (1.6), (1.7) та (1.9) в (1.8) отримаємо

$$\chi = \frac{\tilde{I}^4 U_3}{I^3 T S} \frac{1}{2 \left(\frac{U_1}{U_3} - 1 \right)}. \quad (1.10)$$

З (1.6) та (1.10) видно, що для оцінки похибки термоелектричної добротності (Z) та теплопровідності (χ) необхідно оцінити точність величини $f = \left(\frac{U_1}{U_3} - 1 \right)$.

Аналіз показує, що

$$\frac{\Delta f}{f} \leq 2 \frac{\Delta U_3}{\alpha \Delta T}. \quad (1.11)$$

Оцінимо величину ΔT із рівняння теплового балансу (11). Врахуємо, що середнє значення коефіцієнта термо-е.р.с. для термоелектричних напівпровідників порядку (200–400) мкВ/К, середнє значення теплопровідності – $0,02 \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}$, геометричні розміри вимірювальних зразків, як правило, складають $l \approx 1 \text{ см}$, $S \approx 0,2 \text{ см}^2$, а струм $I \approx 0,1 \text{ А}$. Тоді, за $T = 77 \text{ К}$ маємо $\Delta T \approx 0,2 \text{ К}$, а за $T = 900 \text{ К}$ – $\Delta T \approx 2,5 \text{ К}$.

Підставивши отримані дані для ΔT і похибку вимірювання $\Delta U_3 \approx 1 \text{ мкВ}$ в (1.11) маємо, що $\frac{\Delta f}{f} \approx (0,5 \div 5)\%$.

Із врахуванням (1.6) і (1.10) це означає, що термоелектрична добротність (Z) може бути визначена з точністю до 5,5 %, а теплопровідність (χ) – до 12,5%.

1.2.6. Метод з радіаційним екраном

Одним із простих є абсолютний метод, при якому втрати тепла за рахунок випромінювання знижуються шляхом використання радіаційних екранів, а частина вираховується. Схема здійснення цього методу зрозуміла із рис.11. Зразок 1 із нагрівачем 2 закріплюються на основі приладу 3, що є холодильником. Над зразком і нагрівачем розташовується екран 4, по всій поверхні якого температура стала. Підрахунок втрат на випромінювання проводиться відносно цієї температури.

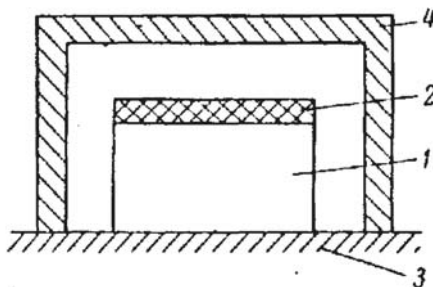


Рис.11. Схема установки з радіаційним екраном

При використанні радіаційних екранів оптимальним є таке їхнє розташування, коли щілина між випромінюючими поверхнями і екранами мала у порівнянні з геометричними розмірами зразка і нагрівача. Екрани повинні бути виготовлені із матеріалів, що добре відбивають. Проте уздовж щілини, утвореної бічною поверхнею зразка, на якій є градієнт температури, і екраном з'являється потік енергії випромінювання паралельно зразку. Оцінка його для реального випадку свідчить, що при температурі приблизно 1000 К він може досягати 30-50 % від теплового потоку через зразок.

Якщо врахувати, що з 1 см^2 поверхні з коефіцієнтом випромінювання 0,5 від абсолютно чорного тіла втрачається майже $6 \cdot 10^{-3} \text{ кал/с}$ при перепаді в 1 К (при $T=1000^\circ\text{K}$), стає зрозумілим, з якою обережністю слід використовувати такі методи в області високих температур. Велика складність цього методу полягає в тому, що для більшості матеріалів невідомі інтегральні коефіцієнти випромінювання.

1.2.7. Метод радіального теплового потоку

До числа абсолютних відноситься і метод радіального теплового потоку. З усіх стаціонарних методів вимірювання теплопровідності при високих температурах радіальний метод є, в принципі, найнадійнішим через відсутність в ньому втрат тепла. Ефективний тепловий потік визначається в цьому методі простіше (рис.12) [16]. Уздовж осі циліндри-

чного зразка поміщається нагрівач, що створює градієнт температури в радіальному напрямку. Останній вимірюється двома термопарами, розташованими вздовж радіуса. Теплопровідність обчислюється за такою формулою:

$$\chi = q \cdot \ln(r_1/r_2) / 2\pi(T_1 - T_2) \quad (1.12)$$

де q – електрична потужність на одиницю довжини нагрівача; r – відстань від центру зразка до термопар; T – температура в цій точці.

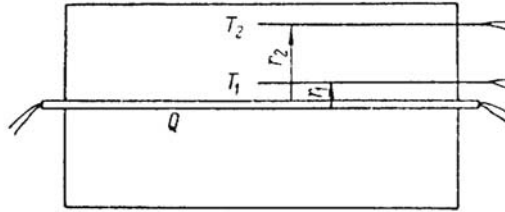


Рис.12. Схема установки з використанням радіального теплового потоку
 Q – нагрівач; T_1 і T_2 – термопари

Для того, щоб збурення температурного поля, внесеного кінцями зразка, не перевищували 2-3%, необхідно, щоб відношення довжини зразка L , до діаметра d рівнялося $L/d \approx 4$. Цю жорстку умову можна поліпшити шляхом використання розрізних зразків (рис.13). Таким шляхом створюється значний тепловий опір у поздовжньому напрямку і поліпшується розподіл температури в центральній частині 2. Допоміжні циліндри 1, 3 можна виготовляти і з іншого матеріалу із близьким значенням величини теплопровідності і температурного її ходу. Проте необхідні розміри зразків залишаються достатньо великими. Це пов'язано з тим, що вздовж радіуса необхідно розмістити дві термопари, на відстані 5-6 мм одна від одної. Отже зробити зразок діаметром менше 2 см складно.

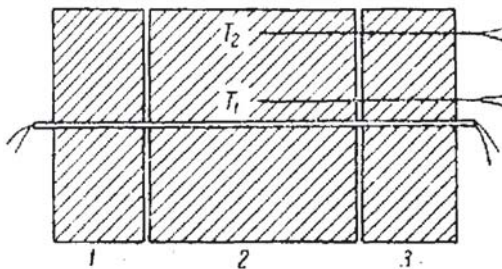


Рис.13. Схема установки з використанням радіального теплового потоку зі складеним зразком

Основна похибка в абсолютній величині теплопровідності виникає внаслідок неточності вимірювання відстані від осі зразка до термопар. Вона може легко досягати великих значень – 10-20%. Таким чином, абсолютна величина одержуваних значень теплопровідності повинна контролюватися іншим методом.

У випадку використання тільки двох термопар можуть виникнути помилки і у температурному ході χ з двох причин:

1. Зміна контакту нагрівача зі зразком і пов'язане з цим збурення симетрії температурного поля. Це призводить до зміни розмірів розрахункового теплового потоку.

2. Невеличкі зміни в розміщенні внутрішньої термопари помітно спотворюють вимірювану температуру. Це пов'язано зі значним градієнтом температури на довжині, яка рівна розміру спаю термопари.

Таким чином, задача кріплення термопар і нагрівача в даному методі має свої практичні складності. Зразок із нагрівачем і термопарами є основною частиною вимірювальної схеми (установки), яку треба монтувати для проведення кожного нового вимірювання. Цей істотний недолік радіального методу усувається, якщо використовувати зразок, розрізаний по осі циліндра на дві половини. У цьому випадку установка нагрівача і термопар значно спрощується і вони можуть бути використані для вимірювання декількох зразків [17].

При вимірюваннях радіальним методом термопари розташовуються перпендикулярно градієнту температури, що забезпечує правильність їхніх показів. Це є одна із переваг радіального методу поряд із можливістю створення таких умов, при яких випромінювання з поверхні нагрівача мале. Це необхідно при вимірюванні теплопровідності речовин, прозорих в інфрачервоній області спектра. При високій температурі потік електромагнітного випромінювання крізь такі зразки може зрівнятися з потоком енергії, що виникає за рахунок теплопровідності ґратки, і навіть перевищити його. Мала поверхня нагрівача дає можливість усунути цей додатковий механізм теплопровідності.

Безсумнівно, що при температурах, що перевищують 1000-1200°K, радіальний метод є в тих або інших модифікаціях основним.

Вимірювання температур при цьому проводиться високотемпературними термопарами або оптичними пірометрами.

1.3. Метод Кольрауша

Більшість теплових втрат при абсолютному методі вимірювання теплопровідності відбувається безпосередньо в нагрівнику. Тому Кольрауш [18] запропонував метод, який може бути застосований до провідників електричного струму, коли джерелом тепла є електричний струм, що протікає через зразок. Цей метод, який був поліпшений Єгером і Діксельхорстом [19], застосував також до напівпровідників Біркхольц [20].

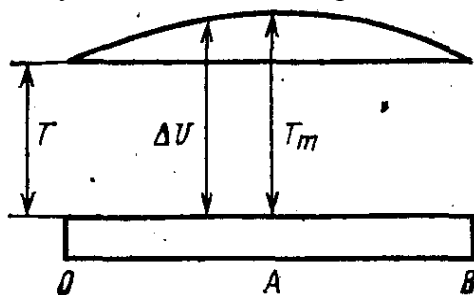


Рис. 14. Схема методу Кольрауша [18]

Теорія методу полягає в наступному. Розглянемо зразок у вигляді циліндричного стержня (рис.14) довжиною $2L$ і перетином $s_{зр} = \pi R_{зр}$. Зразок закріплений у торцях між двома шайбами, що є одночасно струмопровідниками, і розташований всередині циліндричної печі, внутрішні стінки якої радіусом $R_{п}$ мають постійну температуру $T_{п}$. Для виключення можливості тепловідведення конвекцією і випромінюванням простір між зразком і пічкою заповнено теплоізоляцією з коефіцієнтом теплопровідності $\chi_{із}$. В одній з конструкцій використовувався для теплоізоляції вакуум, але в цьому випадку за наявності теплових втрат випромінюванням не існує точного розв'язку рівняння теплопровідності, і отримані значення були досить достовірні (похибка не перевищувала 10 %) тільки до температур близько 400°C .

Температура кінців зразка, через який тече струм, підтримуються на рівні заданої. При цьому температура середньої частини зразка підвищується до тих пір, поки швидкість нагрівання за рахунок електричного струму не зрівняється із швидкістю передачі тепла до кінців зразка. Величина підвищення температури при даному градієнті потенціалу уздовж зразка залежить від його електричних і теплових властивостей. Чим вище електропровідність, тим більше електричний струм, а, отже, тим більше зростає температура. З іншого боку, висока теплопровідність прагне зменшити підвищення температури. Температури T_1 , і T_2 в будь-яких двох точках зразка пов'язані з різницею потенціалів ($V_2 - V_1$) рівнянням

$$\int_{T_1}^{T_2} \frac{\chi}{\sigma} dT + \frac{1}{2}(V_2 - V_1)^2 + A(V_2 - V_1) + B = 0, \quad (1.13)$$

де σ – електропровідність, а A і B – дві сталі інтегрування. Тут є три невідомих, так що необхідно провести вимірювання в трьох різних точках. Зазвичай одна з цих точок береться посередині зразка, а дві інші – на рівних відстанях по обидва боки від неї. Зважаючи на симетрію всієї системи, температури T_1 і T_3 в двох останніх точках повинні бути рівні. Можна показати, що

$$\int_{T_1}^{T_2} \frac{\chi}{\sigma} dT = \frac{1}{8}(V_3 - V_1)^2. \quad (1.14)$$

Досліджуючи телурид вісмуту, Біркгольд виявив, що в цьому випадку положення ускладнювалося внутрішнім ефектом Пельтьє, викликаним недостатньою однорідністю зразка, а також втратами на випромінювання. Термоелектричні ефекти виключалися зміною напрямку струму або використанням змінного струму. Для визначення втрат на випромінювання кінці зразка нагрівалися, а весь прилад зовні підтримувався при кімнатній температурі. В результаті втрат на випромінювання з поверхні центр зразка мав більш низьку температуру, ніж його кінці; за розподілом температури в цьому випадку обчислювалася випромінювальна здатність речовини.

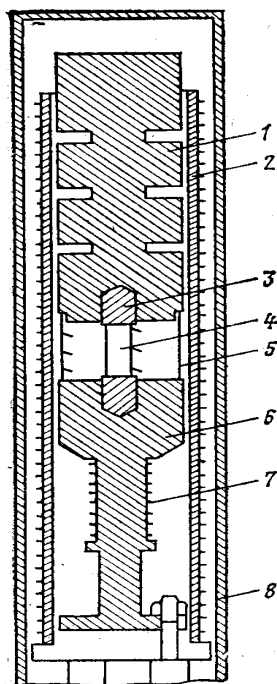


Рис.15. Установка для вимірювання теплопровідності методом Кольрауша [20]

Схема найбільш простої і прийнятної конструкції установки для визначення теплопровідності методом Кольрауша подана на рис.15. Досліджуваний зразок 4 закріплюється між двома струмопровідними мідними шайбами 3, у які впресовані вставки 6 з нержавіючої сталі. Зроблено це для миттєвого тепловідведення, що забезпечується використанням міді, і запобіганням від хімічної взаємодії з нею матеріалу при високих температурах. Шайба 6 обладнана електронагрівачем 7 для вирівнювання температур торців зразка і створення перепаду температур при зміні термо-е.р.с., а вся установка оточена загальною фоновною піччю 7. Для зручності розміщення теплоізоляції зразок поміщений в охоронне кільце 5. Весь прилад встановлюється в герметичному корпусі 1, що дозволяє йому відкачувати і проводити вимірювання середовища інертного газу. Важливою є можливість ліквідації асиметрії вимірювального пристрою, що досягається підбором глибини виточок на верхній шайбі під час попередніх вимірювань.

У зразку за допомогою штифтів встановлювалися три вимірювальні термопари і симетрично їм – три термопари на охоронному кільці. Установка дозволяє проводити одночасні вимірювання термо-е.р.с., електропровідності і теплопровідності.

Електрична і вимірювальна схеми установок, що працюють за методом Кольрауша, досить прості. Похибка вимірювання методом Кольрауша є найменшою і може бути доведена до 3-5% при високих температурах. Діапазон температур при вимірюваннях цим методом становить 0-1000°C. Недоліком методу Кольрауша є наявність теплоізолятора між зразком і екранним нагрівачем, який в умовах тривалої дії опромі-

нення і високих температур може неконтрольовано чином змінювати свої властивості. Крім того, метод Кольрауша накладає ряд важко виконуваних обмежень на геометрію зразка і теплопровідність матеріалу теплоізоляції.

Необхідно відзначити, що точність одержуваних результатів значною мірою залежить від точності вимірювання температури, абсолютна похибка яких не повинна перевищувати $0,2^\circ\text{K}$. Тому експеримент варто проводити за якомога більшої різниці температур екрана і зразка, що може бути досягнуто за рахунок оптимального вибору діаметра екрана і параметрів газу, який заповнює установку.

1.4. Метод динамічного калориметра

Теплова схема калориметра показана на рис.16 [21].

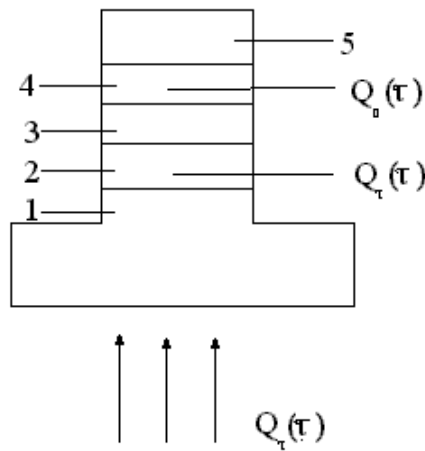


Рис.16. Теплова схема динамічного калориметра [21]

Досліджуваний зразок 4, контактна пластина 3 і стержень 5 монотонно розігріваються тепловим потоком $Q(\tau)$, що поступає від основи 1. Тепловий потік $Q_T(\tau)$, що проходить через середній переріз пластини 2, частково поглинається нею і йде далі на розігрів пластини 3, зразка 4 і стержня 5.

Для будь-якого рівня справедливі формули:

$$Q_0(\tau) = V_0 S / P = (0,5C_0 + C_c) b, \quad (1.15)$$

де $Q_0(\tau)$ – тепловий потік, що проходить через зразок і поглинається стержнем, Вт; V_0 – перепад температури на зразку, К; P – тепловий опір між стержнем і контактною пластиною, $\text{m}^2 \cdot \text{K} / \text{Вт}$; C_0 – повна теплоємність зразка, Дж/К; C_c – повна теплоємність стержня, Дж/К; b – швидкість розігріву вимірювальної комірки, К/с; S – площа поперечного перерізу зразка, m^2 .

$$Q_T(\tau) = K_T V_T = (0,5C_T + C_n + C_0 + C_c) b, \quad (1.16)$$

де $Q_T(\tau)$ – тепловий потік, що проходить через середній переріз пластини 2, Вт; K_T – коефіцієнт пропорційності, що характеризує ефективну теплову провідність пластини 2, Вт/К; V_T – перепад температури на пластині 2, К; C_T – повна теплоємність пластини 2, Дж/К; C_n – повна те-

плоємність контактної пластини 3, Дж/К.

Тепловий опір між стержнем і контактною пластинною визначається за формулою:

$$P=P_0+P_k, \quad (1.17)$$

де P_0 – тепловий опір зразка, $m^2 \cdot K/Вт$; P_k – поправка, що враховує тепловий опір контакту, $m^2 \cdot K/Вт$.

Тепловий опір визначається за формулою:

$$P_0=h/\chi, \quad (1.18)$$

де h – висота зразка, м; χ – теплопровідність зразка, Вт/м·К.

На основі формул (5)-(8) одержані робочі розрахункові формули для теплового опору зразка і його теплопровідності:

$$P_0=(V_0S(1+\delta_c)/V_TK_T)-P_0, \quad (1.19)$$

де δ_c – поправка, що враховує теплоємність зразка.

$$\delta_c=C_0(C_0+C_c)/2, \quad (1.20)$$

де C_0 – повна теплоємність досліджуваного зразка, Дж/К; C_c – повна теплоємність стержня, Дж/К.

$$C_0=c_0(T)m_0, \quad (1.21)$$

де $c_0(T)$ – орієнтовне значення питомої теплоємності зразка, Дж/кг·К, m_0 – маса зразка, кг.

$$C_c=c_m(T) m_c, \quad (1.22)$$

де $c_m(T)$ – питома теплоємність міді, Дж/кг·К; m_c – маса стержня, кг; K_T – теплова провідність пластин тепломіра, Вт/К.

Значення теплопровідності зразка визначається за формулою:

$$\chi=h/P_0. \quad (1.23)$$

Цей метод відноситься до стаціонарних порівняльних методів вимірювання теплопровідності. Точність вимірювання складає десь близько $\pm 10\%$.

II. Динамічні та періодичні методи

Динамічні або нестационарні методи визначення теплопровідності, як правило, дозволяють безпосередньо виміряти температуропровідність, а шукана величина обчислюється з врахуванням відомої теплоємності і густини. Викликає інтерес нестационарний метод, який дозволяє безпосередньо визначити теплопровідність і широко застосовується з цією метою для кімнатних і низьких температур в різних модифікацій. Він відомий як метод А.В. і А.Ф. Іоффе [22].

2.1. Метод А.В. і А.Ф. Іоффе

А.В. Іоффе і А.Ф. Іоффе [23, 24] розуміли, що вимірювання теплоємності в умовах рівноваги більш точні, ніж вимірювання в нерівноважному стані, проте вони вирішили застосувати останній із вказаних метод, оскільки при цьому істотно зменшувався час, необхідний для проведення необхідної кількості вимірювань. Були вжиті заходи для виключення або зменшення звичайних джерел похибок. Автори стверджують, що отримані на їх приладі дані вірні з точністю 3-5%. Цей метод швидше підходить для поганих, ніж для добрих провідників тепла. Схема приладу була показана на рис.17. Досліджуваний зразок 3 був блоком з плоскопаралельними поверхнями. Він затискався між двома

мідними блоками 2 і 5 за допомогою вертикального гвинта 1. Гвинт закріплювався в кришці приладу, яка була ізольована від нижнього блоку метилметакрилатовими стінками 6. Мідно-константанові термопари 7 вводилися в мідні блоки 2 і 5 поблизу зразка 3. Тонка пластинка слюди 4 була розташована між зразком 3 і нижнім блоком 5 для електроізоляції. Термопари могли з'єднуватися диференціальним способом для вимірювання різниці температур.

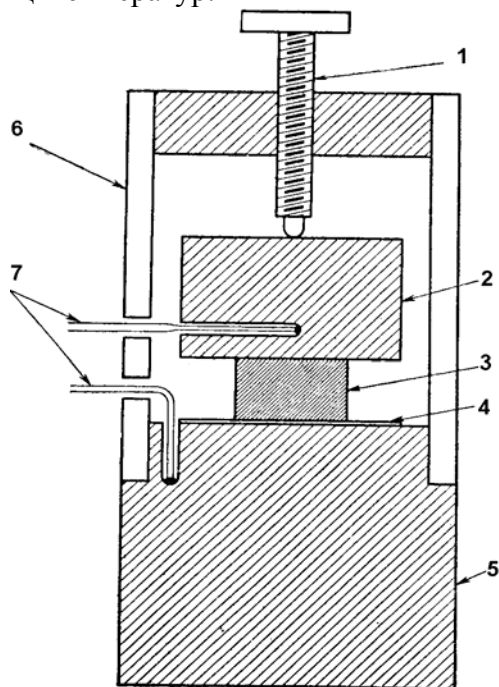


Рис.17. Прилад А.В. Іоффе і А.Ф. Іоффе для вимірювання теплопровідності динамічним методом [23]

Спочатку у всіх точках приладу підтримувалася одна і та ж температура. Потім нижній блок занурювався в охолоджуючу ванну, і різниця температур між блоками та абсолютна температура одного з них безперервно реєструвалися. Швидкість, з якою тепло відбиралося від верхнього блоку з теплоємністю C_2 і температурою T_2 , дорівнювала $C_2 dT_2/dt$, де t – час. В ідеальному випадку ця величина повинна бути рівною $\chi(T_2 - T_1)A/l$ для зразка з теплопровідністю χ , площею поперечного перетину A і завдовжки l ; T_1 – температура нижнього блоку. Таким чином, у можна визначити χ .

Проте деяка частина тепла, яка потрапляє до нижнього блоку, виходить з самого зразка, а не з верхнього блоку. Відповідна поправка була введена додаванням до C_2 частини теплоємності C_S зразка. Це означає, що повинна бути відомою питома теплоємність напівпровідника, проте на практиці C_2 набагато більше C_S , так що останню величину необов'язково визначати з великою точністю.

Потрібно ввести також поправку на перехід тепла від верхнього блоку до стінок приладу. Оскільки прилад знаходився не у вакуумі, то на ньому могла конденсуватися водяна пара з повітря, проте автори до-

вели, що цей ефект дуже малий. На інші побічні процеси передачі тепла необхідно вводити поправку в декілька відсотків, яка визначається вимірюванням різниці температур між блоками, коли вже була досягнута рівновага. При цьому тепло, проходячи через зразок, рівно теплу, яке передається верхньому блоку від стінок. Бічні втрати тепла могли б бути зменшені відкачуванням приладу і підтримкою навколишнього середовища при температурі, яка не надто відрізняється від температури холодної ванни.

Перенесення тепла між двома мідними блоками шляхом конвекції було понижено максимальним зменшенням об'єму повітря всередині приладу. Величина конвекції принаймні зменшувалася, оскільки нижній блок був холоднішим. Тепло, яке проходить через оточуючий зразок повітря, визначалося заміною зразка паперовим блоком з дуже низькою відомою теплопровідністю.

Важливо було добитися, щоб різниця температур між термopарами дійсно відповідала різниці температур між кінцями зразка. Іншими словами, теплові опори на контактах повинні бути дуже малі. Автори добилися добрих контактів, заповнюючи зазори між поверхнями галієм, амальгамою, гліцерином або маслом. Необхідно також внести невелику поправку на теплоопір ізолюючої слюдяної пластинки. Були вжиті заходів, щоб між поверхнями мідних блоків і термopарами не було помітних теплових градієнтів.

Пізніше прилад, створений А.В. Іоффе і А.Ф. Іоффе, був вдосконалений для більш точного вимірювання теплопровідності напівпровідників при кімнатній температурі [24]. В новому приладі бічні стінки були виконані у вигляді мідного циліндру, в якому температура підтримується такою ж як і у верхньому блоці. У такий спосіб усувалися бічні втрати тепла.

Теорія методу А.В. Іоффе і А.Ф. Іоффе була розвинута Кагановим [25] і Сванном [26]. Особливістю цієї теорії є обмежений інтервал часу, протягом якого можна проводити вимірювання і достатньо точні результати. Швидкість зміни температури з часом не слід вимірювати відразу після того, як нижній блок поміщається в охолоджуючу ванну. Не варто продовжувати вимірювань і тоді, коли температури обох блоків стають майже однаковими. В роботі Каганова цьому питанню надається особлива увага.

Повне рівняння, яке можна застосовувати в обмежений проміжок часу, має вигляд

$$\frac{dT_2}{dt} = \frac{(T_2 - T_1)\chi}{(C_2 + C_s/3)}(1 + a' - a'') \quad (2.1)$$

де a' і a'' – малі поправки, залежні відповідно від теплопровідності навколишнього повітря і теплоопору контактів.

2.2. Зондові методи

Зондові методи базуються на розгляді поширення теплоти в досліджуваному зразку, який має вигляд необмеженого середовища, температурне поле якої прийнято рівномірним [27-29]. Всередину зразка вво-

диться джерело тепла – зонд у вигляді пластини, кулі або циліндра, який поділяє все тіло на два напівпростори. При цьому обов'язково повинна виконуватися умова, згідно якої зонд має малий визначальний розмір (товщину або радіус) в порівнянні з розміром вимірювального зразка. В процесі експерименту проводиться вимірювання температури в деякій точці, віддаленій від зонда на фіксовану відстань. При цих умовах маємо

$$T(x\tau) - T_{\text{поч}} = \frac{Q_0}{2\sqrt{\pi a_T \tau}} \exp\left(-\frac{x^2}{4a_T \tau}\right), \quad (2.2)$$

де a_T – температуропровідність зразка; $T_{\text{поч}}$ – температура зразка до початку досліду; Q_0 – тепловий імпульс від зонда; x – відстань між зондом і вимірювачем температури.

Температура в точці x змінюється за таким законом: після миттєвої подачі теплового імпульсу вона поступово збільшується, досягаючи максимуму в момент часу $\tau_{\text{макс}}$, а потім поступово знижується, знову наближаючись до $T_{\text{поч}}$. Якщо диференціювати рівняння (15) за часом і прирівняти його до нуля, то умови оптимуму будуть виражені так:

$$\text{для пластинчастого зонда } a_T = \frac{x^2}{2\tau_{\text{макс}}};$$

$$\text{для циліндричного зонда } a_T = \frac{R^2}{4\tau_{\text{макс}}};$$

$$\text{для кульового зонда } a_T = \frac{R^2}{6\tau_{\text{макс}}}.$$

Як видно, характерним для цього методу є точна фіксація часу, що відповідає максимальній температурі, а не визначення її абсолютного значення. Основними труднощами застосування методу і, відповідно, основними джерелами похибок вимірювань є необхідність створення рівномірного температурного поля, який, зазвичай легше всього досягається використанням зразків великих розмірів, точний час відліку подачі теплового імпульсу, для чого цей процес повинний бути теоретично миттєвим, і точне визначення $\tau_{\text{макс}}$, що особливо складно в зразках з розмитим максимумом.

В основі зондового методу визначення температуропровідності лежить вимірювання швидкості нагрівання зразка з малою теплоємністю (для більш чітко вираженого максимуму температури при $\tau_{\text{макс}}$). Вимірювання швидкості нагрівання проводиться за допомогою диференціюючого трансформатора. Припустивши відсутність теплових втрат від зразка і сталості його контакту з джерелом тепла, температуропровідність напівпровідника визначається з виразу $a_T = \frac{0,165L^2}{\tau_{\text{макс}}}$, де L – довжина зразка.

Метод застосовувався як відносний через наявності цілого ряду поправок, які в умовах експерименту важко усунути [30].

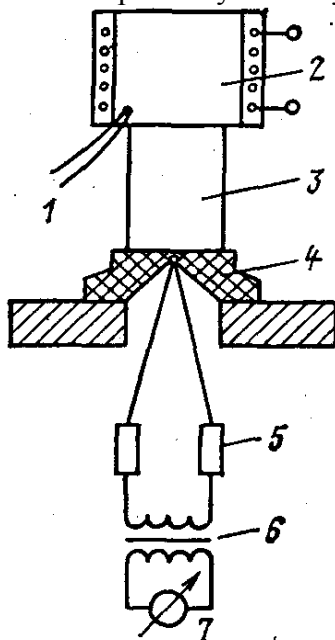


Рис.18. Схема вимірювання температуропровідності динамічним методом [27]

Принципова схема установки зображена на рис.18. Зразок 3 встановлюється на тонкій ебонітовій або плексигласовій підставці 4 зі впаяною у неї термопарою, спай якої пришліфований разом з поверхнею цієї підставки. Холодні кінці термопари для підтримки сталості температури підключаються до масивних мідних циліндрів 5. Термопара включається в первинну обмотку диференціюючого трансформатора 6, у вторинну обмотку якого включений гальванометр 7. Холодильники у вигляді масивних мідних стаканів з водою і термометрами служать для швидкого приведення зразка і підставки у вихідне положення з постійною температурою. Нагрівачем є мідний циліндр 2 з термопарою 1, яка фіксує його температуру. Для зменшення контактного теплового опору торці зразка змочуються гліцерином або маслом.

Основні похибки вимірювання виникають через теплові втрати, інерційність гальванометра і можливу нелінійність диференціюючого трансформатора. Тарувальні вимірювання показали, що установку можна використовувати в інтервалі вимірювальних температур від 0 до 60°C для зразків, виготовлених у формі циліндра діаметром від 8 до 14 мм.

У виготовленому приладі вимірювачем температури служить термопара залізо-константан з діаметром віток 0,1 мм; нагрівач виготовлений у вигляді мідного циліндра діаметром 50 і висотою 130 з обмоткою, з'єднаною з автотрансформатором. Термопара включається в ланцюг первинної обмотки диференціюючого трансформатора. Останній краще виготовляти із осердям з Ш-подібного пермалою. При цьому бажано екранувати прилад від наводок. У вторинну обмотку трансформатора може бути включений дзеркальний гальванометр типу М-21 або М-195.

Вимірювання можуть проводитись на зразках малих розмірів, що дуже зручно при дослідженні напівпровідників.

Відомі і інші модифікації зондового методу для визначення температуропровідності, зокрема метод Гріна і Коулса. Грін і Коулс [31] виявили, що в джерелі тепла зручніше використовувати ефект Пельтьє, а не ефект Джоуля. У їх приладі струм через термопару великого поперечного перерізу (що складається з телуриду вісмуту р- і n-типу) періодично змінював свій напрям, тож спай, що контактував з одним кінцем зразка, то нагрівався, то охолоджувався. Ефектом Джоуля не можна повністю знехтувати, проте, пропускаючи в охолоджуючу частину циклу дещо більший струм, можна добитися того, щоб середня передача тепла у зразку була рівна нулю. При цьому середня температура залишається постійною. Інша перевага використання ефекту Пельтьє для створення температурних хвиль полягає в тому, що вхідна хвиля є майже симетричною. Внаслідок цього парні гармоніки, зокрема друга, стають дуже малими, що сприяє створенню помітної синусоїдальної температурної хвилі неподалік джерела.

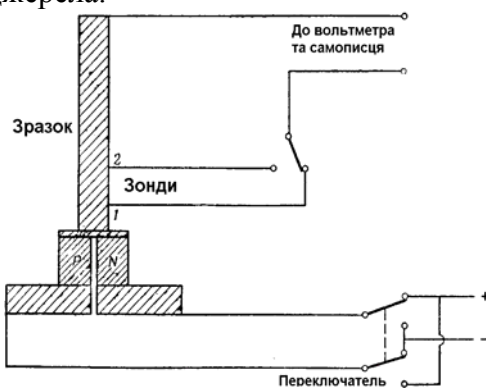


Рис.19. Прилад Гріна і Коулса для вимірювання коефіцієнта теплової дифузії [31]

Схема приладу Гріна і Коулса була показана на рис.19. Новим тут є використання термоелектричного ефекту самого зразка для вимірювання різниці температур. Зонди з хромелевого дроту діаметром 0,05 мм були припаяні до зразка в точках 1 і 2 і на другому його кінці, де зберігалася постійна температура. Термоелектрична напруга між кожним з нижніх зондів і верхнім кінцем зразка служила відносною мірою різниці температур. Оскільки зразок був напівпровідником, то його термо-е.р.с. була істотно більшою термо-е.р.с. будь-якого металу, що застосовується в термопарах. Отже, використання зразка як термометра підвищує чутливість методу.

Грін і Коулс проводили вимірювання на телуриді вісмуту, коефіцієнт теплової дифузії якого при кімнатній температурі рівний приблизно $0,014 \text{ см}^2/\text{с}$. Вони використовували період 30 сек і знайшли, що температурна хвиля була істотно синусоїдальною вже на відстані приблизно 5 мм від джерела тепла попри те, що останній генерував пилкоподібну хвилю. Відстань між зондами 1 і 2 була рівною 8 мм. При цьому відношення амплітуд було близько 9:1, а різниця фаз складала більше 2 рад.

2.3. Метод Ангстрема

Ангстрем [32] розвинув метод, в якому шляхом додавання до одного кінця зразка періодичного джерела тепла визначався коефіцієнт теплової дифузії k_d . Коефіцієнт k_d рівний $\chi\rho C$, де ρ – густина, а C – питома теплоємність. Отже, вимірюючи коефіцієнт теплової дифузії, можна визначити теплопровідність, якщо відома густина і питома теплоємність (див. також [33]).

Припустимо, що на одному кінці дуже довгого бруска температура змінюється за синусоїдальним законом з періодом $(2\pi/\omega)$. Температурні хвилі, що виходять з цього кінця, ослаблюються у міру їх просування уздовж бруска. Вважатимемо, що відношення амплітуд хвилі у двох точках, розділених між собою відстанню l , рівно α ($\alpha > 1$). Оскільки хвиля рухається з кінцевою швидкістю, то між цими двома точками існує різниця фаз β ($\beta > 0$). Якщо немає втрат тепла через бічну поверхню зразка, то коефіцієнт теплової дифузії може бути визначений за величиною α або β

$$k_d = \frac{\omega l^2}{2 \ln^2 \alpha} = \frac{\omega l^2}{2\beta^2}. \quad (2.3)$$

Проте в більш загальному випадку, коли є, наприклад, випромінювання з поверхні, k_d вже не може бути виражений тільки через α або β , але можна показати, що

$$k_d = \frac{\omega l^2}{2\beta \ln \alpha}. \quad (2.4)$$

Таким чином, вимірюючи обидві величини α і β , можна визначити коефіцієнт теплової дифузії, навіть якщо є істотні втрати тепла через бічну поверхню. Звідси випливає, що цей метод може бути особливо корисний при температурах вище кімнатної, коли ефект випромінювання стає найістотнішим. Метод має ту перевагу, що він не вимагає ідеального теплового контакту між джерелом тепла і зразком.

На практиці важко створити джерело з синусоїдальною зміною температури. Проте навіть при прямокутній формі початкової хвилі до зміни температури в даній точці можна застосувати Фур'є-аналіз і виділити основну частоту. В усякому разі більш високі гармоніки дуже швидко затухають.

Ніі [34, 35] виміряв коефіцієнт теплової дифузії телуриду свинцю і телуриду вісмуту, використовуючи прилад, зображений на рис.20. Нижній кінець зразка припаювався до мідного штирка, обвитого дротом нагрівача. Струм через нагрівач то вмикався, то вимикався, причому тривалість кожного стану була однаковою. Температура в точках 1 і 2 безперервно реєструвалася. Зразок був достатньо довгий, так що кінець, віддалений від джерела тепла, мав весь час постійну температуру.

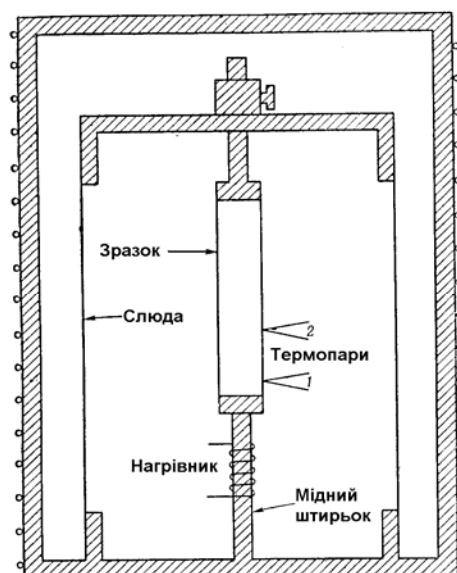


Рис.20. Прилад Ніі [34] для вимірювання теплової дифузії за методом Ангстрема

2.4. Метод Хармана

Інтерес, що проявляється до вимірювань теплопровідності, був викликаний необхідністю знати цю величину для тих напівпровідників, які застосовуються в термоелектричних холодильниках і генераторах [36]. Дуже зручна експериментальна установка для цих речовин була створена Харманом [37]. Він довів, що не тільки теплопровідність, але і термо-е.р.с. і електроопір можуть бути виміряні в одному приладі.

В методі Хармана градієнт температури вздовж зразка створюється за допомогою ефекту Пельтьє. Коли струм тече через зразок, затиснений між металевими контактами, один його кінець нагрівається, а інший охолоджується. Якщо струм достатньо малий, то джоулівським теплом можна нехтувати; Пельтьє тепло, що виділяється або поглинається в ефекті, залежить від першого ступеня струму, тоді як джоулівське тепло залежить від квадрату струму. Щоб можна було отримати достатню різницю температур між кінцями зразка, необхідно, щоб він мав достатню високий параметр ефективності Z , який звичайно визначається як $\alpha^2 \sigma / \chi$, де α – термо-е.р.с., а σ – електропровідність.

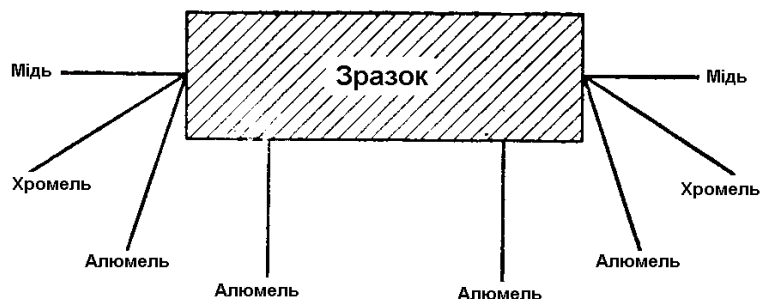


Рис.21. Схема вимірювання теплопровідності термоелектричних матеріалів за методом Хармана [37]

В реальному приладі мідні струмові виведення і хромель-алюмелеві термопари припаювалися до кінців прямокутного зразка, як показано на рис.21. Пара алюмелевих зондів під'єднувалася до поверхні зразка точковою зваркою.

Насамперед через зразок пропускався певний змінний струм і вимірювалася різниця потенціалів між алюмелевими зондами і між алюмелевими дротинами термопар. Ці вимірювання дозволяли визначити електроопір між зондами і між контактами (включаючи опір контактів). Використовування змінного струму виключало можливість створення градієнта температури внаслідок ефекту Пельтьє.

Потім через зразок пропускався постійний струм i , після встановлення рівноваги, вимірювалася різниця температур між його кінцями. Ефект Пельтьє створює тепло із швидкістю πI , де π – коефіцієнт Пельтьє, а I – сила струму. Це тепло переноситься зі швидкістю $\chi(\Delta T)A/l$, де ΔT – різниця температури між кінцями зразка, A – площа поперечного перерізу, а l – довжина зразка. Згідно з першим законом термоелектрики Кельвіна, $\pi = \alpha T$, де α – термо-е.р.с., так що

$$I\alpha T = \frac{\chi \Delta T A}{l} \quad (2.5)$$

Термо-е.р.с. визначалася вимірюванням різниці потенціалів між кінцями зразка після встановлення постійної різниці температур ΔT . Віднімаючи від цієї величини різницю потенціалів, що виникає внаслідок електроопору зразка, ми одержуємо термоелектричну напругу $\alpha \Delta T$. Слід помітити, що ця процедура дає термо-е.р.с. відносно алюмелю. Щоб отримати величину α , яка підставляється в рівняння (2.5), потрібно ще додати термо-е.р.с. алюмелю відносно міді.

Теплопровідність, виміряна цим методом, узгоджується з результатами, отриманими іншими методами, якщо було вжито відповідних заходів обережності. Зразок повинен поміщатися у з відкачаним повітрям для запобігання теплових втрат шляхом конвекції і провідності повітря. Крім того, струмові виведення повинні бути достатньо тонкими, щоб через них не було помітного тепловідводу. Було знайдено, що для зразка телуриду вісмуту завдовжки 2 см і площею поперечного перерізу від 0,1 до 0,2 см² щонайбільше застосовний струм від 20 до 40 мА.

Згодом Харман із співробітниками [38] розширила теорію цього методу з урахуванням теплових втрат шляхом випромінювання з поверхні зразка і з кінцевих контактів. При цьому рівняння (2.5) включає ще декількох додаткових членів: з'являються ще дві невідомі величини – теплопровідність виведень і потужність випромінювання з поверхні. Ці величини можуть бути визначені, якщо використовувати зразки різної довжини і площі поперечного перерізу.

2.5. Методи регулярного режиму

На даний час існує добре розроблена теорія регулярного режиму і методи вимірювання термофізичних властивостей на її основі. У теорії прийнято поділ на перший, другий і третій методи регулярного режиму, які відрізняються граничними умови, при яких відбувається процес теп-

лообміну. Температуропровідність визначається за першим методом регулярного режиму, що характеризується сталістю температури середовища, в якому розміщений досліджуваний зразок, з нескінченним значенням коефіцієнта тепловіддачі з його поверхні. Відповідно до теорії при цих умовах температуропровідність дорівнює $a_T = k_m m_\infty$, де k_m – коефіцієнт форми [39].

Таким чином, вимірювання температуропровідності зводиться до створення в установці умов першого методу регулярного режиму і визначення темпу охолодження m_∞ . Знак ∞ вказує, що дослід проходить при умові $a_k \rightarrow \infty$. Розглянемо спочатку метод визначення швидкості охолодження $m = \frac{\ln \Delta T_1 - \ln \Delta T_2}{\tau_2 - \tau_1}$, де ΔT_1 і ΔT_2 – різниці температур між досліджуваним зразком і оточуючим його середовищем у моменти часу τ_1 і τ_2 .

Цей вираз, відноситься до ділянки залежності зміни температури від часу, що відповідає настанню регулярного режиму і поданого в координатах $\ln(\Delta T) = f(\tau)$ прямою лінією. До речі, цей факт є дуже важливим, тому що визначає коректність експерименту: якщо зазначена залежність відхиляється від прямої лінії, то його слід вважати неправильним через якусь помилку в його проведенні або через недотримання умови $a_k \rightarrow \infty$. Навпаки, чим більше експериментальних точок добре лягають на пряму охолодження, тим вища точність визначення m_∞ , а, отже, і температуропровідності [40].

Оскільки швидкість охолодження залежить від різниці температур, то найбільш поширеним способом його визначення є вимірювання в часі значення ΔT . Здійснити це можна точніше і зручніше за все диференціальною термопарою, один спай якої вмонтований в досліджуваний зразок, а іншої поміщений в оточуюче його середовище. Вимірювання показів термопари можуть бути проведені гальванометром, потенціометром або осцилографом. Останній у цьому випадку найбільш зручний, тому що дозволяє одержати графічне зображення залежності $\ln(\Delta T) = f(\tau)$. Його використання є єдиним для матеріалів з великою теплопровідністю, тому що темп охолодження при цьому дуже високий і його вимірювання за допомогою гальванометра призводить до серйозних похибок.

2.6. Метод акалориметра

Умови сталості температури середовища і нескінченності коефіцієнта тепловіддачі забезпечуються застосуванням калориметрів, у яких $Bi > 50$. Якщо в калориметрах використовуються вода або органічна рідина, то необхідно здійснювати інтенсивне перемішування. Якщо середовищем для високотемпературних вимірів слугував рідкий метал, то потреба в перемішуванні відпадає. Від перемішування можна відмовитися також у випадку, якщо експеримент проводиться при температурі,

яка є точкою зміни агрегатного стану речовини. Для вимірювання при температурах, нижчих кімнатної, калориметр заповнюється відповідним рідким холодоагентом [41, 42].

Досліджуваний зразок з метою збереження і забезпечення незмінності властивостей у більшості випадків доводиться поміщати в тверду герметичну металеву оболонку. Це дозволяє здійснити вимірювання температуропровідності як порошкоподібних, так і рідких матеріалів. При дослідженні твердих тіл, які не вступають у хімічну взаємодію із середовищем калориметра, оболонка може не застосовуватися. Зразок, досліджуваний даним методом, поміщений в оболонку або без неї, називають акалориметром (і метод часто називається методом акалориметра). Для різних видів зразків заздалегідь визначаються їхній внутрішній об'єм і коефіцієнт форми.

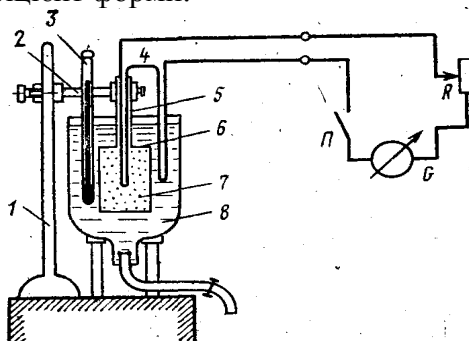


Рис.22. Схема акалориметра [42]

Принципова схема установки для визначення температуропровідності методом акалориметра подана на рис.22. Акалориметр 7 металева посудина, найчастіше циліндричної форми, закритою кришкою 6, до якої приєднана трубка 5, яка служить для введення термопари всередину зразка. Вона ж виконує роль тримача, для чого захоплюється затискачем 2 штатива 1. Місце з'єднання посудини з кришкою повинне бути ретельно герметизоване. В найпростішому випадку калориметр 8 являє собою посудину, наповнену льодом, що тане, температура якого визначається термометром 3. Диференціальна термопара 4 приєднана до гальванометра G через вимикач П і опір R. Відлік часу ведеться хронометром 9. Термопара, наприклад мідь-константанова, припаяна до мідних дротиків. Температура в цих точках для правильних показів термопари повинна бути строго однаковою.

Процес проведення досліду дуже простий і полягає в наступному. Акалориметр попередньо нагрівають до температури, що перевищує температуру середовища термостата. Потім його занурюють у термостат і вимірюють темп охолодження. Характерним для цього методу є необов'язковість рівномірного прогріву акалориметра, тому що регулярний режим не залежить від початкового стану досліджуваної речовини. Коефіцієнт форми шляхом розрахунку і попереднього калібрування акалориметра можна визначити з похибкою до 1%. Похибка вимірювання температуропровідності розглянутим методом теоретично пови-

нна лежати в межах 3-4%. Практично, внаслідок неоднорідності матеріалу і різних похибок експерименту, похибка цього методу при високих температурах досягає 10-15%. Однак і це значення в багатьох випадках є цілком прийнятним з огляду на простоту і незначний час проведення експерименту. В ряді випадків саме ці фактори виявляються вирішальними при виборі методу вимірювань. Розглянемо основні джерела похибок при проведенні експерименту. Однієї з можливих причин одержання помилкових результатів є неправильна закладка спаю термопар в досліджуваний зразок. Якщо спай термопар розміром навіть у десять міліметра буде на співрозмірній відстані від стінок акалориметра, то це викличе зміну температурного поля в місці розміщення термопар в порівнянні з полем всього досліджуваного зразка і призведе до неправильних результатів. Показано, що найбільш вдалим розташуванням термопар слід вважати таке, коли її спай вилучений на 12-15 мм від стінок акалориметра.

Істотною похибкою може викликати відведення теплота через вивідну трубку 5 на рис.22 і провідники термопар. Зменшення цієї похибки досягається великою глибиною занурення акалориметра в термостат: відстань від поверхні термостатної рідини до кришки 6 повинне бути не менше 20 мм. При цьому потрібно по можливості зменшувати діаметр трубки (до декількох міліметрів), робити її стінку якомога тоншою і використовувати метал з поганою теплопровідністю. Під час експерименту необхідно підтримувати температуру середовища термостата незмінною в межах $\pm 0,1^{\circ}\text{C}$. Більша її зміна призведе до похибок.

Зазначений метод дозволяє провести вимірювання широкого класу речовин – від ізоляторів до металів, включаючи практично всі типи напівпровідникових матеріалів. Відмінності спостерігаються тільки в пристроях, що дозволяють з достатньою точністю визначати темп охолодження.

Другий метод регулярного режиму служить для визначення теплопровідності матеріалу після того, як виміряна його температуропровідність. Інші модифікації методу регулярного режиму можуть успішно застосовуватися для вимірювання коефіцієнтів тепловіддачі і теплоємності. В основі визначення вказаних параметрів цими методами лежить попереднє визначення температуропровідності тобто вони не є прямими методами вимірювання.

Коли при використанні зондового методу визначати кількість теплоти, яка виділяється в момент подачі імпульсу, то він може використовуватися для визначення теплопровідності. Проте і тут потрібне попереднє визначення температуропровідності. Для визначення температуропровідності інколи використовується і метод, який базується на періодичному нагріванні досліджуваного зразка, і відноситься до загальної групи методів температурних хвиль. Цей метод менш застосовується порівняно з двома основними, поданими вище. Це пов'язано з великою трудністю його технологічного здійснення і неточністю формул, прийнятих для розрахунку температуропровідності.

III. Методики визначення теплопровідності тонких плівок

Вимірювання теплопровідності тонких плівок важливе як для конструювання елементів мікроелектронних схем, плівкових приймачів випромінювання і т. д., так і для досліджування фізичних особливостей плівкового стану [43]. Ці вимірювання ускладнені тим, що у зв'язку з малою площею поперечного перерізу зразків, температурне поле в них порушене неконтрольованим відводом тепла дротинами термопар або термометрів опорів, які використовуються для вимірювання температури.

3.1. Абсолютний метод визначення теплопровідності тонких плівок

Щоб виключити порушення температурного поля авторами [45] пропонується наступна методика.

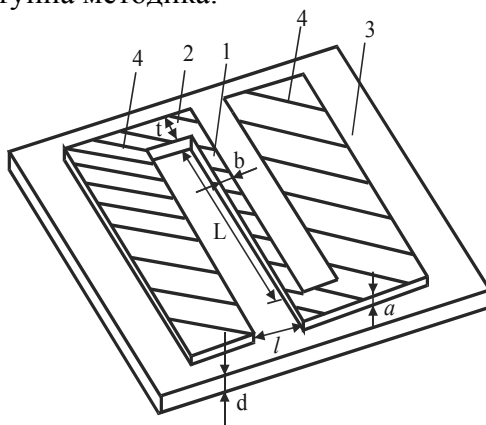


Рис.23. Схема тонкоплівкового зразка для вимірювання теплопровідності: 1 – вузька провідна смужка; 2 – перемичка, 3 – підкладка; 4 – ізотермічні електроди, L – довжина провідної смужки, l – ширина зазору, b – ширина провідної смужки, a – товщина провідного шару, d – товщина підкладки, t – ширина перемички [45]

На вимірюваний зразок, що є непровідною плівкою або вільну поверхню підкладки, наноситься допоміжний шар S -подібної форми металу чи напівпровідника (рис.23). При пропусканні через смужку 1 струму I відбувається її нагрівання, що залежить від підведеної електричної потужності і теплового потоку, який поширюється від смужки 1 до ізотермічних електродів 4. Форма S -подібного шару вибрана такою, що виконуються співвідношення $L \gg l$, $l \gg d$, $t \gg b$.

Використання S -подібної форми допоміжного шару виключає шунтування теплового потоку у вимірюваній плівці цим шаром. Відносно невелика втрата тепла через перемички 2 враховується поправочним членом у формулі для визначення теплопровідності.

Вимірювання проводяться в ізотермічній камері вакуумованого кріостата (рис.24). Тут же проводиться напилення досліджуваних металічних і напівпровідникових плівок у вакуумі 10^{-7} Па.

В якості матеріалу провідного шару використовувалась Pt яка наносилась на підкладку катодним розпиленням при тиску $5 \cdot 10^{-2}$ тор. Для приготування провідного шару може бути застосований і другий мате-

ріал (Ni, Fe і т.д.) з достатньо великим температурним коефіцієнтом опору чи друга методика одержання плівок.

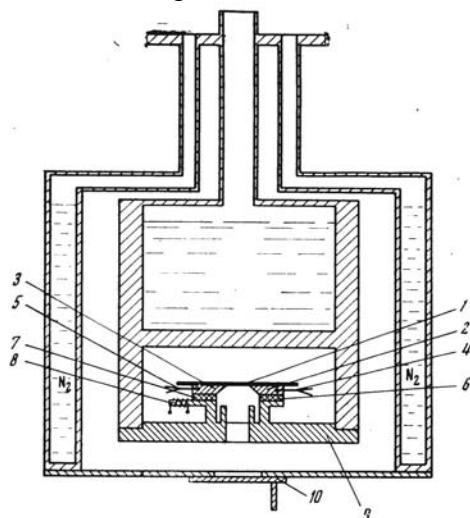


Рис.24. Схема ізотермічної камери вакуумного кріостата для визначення теплопровідності тонких плівок: 1 – зразок; 2 і 3 – електроди; 4 і 5 – термопари; 6 і 7 – теплопереходи із BeO; 8 – нагрівник; 9 – плата; 10 – заслінка [45]

В описаній методиці товщина Pt провідного шару складала 0,1-0,2 мкм. При товщині 0,1 мкм опір провідної смужки ~ 300 Ом і температурний коефіцієнт опору $1,3-1,4 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Для забезпечення ефективного нагрівання провідного шару на $9-10^\circ\text{K}$ при вимірюваннях в області кімнатних температур теплопровідності поліамідної плівки товщиною 13 мкм потрібно пропустити струм нагрівання $2 \cdot 10^{-3} \text{ A}$.

Для визначення коефіцієнта теплопровідності провідного шару, потрібного для обчислення поправки на краєві ефекти, використовувалась запропонована методика. Напилення плівок в тій же камері, що і проводиться вимірювання, підвищує точність вимірювання за рахунок збереження умов, в яких проводилось дослідження властивостей підкладки, крім того, зменшується імовірність забруднення підкладки.

Коефіцієнт теплопровідності розраховується за формулою:

$$\chi = \left(\frac{I^2 R_0^2 \beta l}{2Ld\Delta R} - k \right) \left(1 - \frac{2}{nL} \right), \quad (3.1)$$

де R_0 – опір смужки 1 (рис.23) при відсутності струму нагрівання; β – температурний коефіцієнт опору провідного шару; ΔR – зміна опору смужки 1 під дією струму I ; k – поправка на випромінювання $k=2(I^2+I\alpha)d$; α – коефіцієнт тепловіддачі за рахунок випромінювання; $(1-2/(nL))$ – поправка на краєві ефекти $n^2 = (2\chi d + 2l^2 \alpha) / \beta l (\chi_n \alpha + cd)$; χ_n – теплопровідність провідного шару. Величини l , L , β , d вказані на рис.23, а α визначається за відхиленням від температури провідної смужки при заданій зміні температури камери від температури ізотермічних електродів 4. Ізотермічність широких електродів забезпечується напиленням на них достатньо товстого шару речовини (декілька мкм) з високою те-

плопровідністю і створенням надійного теплового контакту з тепловідводами. Нами для цього проводилось залужування тих і інших евтектикою In-Ga. Допоміжний шар мав розміри: $l=0,7$ мм; $L=15$ мм; $b=0,3$ мм; $t=1,5$ мм (рис.23).

Похибка вимірювання коефіцієнта теплопровідності в цьому випадку визначається похибкою вимірювання наступних величин: $R - 0,05\%$; $l - 0,1\%$; $T - 0,5\%$; $\Delta H - 0,5\%$; $b - 1\%$ і похибкою вимірювання геометричних розмірів зразка, причому основний вклад в похибку вносять похибка вимірювання d , L , l , b .

При вимірюванні коефіцієнта теплопровідності тонких металічних або напівпровідникових плівок на підкладці попередньо визначається теплопровідність χ_d підкладки, а після напилення плівки системи плівка-підкладка і за різницею між ними розраховується коефіцієнт теплопровідності плівки. При дослідженні залежностей теплопровідності від товщини і температури систематична похибка, яка викликана похибкою у визначенні геометричних розмірів, виключається, і точність визначення цих залежностей значно підвищується.

За розрахунком мінімальні товщини плівок, для яких похибка вимірювань не буде перевищувати 20%, при використанні підкладок із слюди товщиною 3 мкм або поліамідної плівки товщиною 10 мкм при температурі рідкого азоту складають декількасот ангстрем [44].

На цій же установці можна вимірювати питому теплоємність тонкопліткових зразків. Для цього після нагрівання зразка струмом до стаціонарного стану виключають струм і реєструють експоненціальне зменшення ΔR в часі. За сталою часу визначають коефіцієнт теплопровідності і теплоємності.

3.1. 3 ω -метод визначення теплопровідності тонких плівок

Визначення теплопровідності є вкрай важливим, тому що, поперше, вона визначає продуктивність термоелектричних матеріалів і, по-друге – містить інформацію про мікроструктуру досліджуваного матеріалу.

3 ω -метод метод спочатку був розроблений для вимірювання теплової провідності ізотропних масивних матеріалів з низькими значеннями теплопровідності, проте цей метод був успішно застосований для вимірювання теплової провідності тонких плівок, нанесених на високо-теплопровідні підкладки [47].

На досліджуваний зразок наноситься тонка смужка металу (рис.25), яка використовується у якості нагрівача, а також як термометр, що залежить від електричного опору металевої смужки.

З частотою ω через смужку пропускається змінний струм, який нагріває досліджуваний матеріал. Протягом цього часу вимірюється напруга $U(t)$. Через залежність від температури електричного опору металевої смужки нагрівача, 3 ω напруга накладається на початкову напругу ω [48]:

$$U(t) = U_{\omega} \cdot \cos(\omega t) + U_{3\omega} \cdot \cos(\omega t - \varphi) + U_{3\omega} \cdot \cos(3\omega t - \varphi) \quad (3.2)$$

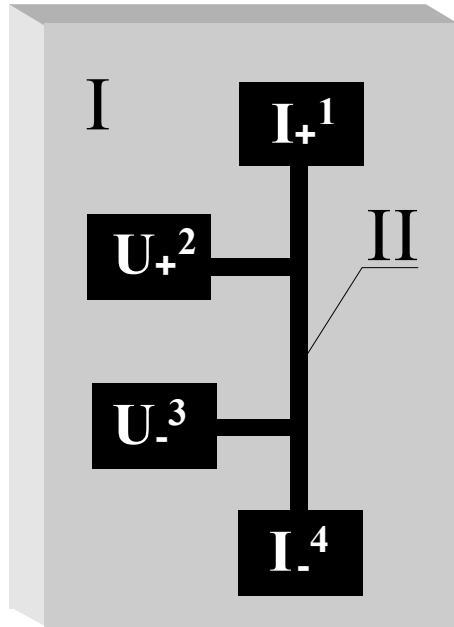


Рис.25. Схема досліджуваного зразка (I), металевої смужки-нагрівача (II)

Ця $U_{3\omega}$ напруга містить інформацію про теплофізичні властивості основної речовини і дозволяє вимірювати температуру коливань $\Delta T_{2\omega}$:

$$\Delta T_{2\omega} = \frac{2 \cdot U_{3\omega}}{I \cdot R \cdot \alpha} \quad (3.3)$$

де I це струм вздовж смужки, R опір між внутрішніми контактними і α температурний коефіцієнт опору ($\alpha=1/R \cdot dR/dT$). Труднощі: 1) складно виміряти $U_{3\omega}$ напругу, яка, як правило, є одностисячна від первинної U_{ω} напруги; 2) важко пов'язати теплопровідність з основним поняттям амплітуди $\Delta T_{2\omega}$ температурного коливання.

Для вимірювання 3ω напруги, використовують міст Уїтстона [48] або технологію, засновану на диференціальних підсилювачах [46]. Обидві схеми наведені на рисунку 26. Друга схема має ряд переваг в порівнянні з першою.

Використання металевої смужки з чотирма контактами дозволяє вимірювати опір смужки методом чотирьох точок. Можна знайти не тільки зміну опору, а й абсолютне значення опору. Тому температура смужки сама по собі може бути відомою. Як тільки напруга ω знижується, 3ω напруга має бути вилучена з решти сигналу. Це може бути досягнуто при синхронній підсилюючій технології.

Для того, щоб зрозуміти і зробити наш власний цифровий синхронний підсилювач, важливо зрозуміти, як синхронний підсилювач працює.

Визначимо напруги при частоті 3ω з періодичних $V(t)$ напруг. Всі періодичні $V(t)$ функції можуть бути виражені таким чином:

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\omega} a_n \cdot \cos(n\omega t) + b_n \cdot \sin(n\omega t) \quad (3.4)$$

де

$$a_n = \frac{2}{NT} \int_0^{NI} U(t) \cdot \cos(n\omega t) dt, \tag{3.5}$$

$$b_n = \frac{2}{NT} \int_0^{NI} U(t) \cdot \sin(n\omega t) dt$$

N є цілим числом і $T = 2\pi/\omega$.

Комплекс 3ω напруги $\underline{U}_{3\omega}$ можна записати у вигляді: $\underline{U}_{3\omega} = U_{3\omega} \cdot e^{i\varphi}$

Тоді амплітуда і фаза можуть легко обчислюватись:

$$U_{3\omega} = \sqrt{a_3^2 + b_3^2},$$

$$\tan \varphi = \frac{a_3}{b_3} \tag{3.6}$$

Підводячи підсумок, ми можемо визначити $U_{3\omega}$ і φ значення.

Це може бути досягнуто або в електронній формі з використанням потроювача частоти і аналогових синхронних підсилювачів [46], або застосуванням повного чисельного методу [48].

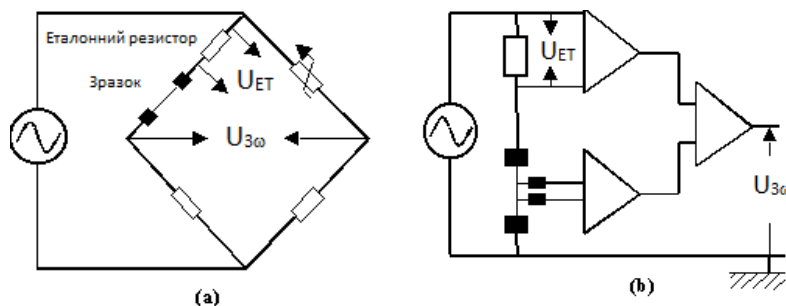


Рис.26. Схема погашення початкової напруги ω . Схему а) заснована на мості Уїтстона, б) заснована на диференціальних підсилювачах

Експериментальна установка заснована на схемі б (рис.26). U_{ET} і $U_{3\omega}$ (після підсилення ~ 100) визначаються за допомогою комп'ютера, оснащеного низьким рівнем шуму, 12 біт, картою 200 кГц. $U_{3\omega}$ сигнал як і раніше з шумом і містить ω і 2ω частини. Програма визначає частоту і навіть число періодів опорної напруги U_{ET} і синтезує потрібні $\cos(3\omega t)$ і $\sin(3\omega t)$ з використанням математичних синус і косинус функцій. Потім амплітуда і фаза $U_{3\omega}$ визначаються з сигналу в відповідності з (3.5, 3.6), де інтегрування проводиться зазвичай протягом $N=10$ періодів.

Зазвичай аналізують експериментальні коливання температури смужки, нанесеної на ізоляційний матеріал методом, розробленим Кехіллом і його співробітниками [46-47].

Комплексна амплітуда коливань смужки визначається за формулою:

$$\Delta T_{2\omega} = \frac{P_1}{\pi\lambda} \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(kb)}{(kb)^2 \cdot (k^2 + q^2)^{1/2}} dk \quad (3.7)$$

де $2b$ – ширина смужки, P_1 – потужність на одиницю довжини в смужці, $|1/q|$ – глибина проникнення хвилі (ГПХ) і λ – теплопровідність матеріалу.

Глибина проникнення хвилі визначається за формулою:

$$\left| \frac{1}{q} \right| = \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi\rho c_p \omega}} \quad (3.8)$$

де ρ і c_p – густина і теплоємність матеріалу.

Рівняння (3.7) засноване на припущеннях, що товщиною смужки можна знехтувати, смужка має нескінченну довжину, розмір зразка напівнескінченний і його теплопровідність ізотропна.

Дійсна частина, еквівалентна (3.7), може бути добре апроксимована:

$$\Delta T_{2\omega} = \frac{P_1}{\pi\lambda} \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\lambda}{\rho c_p b^2} \right) - \frac{1}{2} \ln(2\omega) + \eta \right) \quad (3.9)$$

де η – постійна, яка, як правило, близька до 0,923, але це часто встановлюють експериментальні дані [49].

Рівняння (3.9) отримане з припущення, що глибина проникнення хвилі більша, ніж ширина смужки. Це показує, що теплопровідність матеріалу може бути визначена за нахилом амплітуди коливань температури в залежності від логарифма частоти.

Розглянемо тепер випадок, коли тонка плівка з низькою теплопровідністю знаходиться між підкладкою і смужкою. Нагрівач повинен бути ізольований від досліджуваної плівки за допомогою додаткового шару, якщо ця плівка є електропровідна.

Підвищення температури через коливання плівки може бути виражено через тепловий опір [49]:

$$\Delta T_{II} = \frac{P_1 \cdot e}{2b \cdot \lambda_{\text{плівки}}} \quad (3.10)$$

де e – товщини плівки і λ – теплопровідність плівки.

Це рівняння виводиться за умови, що тепло тече лише вздовж осі площини перерізу плівки. Ця гіпотеза є дійсна тільки у випадку коли ширина смуги велика в порівнянні з товщиною плівки. У такому випадку можна виміряти теплопровідність плівки.

Висновки

Розглянуто стаціонарні і динамічні методи визначення теплопровідності напівпровідників. Звернена увага на особливості конструкцій установок та оцінки похибок вимірювань.

Показано, що динамічні (нестационарні) методи вимірювання температуропровідності відзначаються відносною простотою і швидкістю проведення експериментів, але мають невисоку порівняно з іншими термофізичними методами точність. Проте вказані переваги часто бувають такими суттєвими, що ці методи використовуються для визначення інших теплофізичних властивостей, не зважаючи на багато ступі-

нчастість вимірювань.

Описано особливості визначення теплопровідності тонких плівок.

Література

1. Forbes J.D. // Trans. Roy. Soc. – Edinburgh, 1865. – №24. – pp. 73- 110.
2. Lees C.H. // Phil. Trans. Roy. Soc. – London, 1908. – №208. – pp. 381.
3. Lees C.H. // Phil. Trans. Roy. Soc. – London, 1898. – №191. – pp. 399.
4. Stuckes A.D. Semiconductor Conference Report / A.D.Stuckes, R.P.Chasmar // Physical Society. – London, 1956.
5. Bowers R., Ure R.W., Bauerle J.E., Cornish A.J. // Journ. Appl. Phys. – 1959. – №30. – pp. 930.
6. Francl J., Kingery W.D. // Journ. Am. Ceram. Soc. – 1954. – №37. – pp. 80.
7. Rosenberg. H.M. // Phil. Trans. Roy. Soc. – London. A247, 1955. – pp. 441.
8. Rosenberg H.M. // Proc. Phys. Soc. – London. A67, 1954. – pp. 837.
9. Friedberg S.A. // Temperature. – New York, 1955. – V.2.
10. Охотин А.С. Теплофизические свойства полупроводников / А.С. Охотин, А.С. Пушкарский, В.В. Горбачев. – М.: Атомиздат, 1972. – 318 с.
11. Термоэлектрики и их применение. – Санкт-Петербург: Физ.-техн. ин-т., 1997. – 252 с.
12. Goldsmid H.J. // Proc. Phys. Soc. – London. B69, 1956. – pp. 203.
13. Иорданишвили Е.К. Термоэлектрические источники питания / Е.К. Иорданишвили. – М.: Совет. радио, 1968. – 184 с.
14. Анатычук Л.И. Термоэлементы и термоэлектрические устройства: Справочник / Л.И. Анатычук. – Киев, Наук. думка, 1979. – 768 с.
15. Семенюк В.А. Метод измерения термоэлектрических параметров полупроводниковых материалов в широком интервале температур / В.А. Семенюк, В.А. Бевз, А.В. Гармашов // Инженерно-физический журнал. – 1984. – Т.47, №6. – сс. 977-983.
16. Равич Ю.М. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS / Ю.М. Равич, Б.А. Ефимова, Н.А. Смирнов. – М.: Наука, 1968. – 384 с.
17. Fritts R.W. Thermoelectric materials and devices / R.W. Fritts. – N.-Y.: Reinhold Publ. Co, 1960. – 143 p.
18. Kohlrausch F. // Ann. d. Phys. – 1900. – №1. – pp. 132.
19. Jaeger W. Wiss. Abhandl. physik.-techn. Reichsanstalt / W. Jaeger, H. Diesselhorst. – 1900. – V.3. – pp. 269.
20. Birkholz U. // Zs. f. Naturforsch. – 1958. – №13a. – pp. 780.
21. Материалы для термоэлектрических преобразователей. – Санкт-Петербург.: Физ.-техн. ин-т., 1993. – 89 с.
22. Иоффе А.Ф. Полупроводниковые термоэлементы / А.Ф. Иоффе. – М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1960. – 346 с.
23. А.В. Иоффе, А.Ф. Иоффе. Простой метод измерения теплопроводности / А.В. Иоффе, А.Ф. Иоффе // ЖТФ. – 1952. – Т.22, №12. – С. 2005.

24. Иоффе А.В. Измерение теплопроводности полупроводников вблизи комнатной температуры / А.В. Иоффе, А.Ф. Иоффе. // ЖТФ. – 1958. – Т.28, №11. – С. 2357-2363.
25. Каганов М.А. // ЖТФ. – 1958. – Т.28, №11. – С. 2364.
26. Swann W.F.Q. // Journ. Frankl. Inst. – 1959. – V.267. – pp. 363.
27. Heikes R. Thermoelectricity: Science and Engineering / R. Heikes and W. Ure. – New-York: Interscience Publishers, 1961. – 576 p.
28. Putley E.H. The Hall effect and semi-conductor physics. / E.H. Putley. – New York: Materials Used in Semiconductor Devices, 1968. – 263 p.
29. Балмуш И.И. Термоэлектрические эффекты в многослойных полупроводниковых структурах. / И.И. Балмуш, З.М. Дашевский, А.И. Касиян. – Кишинев: Штиинца, 1992. – 144 с.
30. Термоэлектрические материалы и преобразователи. Курс лекций: [Под ред. А.И. Харчевского]. – М.: Мир, 1964.
31. Green A., Cowles L.E.J. // Journ. Sci. Instr. – 1960. – V.37. – pp. 349.
32. Angstrom A.J. // Ann. d. Phys. – 1861. – №114. – pp. 513.
33. Carslaw H.S. Conduction of Heat in Solids / H.S. Carslaw, J.C. Jaeger // 2nd ed. Oxford. – 1959.
34. Nii R. // Journ. Phys. Soc. Japan. – 1958. – V.13. – pp. 769.
35. Kanai Y., Nii R. // Journ. Phys. Chem. Solids. – 1959. – V.8. pp. 338.
36. Goldsmid H.J. // Applications of Thermoelectricity. – London, 1960. (См. перевод: Голдсמיד Х. // Применение термоэлектричества. – М.: Наука – 1963.).
37. Harman T.C. // Journ. Appl. Phys. – 1958. – V.29. – pp. 1373.
38. Harman T.C., Cahn J.H., Logan M.J. // Journ. Appl. Phys. – 1959. – V.30. – pp. 1351.
39. Термоэлектрические генераторы: [Под ред. А.Р. Регеля]. – М.: Автомиздат, 1976. – 62 с.
40. Гельфгат Д.М. В кн.: Термоэлектрические материалы и пленки: Материалы Всесоюз. совещ. / Д.М. Гельфгат, З.М. Дашевский, Я.А. Каллер и др. – Л.: Наука, 1976. – С. 234-239.
41. А.с.455702 (СССР). Пленочный элемент (термобатарея) / З.М. Дашевский, Я.А. Каллер, Н.В. Коломоец, И.В. Сгибнев. Заявл. 06.12.73, №1975107/26-25; Опубл. в Б.И., 1976. №29. Пат. в США №3981751, Англии №1455340, Франции №2254111.
42. Охотин А.С. Термоэлектрические генераторы / А.С.Охотин, А.А.Ефремов, В.С.Охотин, А.С.Пушкарский. – М.: Атомиздат. – 1976. – 320 с.
43. Willardson R.K. Semiconductors and semimetals / R.K.Willardson. – L.: Acad. Press., 1973. – 516 p.
44. Тимофеев Ю.В. В кн.: Термоэлектрические материалы и пленки: Материалы Всесоюз. совещ. / Ю.В.Тимофеев, А.В.Кондратов, А.Ф.Чудновский. – Л.: Наука, 1976. – С. 247-250.
45. Бойков Ю.А. Приборы и техника эксперимента / Ю.А.Бойков, Б.М.Гольцман, С.Ф.Синенко. – 1975. – №2. – С. 230-232.
46. Cahill D.G. // Rev. Sci. Instrum. – 1990. – №61. – pp. 802.
47. Cahill D.G., Fischer H.E., Klitsner T., Swartz E.T. and Pohl R.O. //

- J.Vac. Sci. Technol. A. –1989. – №7. – pp. 1259.
48. Birge N.O. and Nagel S.R. // Rev. Sci. Instrum. – 1987. – №58. – pp. 1465.
49. Lee S.M. and Cahill D.G. // J. Appl. Phys. – 1997. – №81. – pp. 2590.
*Стаття надійшла до редакційної колегії 18.12.2011 р.
Рекомендовано до друку д.ф.-м.н., професором Рувінським М.А.*

DIAGNOSTIC METHODS OF THERMOELECTRIC PARAMETERS OF SOLIDS (REVIEW)

**D. M. Freik¹, M. O. Galuschak², A. I. Tkachuk²,
Yu. V. Lysiuk¹, O. S. Krynytsky²**

¹*PreCarpathian National University by Vasil Stefanic;
76000, Ivano-Frankivs'k, Shevchenko st., 57; e-mail: freik@pu.if.ua*

²*Ivano-Frankivs'k National Technical University Oil and Gas;
76018, Ivano-Frankivs'k, Carpats'ka st., 15;
e-mail: andrij.tkachyk@gmail.com*

The basic measuring methods of thermal conductivity and other thermoelectric parameters (Seebeck coefficient, electrical conductivity) of solids and thin films and plant design for these methods are recited. A number of theoretical and empirical formulae for calculation of these parameters are presented. Measurement accuracy for each of the methods is estimated, and the reasons through which errors arise in the measurement are analyzed.

Keywords: *thermoelectricity, thermal conductivity, measuring methods.*

РОЛЬ $\alpha \leftrightarrow \gamma$ ПЕРЕТВОРЕНЬ В ЗАЛІЗІ У ФОРМУВАННІ НА НЬОМУ ПОВЕРХНЕВОГО ШАРУ

П. І. Мельник

*Івано-Франківський університет права ім. Короля Данила Галицького;
76000, м. Івано-Франківськ, вул. Коновальця, 35*

Розглядається концепція вакансійного механізму формування легованого поверхневого шару на залізі, базуючись на існуванні в ньому природного поліморфного перетворення $\alpha \leftrightarrow \gamma$ при 910 °С.

Ключові слова: *твердофазні перетворення, поверхневі шари, дифузія, енергетичні затрати, вакансійний механізм дифузії.*

Вступ

В основі одержання легованого поверхневого шару на залізі та його сплавах лежить відомий технологічний процес хіміко-термічної обробки (ХТО), при якому змінюється не лише структура металу чи сплаву, а й його хімічний склад на поверхні виробу. Для цього створюються середовища і експериментально підбираються технологічні режими для забезпечення процесу протікання на поверхні виробу хімічних реакцій з виділенням активних атомів, які, адсорбуючись, дифундують з поверхні в глибину металу. Цю технологію ще інакше називають поверхневим дифузійним насиченням, оскільки відповідальним за формування структури приповерхневих шарів є саме дифузійні процеси.

Для здійснення поверхневого дифузійного насичення металу класична теорія розглядає необхідність створення спрямованого дифузійного потоку атомів насичуючого елемента з поверхні вглиб. Це стає можливим при умові одночасного протікання трьох основних процесів: утворення вільних (активних) атомів насичуючого елемента на поверхні металевого виробу, який піддається насиченню; адсорбції атомів насичуючого елемента виробом; дифузії адсорбованих атомів у глибину виробу. Кожний із цих процесів забезпечується технологічним прийомом для його протікання [1].

І. Передумови теоретичних міркувань

Якщо перші два процеси (утворення вільних атомів та їх адсорбція виробом) легко пояснити, то третій процес (дифузія адсорбованих атомів у глибину виробу) потребує додаткових пояснень, бо цілком зрозуміло, що осівшому на поверхні атому будь-якого елемента енергетично не вигідно проштовхуватись між впорядкованими, щільно розміщеними один відносно одного атомами кристалічної ґратки металу. Йому більш вигідно залишатись на поверхні металу, взаємодіяти з атомами свого елемента, формуючи кристалічну ґратку і утворюючи покриття з осаджених однорідних атомів, а не дифундувати в середовище атомів заліза.

Для пояснення руху чужорідних атомів в кристалічній ґратці були розроблені феноменологічна та атомістична теорії дифузії, які дозволяють в багатьох випадках пояснити рух атомів з поверхні вглиб металу, накладаючи, в разі потреби, додаткові умови для здійснення цього уявного процесу. Однак, поза поясненням залишається той факт, коли чужорідні атоми багатьох елементів, осаджені на поверхню заліза, все ж дифундують в його глибину, а ті ж осаджені атоми на хром, нікель, молібден, вольфрам, ванадій та більшості інших металів, не дифундують з поверхні в глиб.

Загальна теорія дифузії базується на уявленні переміщення маси атомів в кристалічній системі, яка забезпечується рухом окремого атому із одного вузла кристалічної ґратки в інший. Усі атоми безперервно коливаються навколо своїх середніх положень, отже, елементарний акт дифузії (перескок з одного вузла в інший) відповідає тому моменту, коли змінюється середнє положення (розташування) атомів. Для цього необхідно, щоб атом в даний момент володів достатньо високою енергією, і в його оточенні існувала би вакансія, куди він міг би перейти. Такий збіг умов є чисто спонтанним і описується логікою теорії імовірності.

Дифузія, як з теоретичної, так і експериментальної точок зору, є результатом сумування елементарних актів переміщення (перескоків) окремих атомів в кристалічній речовині впродовж часу, який є незрівнянно великим в порівнянні з часом циклу теплового коливання. Такий процес розглядають чисто статистично, базуючись на величині часу τ , який визначає послідовність перескоків в даній кристалічній системі. Неможливо передбачити, коли відбудеться черговий перескок даного атому, але за кінцевим результатом можливо встановити середній інтервал між перескоками, який виразиться залежністю:

$$\frac{1}{\tau} = P\nu \exp(-\Delta H / RT),$$

де $\exp(-\Delta H / RT)$ – імовірність того, що атом протягом одного коливання буде мати, за рахунок теплового руху, енергію ΔH ; ΔH – енергія активації одного перескоку; ν – число теплових коливань за секунду і визначається в першому наближенні рівнянням $\nu = kT/h$; P – імовірність того, що атом з достатньо високою енергією, яка відповідає ентропії активації ΔS перескоку, все ж досягне вузла свого переміщення.

Оцінку частоти переміщень (перескоків) атомів в кристалічній системі є швидкість переміщення певно кількості маси речовини на певну віддаль в напрямку зменшення градієнта концентрації дифундуючих атомів. В свою чергу, швидкість переміщення атомів в певному напрямку залежить від перепаду їх концентрації, напрямку руху, температури, будови кристалічної ґратки, природи речовин, які взаємодіють, та інших факторів, що не зовсім очевидні, а тому характеризуються коефіцієнтом дифузії, який враховує усі ці фактори. Виводиться коефіцієнт дифузії, виходячи із таких міркувань:

якщо dc є різниця концентрації в двох точках, які знаходяться на віддалі dx одна від одної в напрямку дифузії, то кількість речовини dm ,

що продифундує за час dt через площу S поперечного перерізу потоку дифузії виразиться залежністю:

$$dm = DS \frac{dc}{dx} dt,$$

де величина D називається коефіцієнтом дифузії і вимірюється в $\text{м}^2/\text{с}$.

В даний час дифузійні процеси розглядаються в основному з позиції двох основних теорій: феноменологічної і атомістичної, які враховують значення коефіцієнтів дифузії.

Для описання масопереносу, що здійснюється в результаті переміщення атомів, в атомістичній теорії дифузії розрахунок ведуть в рамках конкретно визначеної моделі кристалу. Такий підхід дає можливість встановити температурну і концентраційну залежність коефіцієнта дифузії, залежність його від ступеня дальнього порядку, а також параметру кореляції в сплавах. Це дозволяє також пов'язати коефіцієнт дифузії з енергетичними константами міжатомної взаємодії. Розвиток атомістичної теорії дифузії в чистих металах привів до зручної формули залежності коефіцієнта дифузії від абсолютної температури:

$$D = D_0 e^{-Q/RT},$$

відомої під назвою рівняння Арреніуса.

Такого типу залежність була підтверджена дослідями для дифузії в чистих металах. З допомогою високочистих радіоактивних ізотопів і досконалої методики пошарового аналізу були проведені високоточні дослідження процесів дифузії в багатьох металах і сплавах, особливо з ГЦК граткою. Вимірювали як параметри самодифузії, так і дифузії розчинених речовин та домішок. Справедливість рівняння Арреніуса була експериментально так добре встановлена, що стало прийнятим розглядати апіорі будь-яке відхилення від лінійної залежності $\ln D$ від $1/T$ як сумнівне [2]. Теоретично Віньярд [3] дав переконливе обґрунтування рівнянню Арреніуса, а теорія Зінера [4] для D_0 дозволила пояснити, чому ця величина так чітко вкладається в значення, що лежать в досить вузьких границях, приблизно 10^{-2} - 10^0 $\text{см}^2/\text{с}$.

Феноменологічна теорія дифузії враховує рівняння Фіка, який вперше застосував до процесу дифузії класичний аналіз теплового потоку, що його провів раніше Фур'є. В основу цього аналізу покладено умову безперервності потоку речовини в напрямку градієнта концентрації дифундуючого елемента. Якщо вісь X паралельна напрямку градієнта концентрації C , то рівняння для потоку речовини, що виникає при даних умовах, буде мати вигляд:

$$I = -D \left[\frac{\partial c}{\partial t} \right]_t.$$

Цей вираз відомий під назвою першого закону Фіка. Слід звернути увагу на те, що при $\partial c/\partial t = 0$, $I = 0$. Це задовольняє умову відсутності результуючого потоку атомів в гомогенній системі.

Однак, само по собі це рівняння не може бути використане для вирішення практичних задач, зокрема для визначення коефіцієнтів дифузії, бо неможливо створити такі умови, за яких можна було би безпосередньо виміряти кількість дифундууючої речовини при постійному градієнті концентрації. Навпаки, набагато легше заміряти розподіл концентрації вздовж напрямку дифузії по завершенні певного проміжку часу. Для обчислення коефіцієнта дифузії, спираючись на дослідні дані, використовують другий закон Фіка, який виводиться з першого із врахуванням принципу збереження речовини і записується у вигляді:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial I}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial x} \left[D \frac{\partial c}{\partial x} \right].$$

Отже, в основі феноменологічного підходу до описання дифузії лежить наявність градієнта концентрації. Такий підхід до явища дифузії ставить за мету дати загальні макроскопічні рівняння для визначення потоків дифундууючих речовин. Хоча при цьому не враховується природа виникнення дифузійного потоку, використання середньостатистичних експериментальних даних дає добре узгоджені результати, які отримуються в рамках зроблених припущень. При такому підході проблема спрощується, оскільки встановлюється безпосередній зв'язок між початковим і кінцевим станом системи. Однак, можливості подібного аналізу обмежені саме тим, що не враховується рух окремого атома.

Визначення коефіцієнта дифузії в сплавах є набагато складнішим, бо одні елементи прискорюють, а інші сповільнюють дифузійні процеси. Проведений аналіз дифузії в двокомпонентному сплаві показав, що необхідно розрізняти і враховувати в розрахунках два коефіцієнти дифузії: коефіцієнт дифузії компонента А в компонент В і коефіцієнт дифузії компонента В в компонент А. Виміряний дослідним шляхом коефіцієнт взаємної дифузії D_{AB} Даркен виразив співвідношенням:

$$D_{AB} = N_A D_B + N_B D_A,$$

де N_A і N_B — атомні долі компонентів А і В в бінарному сплаві.

Знаючи швидкість переміщення потоку v , можна визначити D_A і D_B , які називають парціальними коефіцієнтами дифузії.

При виведенні співвідношення Даркена [5] сплав розглядався як двокомпонентний, що складається із атомів А і В, але наявність вакансій до уваги не бралася. В 1949 році Бардін [9] вказав на некоректність такого підходу. Розглядаючи дифузію за вакансійним механізмом, він показав, що співвідношення Даркена повинні виконуватись лише в тому випадку, коли в будь-якій точці дифузійної зони вакансії знаходяться в локальній термодинамічній рівновазі, тобто хімічний потенціал вакансії $m_v = 0$. Однак в сплаві завжди існують джерела, та стоки вакансій (дислокації, границі зерен і т.п.), які підтримують рівноважну концентрацію вакансій. Який вклад вносить у формулу Даркена потік вакансій детально розглянуто в роботі Манінга [5]. Ним описаний концентраційно невпорядкований бінарний твердий розчин, в якому присутня визначена

рівноважна кількість вакансій, послідовність переміщення яких корельована.

В рамках цієї моделі показано, що для парціальних коефіцієнтів дифузії рівняння запишеться наступним чином:

для швидкодифундуєної компоненти –

$$D_A = D'_A \left\{ I + \frac{d \log v_A}{d \log C_A} \right\} (I + V_A);$$

для повільнодифундуєної компоненти –

$$D_B = D'_B \left\{ I + \frac{d \log v_A}{d \log C_A} \right\} (I + V_B);$$

тут $V_i = \frac{C_i(D'_A - D'_B)}{M_0(C_A D'_B + C_B D'_A)}$, де C_i – концентрація вакансій, коефіцієнт

$M_0 = 7,15$ (для сплавів з ГЦК граткою) зумовлений наявністю вакансій. З цих рівнянь видно, що наявність потоку вакансій приводить до збільшення D_A і зменшення D_B , що є цілком закономірно, бо потік вакансій сприяв переміщенню атомів в протилежному напрямі.

Коефіцієнт взаємної дифузії за Манінгом [5]:

$$D = (C_A D'_A + C_B D'_B) \left\{ I + \frac{d \log v_A}{d \log C_A} \right\} S,$$

де $S = \frac{2C_A C_B (D'_A - D'_B)^2}{M_0 (C_A D'_A + C_B D'_B)(C_A D'_B + C_B D'_A)}$ і не залежить від C .

За оцінкою Манінга величина S змінюється в залежності від величини співвідношення D'_A/D'_B . Однак уточнення розрахунків Даркена з врахуванням потоку вакансій, не дали суттєвої різниці через велику похибку визначення коефіцієнта взаємної дифузії.

Отже, дослідники дифузії в кристалічних системах схиляються до думки, що відповідальним за переміщення атомів є вакансії, які формують вакансійні потоки, забезпечуючи рух атомів у кристалах.

Водночас пропонуються різні механізми елементарних переміщень атомів в кристалічній системі [1], з допомогою яких можна було би пояснити рух атомів в ній. На рис.1. показані схеми найбільш вірогідних переміщень атомів у кристалах. Однак, реалізація багатьох із них в умовах теплового впливу на метал ставиться дослідниками під сумнів, бо їх реалізація пов'язана з надто великими затратами енергії. Так, обмінний механізм (його ще називають двоатомним кільцевим) для щільноупакованих кристалів ГЦК і ГПУ не може бути здійснений через великі спотворення гратки, яке пов'язане з ним. Такі спотворення вимагали б концентрації великої кількості енергії в дуже малому об'ємі, що є малоюмовірним. Багатоатомний кільцевий механізм немає такого недоліку, але одночасний синхронний рух великої кількості атомів, очевидно, також малоюмовірний. Тут перепоною є значення ентропії, а не енергії.

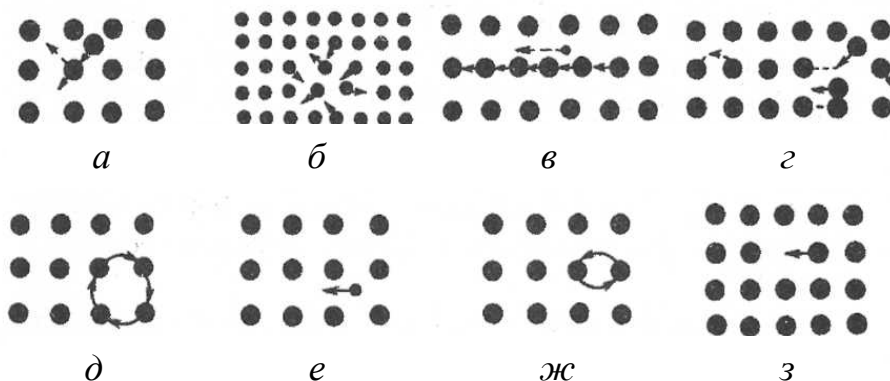


Рис. 1. Схема елементарних переміщень атомів в кристалах за різними механізмами дифузії: а – механізм непрямого переміщення міжвузлової конфігурації; б – релаксаційний механізм; в – краудіонний механізм; г – гантельний механізм непрямого переміщення міжвузлової конфігурації; д – кільцевий механізм; е – механізм прямого переміщення атомів між вузлами ґратки; ж – обмінний механізм; з – вакансійний механізм

Найбільш ймовірним є те, що при русі атомів домішкових елементів в розчинах заміщення превалує вакансійний механізм. В основі цього механізму лежить той факт, що при будь-якій температурі вище абсолютного нуля певна частина вузлів ґратки не заповнена. Отже, існує мала, але скінчена ймовірність того, що сусідній з домішковим атомом вузол є вакантним. Тоді домішковий атом може переміститися, перескочивши у вакантний вузол ґратки.

Суттєвими в розчинах заміщення є міжвузловий і краудіонний механізми витіснення. Відповідно до механізму витіснення атом якимось способом потрапляє у міжвузловий простір. Потім рухається через ґратку з деяким її спотворенням, виштовхує сусідній атом з вузла і займає його місце. Краудіон — це додатковий іон, який зміщує своїх сусідів вздовж одного із напрямків щільної упаковки в ґратці. Реалізувати такий механізм, ймовірно, зміг би потік частинок високої енергії, або іншої концентрованої енергії.

II. Теоретичне обґрунтування вакансійного механізму дифузії в залізі

Будь-яке переміщення атома в кристалічній ґратці пов'язано з її пружними спотвореннями незалежно від механізму його здійснення (рис.1). В роботі [19] показано, що енергія утворення дефекту, в наближенні взаємодії з найближчим оточенням, визначається за формулою:

$$\varepsilon_p = \frac{1}{2} \left[V_0 \lambda_{ijlm} U_0^{lm}(p) - \frac{1}{N} \sum_{ks} (p) \sum_{ks} \frac{|\vec{l}_s(\vec{k}) \vec{F}_p(\vec{k})|^2}{m \omega_s^2(\vec{k})} \right],$$

де λ_{ijlm} – тензор модулів пружності чистого розчинника; $U_0^{lm}(p)$ – тензор коефіцієнтів концентраційного розширення ґратки при впровадженні домішкового атома в позицію; $\vec{l}_s(\vec{k})$ – вектор поляризації s-моди ко-

ливання з хвильовим вектором; $\omega_s(\vec{k})$ – частота нормальних коливань; $\vec{F}_p(\vec{k})$ – Фур'є-компонента сили, яка характеризує взаємодію атомів розчинника і впровадженого в позицію домішкового атома; m – маса атома розчинника; V_0 – об'єм елементарної комірки розчинника.

В рівнянні сумування по \vec{k} поширюється на першу зону Брілюена. Сума по s означає суму по всіх трьох вітках акустичних коливань ґратки розчинника. Крім цього, обов'язковим є сумування по індексах, які повторюються.

Для числових розрахунків енергії впровадження атомів в будь-яку позицію кристалічної ґратки нами були проведені розрахунки значень концентраційного розширення та модулів пружності концентраційних систем, які утворюються при взаємодії атома розчинника і домішок [6], що дало можливість розрахувати енергію переміщення атома домішкового елемента в α -залізі за різними можливими механізмами дифузії в кристалічній ґратці, виходячи з однакових посилянь щодо методики обчислення.

Результати розрахунків значень затрат енергії на здійснення акту переміщення чужорідного атома в α -залізі наведені в табл. 1.

Таблиця 1. Значення енергії активації переміщення атома домішкового елемента в α - Fe за різними механізмами дифузії

Механізм дифузії	Домішковий елемент											
	Fe	Co	Ni	V	Si	Mo	W	Al	Ti	S	B	C
	Енергія активації дифузії за різними механізмами											
$\Delta E_{\text{вак}}$	0,8045	0,8044	0,8043	0,8015	0,8005	0,7955	0,7945	0,7895	0,7845	0,7796	0,7345	0,6805
$\Delta E_{\text{окт}}$	5,452	5,443	5,437	5,514	5,373	5,575	5,569	5,603	5,585	5,246	5,074	5,000
$\Delta E_{\text{тетр}}$	8,161	8,158	8,157	8,187	8,132	8,207	8,208	8,219	8,227	8,082	8,031	8,987
$\Delta E_{\text{по}}$	6,256	6,247	6,241	6,316	6,174	6,371	6,364	6,393	6,370	6,026	5,806	5,681
$\Delta E_{\text{ме}}$	11,708	11,699	11,693	11,768	11,626	11,823	11,816	11,845	11,822	11,817	11,261	11,133
U_{xx}	-0,100	-0,100	-0,101	-0,097	-0,103	-0,096	-0,095	-0,094	-0,093	-0,107	-0,113	-0,117
U_{zz}	0,866	0,861	0,862	0,851	0,870	0,845	0,844	0,840	0,840	0,885	0,903	0,917
$r_B, \text{Å}$	1,27	1,25	1,24	1,34	1,17	1,39	1,40	1,43	1,46	1,04	0,89	0,771

$\Delta E_{\text{вак}}$, $\Delta E_{\text{окт}}$, $\Delta E_{\text{тетр}}$, $\Delta E_{\text{по}}$, $\Delta E_{\text{ме}}$ – енергія активації дифузії за вакансійним, міжвузловим (октаедричним і тетраедричним), прямого обміну і механізмом міжвузлового витіснення відповідно в eB; U_{xx} , U_{zz} – значення компонент тензора концентраційного розширення ґратки; r_B – радіус атома домішкового компонента.

Аналіз одержаних результатів обчислення величини енергетичних затрат показує, що єдиним ймовірним є вакансійний механізм дифузії домішкових атомів в кристалічній ґратці α -заліза, бо лише при такому способі переміщення чужорідних атомів кристалічна ґратка заліза піддається найменшим спотворенням, і робота подолання пружних сил міжатомної взаємодії є мінімальною.

Великі значення енергії активації за міжвузловим механізмом для атомів вуглецю і бору, які утворюють тверді розчини впровадження в α -залізі, дозволяє зробити висновок, що цей механізм реалізується тільки за наявності вакансії у вузлах ґратки заліза, найближчих до атому домішкового елемента. Значення енергії активації дифузії по октаедричних пустотах значно менше енергії активації по тетраедричних пустотах, що добре узгоджується з наявними експериментальними і розрахунковими даними інших авторів [7, 8].

Отже, наведений порівняльний аналіз енергетичних затрат на здійснення дифузії в α -залізі за різними механізмами дає підстави стверджувати, що відповідальним механізмом за дифузійні процеси, які реалізуються в α -залізі при тепловому впливу, є вакансійний. Реалізація інших механізмів дифузії, очевидно, можлива при лазерній обробці, радіоактивному опроміненні, вибуху і інших видах концентрованого підводу енергії до кристалічної речовини.

Беручи до уваги дані проведеного огляду літератури і порівняльного аналізу затрат енергії активації елементарних актів дифузії в α -залізі за різними механізмами, можна впевнено стверджувати, що в процесі поверхневого дифузійного насичення заліза діє вакансійний механізм, а генерування неврівноважених вакансій зобов'язано природному поліморфному $\alpha \leftrightarrow \gamma$ перетворенню, а також твердофазним перетворенням, які протікають в сплаві під дією зміни температури і концентрації насичуючого елемента в основі.

III. Експериментальне підтвердження вакансійного механізму дифузії в залізі

Результати дослідження дифузійного насичення заліза різними елементами показують, що стабільно формуються поверхневі шари на ньому лише при насиченні тими елементами, які на діаграмах стану “залізо-насичуючий елемент” (Fe-н.е.) утворюють вузьку замкнуту γ -область в інтервалі температур 910-1400 С, як це показано на рис. 2 для декількох систем [1]. В цьому ж інтервалі температур протікає технологічний процес дифузійного насичення заліза та його сплавів. Саме цими елементами дифузійне насичення вивчено найбільш детально завдяки одержанню стійких результатів формування дифузійного шару.

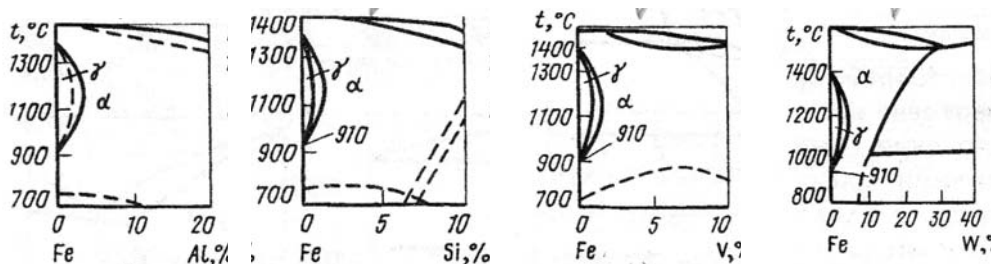


Рис.2. Фрагменти діаграм станів Fe-н.е., в яких замкнуті γ -області і сформовані у вузькому концентраційному інтервалі

В системах Fe-н.е., в яких зовсім відсутні замкнуті γ -області, як це показано на рис.3, дифузійні шари на залізі не формуються, а тому від-

сутні публікації про дослідження технологій їх насичення та, відповідно, властивостей.

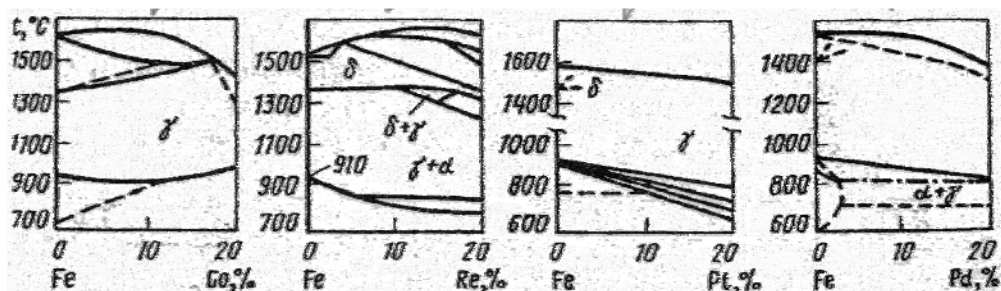


Рис.3. Фрагменти діаграм станів Fe-н.е., в яких відсутні замкнуті γ -області

Ще однією особливістю є те, що чим вужчий концентраційний інтервал замкнутої γ -області при температурі дифузійного насичення, тим інтенсивніше протікає формування поверхневого шару на залізі. В табл.2 наведені значення максимальної розчинності деяких домішкових елементів в залізі, які приводять до $\gamma \rightarrow \alpha$ перетворення.

Таблиця 2. Значення концентрації домішкового елемента в γ -залізі (максимальна розчинність), яка приводить до фазового перетворення $\gamma \rightarrow \alpha$ -заліза при температурі 1150 °С [10].

Домішковий елемент	Cr	W	Ge	As	Mo	Si	Sn	Sb	V	Ti	Al	Be
Розчинність в γ -залізі, %	12,5	6	3-6	3r5-4	3,1	2,15	2	1,9	1,47-1,62	0,75	0,6	0,3-0,4

Аналізуючи експериментальні дані залежності глибини дифузійної зони при хіміко-термічній обробці заліза від часу насичення цими елементами при однаковій температурі, приходимо до висновку, що для одержання однакової товщини дифузійного шару при насиченні різними елементами необхідний різний час витримки. Дослідники пояснюють це різницею в значеннях коефіцієнтів дифузії домішкового елемента в залізі.

В табл.3 наведені опосередковані дані, дослідження багатьох експериментаторів [11, 12, 13, 14, 15-18], значень величини затраченого часу для одержання дифузійного шару заданої товщини при однаковій температурі насичення заліза.

Таблиця 3. Тривалість насичення ($\tau_{\text{нас}}$) заліза різними елементами при 1000 °С для одержання глибини дифузійного шару 30 мкм, а також значення коефіцієнтів дифузії (D_0 , см²/с) [20] їх в залізо

Елемент	Cr	W	Mo	Si	V	Ti	Al	Be
$\tau_{\text{нас}}$, ГОД	4	3,5	0,75	0,45	0,4	0,4	0,1	0,1
D_0 , см ² /с	$1,8 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^3$	0,44	0,44	$8 \cdot 10^2$	0,15	$3,23 \cdot 10^4$	0,1

Як видно з даних табл.3, порядок розташування елементів за величиною затраченого часу для одержання дифузійного шару однакової товщини корелює із зміною концентраційної ширини замкнутої γ -області для кожного елемента (табл.3). В такому ж порядку розташовані елементи в ряд за зміною величини значення коефіцієнта дифузії. Це дає підставу вважати, що до початку формування дифузійного шару необхідно створити на поверхні заліза таку концентрацію насичуючого елемента, яка забезпечить протікання в поверхневому мікрошарі $\gamma \rightarrow \alpha$ -перетворення, оскільки при 1000 °С залізо знаходиться в стані γ -фази. З цього моменту починається активне формування дифузійного шару за рахунок інтенсивного адсорбування атомів насичуючого елемента і дифузії їх в глибину заліза. Цілком очевидно, що чим вужча замкнута γ -область при температурі насичення, тим менший час потрібний для досягнення критичної концентрації елемента в поверхневому шарі заліза, при якій починається це перетворення. Цим і визначається тривалість формування дифузійного шару на першій стадії насичення. Оскільки параметри дифузії визначаються з врахуванням експериментальних даних, то й час досягнення критичної концентрації насичуючого елемента в поверхневому шарі, природно, входить в розрахунок коефіцієнта дифузії, який є середньостатистичною характеристикою залежності проникнення атомів з поверхні вглиб металу при його хіміко-термічній обробці. Слід також відмітити той факт, що формування дифузійного шару на залізі елементами, які на діаграмі двокомпонентних сплавів утворюють вузьку замкнуту γ -область, протікає стабільно в широкому інтервалі температур [11, 14].

Насичення заліза елементами, які на діаграмі станів двокомпонентних систем забезпечують стабілізацію будь-якої із фаз заліза, або формують замкнуті області у широкому інтервалі температур, взагалі не утворюють дифузійного шару, або ж його формування не є стабільним, що викликає у дослідників суперечки про можливість проведення такими елементами хіміко-термічної обробки заліза, хоча за виробленими критеріями (утворення твердих розчинів із залізом та різниця в атомних діаметрах не більше 16%) ці елементи повинні формувати дифузійний шар. До таких елементів відносяться нікель, марганець, ніобій, а також кобальт, реній, платина. Ці елементи утворюють із залізом тверді розчини і різниця в розмірах атомних діаметрів незначна. Розміри атомних діаметрів (D) деяких елементів за довідниковими даними [20] приведені в табл.4.

Таблиця 4. Значення атомних діаметрів деяких елементів

Елемент	Be	Al	Si	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Ge
D, Å	2,26	2,86	2,52	2,83	2,66	2,52	2,60	2,56	2,47	2,54	2,56	2,63
Елемент	As	Zr	Nb	Mo	Sn	Sb	Ta	W	Re	Rt	U	Pu
D, Å	2,63	3,20	2,92	2,80	2,80	3,22	2,90	2,82	2,76	2,77	3,08	3,26

І якщо спроби дослідити дифузійне насичення заліза ренієм і платиною в літературі ще зустрічаються (бібліографія робіт [11, 14]), то публікацій, які підтверджували б можливість дифузійного насичення заліза кобальтом, цирконієм, ураном і плутонієм взагалі відсутні. Експериментатори доходять висновку про неможливість одержання дифузійних шарів на залізі шляхом насичення його цими елементами за існуючими методиками хіміко-термічної обробки.

З наведеного аналізу літературних даних випливає висновок, що фазові перетворення в сплавах залізонасичуючий елемент відіграють вирішальну роль у формуванні дифузійних покриттів заліза. Вони є ініціаторами протікання дифузійних процесів, механізм впливу яких полягає, очевидно, не тільки у створенні вакансій, по яких з найменшими енергетичними затратами здійснюються елементарні акти міграції атомів у кристалічній ґратці, а й у виникненні в ній пружних спотворень, які формують дислокаційні трубки (тунельні ефекти), що і забезпечує проникнення атомів насичуючого елемента вглиб заліза. Все це потребує подальшого прискіпливого дослідження з метою накопичення експериментальних результатів та теоретичних обґрунтувань. Але вже і тепер цілком можливо за будовою діаграми станів двокомпонентної системи дати якісну оцінку процесу формування дифузійного шару при хіміко-термічній обробці металеві основи будь-яким елементом. Іншими словами – передбачити імовірний результат такої обробки.

Підсумок

Проведений огляд результатів теоретичних і експериментальних досліджень дифузії в металах і сплавах, дифузійного насичення заліза і його сплавів дає широку інформацію про роль твердофазних перетворень в дифузійних процесах. Перш за все слід відмітити той факт, що хіміко-термічна обробка заліза здійснюється досить великим числом елементів Періодичної системи, але стабільність процесу формування дифузійного шару спостерігається лише у випадку насичення деякими елементами. Цей результат дослідниками пояснюється впливом багатьох факторів, як, наприклад, різницею в розмірах атомних радіусів насичуючого елемента та заліза, електронною взаємодією, характером розчинності насичуючого елемента і хімічної взаємодії його з залізом та багатьма іншими. Однак з поля зору дослідників зникає питання впливу на дифузійні процеси в кристалічних системах природних поліморфних перетворень, хоча і є численні посилання на цей фактор. А саме він потребує досконалого дослідження, узагальнення і використання в технологічних схемах ХТО компактних і спікання порошкових матеріалів.

Поліморфні перетворення в залізі протікають під дією не тільки температури, але й, що є дуже суттєвим, в результаті зміни концентрації насичуючого елемента при умовно ізотермічному процесі дифузійного насичення.

Роль поліморфного перетворення в механізмі формування дифузійного шару особливо чітко простежується в процесі насичення його різними елементами при високочастотному нагріванні [21], коли за ду-

же короткі проміжки часу в процесі нагрівання заліза формується дифузійний шар значної товщини, а в подальшому зростання його підпорядковується закономірностям росту при пічному нагріванні. Але такого ефективного формування дифузійного шару насичуючим елементом не спостерігається при високочастотному нагріванні вольфраму, молібдену, ніобію та інших металів, які не володіють поліморфними перетвореннями.

Поверхнєве насичення заліза, як результат взаємодії різних за природою елементів, постійно веде до фазового перетворення (утворення і розпад твердих розчинів, хімічних і електронних сполук, впорядкування і розпорядкування твердих розчинів на основі чистих елементів і електронних сполук та ін.), що, в свою чергу, супроводжується виникненням потоку неврівноважених вакансій, які і забезпечують умови для дифузійного масопереносу в металах, бо, як витікає з порівняльної оцінки величини затрати енергії, на елементарний акт переміщення атома в кристал (табл.1), найменшому її значенню відповідає саме вакансійний механізм. Основним генератором некомпенсованих вакансій є все ж таки природні поліморфні перетворення в металах.

Надзвичайно важливою особливістю поліморфних металів є різна здатність їх модифікацій розчиняти в собі інші елементи. Як приклад, маємо різну розчинність елементів в α - і γ - модифікаціях заліза. В результаті $\gamma \rightarrow \alpha$ переходу кристалічна гратка α -заліза піддається пружним деформаціям, що також інтенсифікує переміщення атомів в кристалічній системі.

Отже, ефект поліморфних перетворень в металах лежить в основі дифузійних процесів і його необхідно використовувати в технологічних схемах одержання захисних покриттів та нових матеріалів з наперед заданими властивостями. Хоча сама фізична суть поліморфізму металів досі недостатньо зрозуміла.

Література

1. Мельник П.И. Диффузионное насыщение железа и твердофазные превращения в сплавах / П.И. Мельник. – М.: Металлургия, 1993. – 129 с.
2. Новик А. Аномалия в диффузии в металлах / А. Новик // Новости физики твердого тела. – 1973. – Т.2. – С. 23-29.
3. Vineyard G. H. Frequency factors in isotopic effects in Solid State rate process / G. H. Vineyard // Phys. Chem. Solids – 1957. – V.3, #1-2. – P. 121-127.
4. Zener C. J. Appl. Phys.– 1951. – V.22, #4. – P. 372-375.
5. Маннинг Дж. Кинетика диффузии атомов в кристаллах / Дж. Маннинг. – М.: Мир, 1971. – 251 с.
6. Мельник П.И. Анализ значений энергии активации элементарных актов термодиффузии в α -железе по различным механизмам / П.И. Мельник, В.М. Крамар // Защитные покрытия на металлах. – 1987.– В.21. – С. 1-5.

7. Бокштейн Б.С. Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах / Б.С. Бокштейн, С.З. Бокштейн, А.А. Жуховицкий. – М.: Металлургия, 1974. – 280 с.
8. Диффузия в металлах с ОЦК решеткой. – М.: Металлургия, 1969. – 416 с.
9. Бокштейн Б.С. Диффузия в металлах / Б.С. Бокштейн. – М.: Металлургия, 1978. – 248 с.
10. Вол А.Е. Строение и свойства двойных металлических систем. Т.1,2. – М.: Физматгиз, 1962.–982 с.
11. Минкевич А.Н. Химико-термическая обработка металлов и сплавов / А.Н. Минкевич. – М.: Металлургия, 1965. – 491 с.
12. Зайт В. Диффузия в металлах / В. Зайт. – М.: ИЛ, 1958. – 381 с.
13. Дубинин Г.Н. Диффузионное хромирование сплавов / Г.Н. Дубинин. – М.: Машиностроение, 1964. – 451 с.
14. Горбунов Н.С. Диффузионные покрытия на железе и стали / Н.С. Горбунов. – М.: Изд. АН СССР, 1958. – 206 с.
15. Металлизация сталей и сплавов в вакууме. Под ред. Е.И. Пономаренко. – К.: Техника, 1974. – 296 с.
16. Рябов В.Р. Алитирование стали / В.Р. Рябов. – М.: Металлургия, 1973. – 239 с.
17. Волобуев И.В. Ниобирование стали / И.В. Волобуев. – Харьков: Изд. Харьковского политехнического института, 1959. – Т. 21– С. 78-81.
18. Дубинин Г.Н. Диффузия в сталь из газовой фазы / Г.Н. Дубинин // ЖТФ – 1952. – Т. 22, №3. – С. 816-818.
19. Хачатурян А.Г. Теоретическое исследование энергии взаимодействия атомов внедрения, связанной с упругими искажениями кристаллической решетки / А.Г. Хачатурян // ФТТ. – 1967. – Т.9, №9. – С. 2861-2869.
20. Свойства элементов: Справочник. Ч.1. Физические свойства / Под ред. Г.В. Самсонова. – М.: Металлургия, 1976. – 600 с.
21. Мельник П.И. Диффузионное насыщение при высокочастотном нагреве / П.И. Мельник // Защитные покрытия на металлах. – 1984. – В.18. – С. 23-25.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 18.12.2011 р.
Рекомендовано до друку д.х.н., професором Фреїком Д.М.*

ROLE OF $\alpha \leftrightarrow \gamma$ TRANSFORMATION IN IRON IN THE FORMATION OF SURFACE LAYER ON IT

P. I. Melnyk

*Ivano-Frankivs'k University of Right by King Danylo Galytskyy;
76000, Ivano-Frankivs'k, Konovalets st., 35*

Conception of vacancy mechanism of forming of the alloyed superficial layer on iron is examined, being based on existence in him of natural polymorphic transformation of $\alpha \leftrightarrow \gamma$ at 910 °C.

Key words: *hard phase transformation, superficial layers, diffusion, power expenses, vacancy mechanism of diffusion.*

УДК 535.3. 535.5

ВЛАСНІ ТОЧКОВІ ДЕФЕКТИ І ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЦИНК ТЕЛУРИДУ

В. М. Чобанюк, Т. О. Паращук, Г. Я. Гургула, Н. Д. Фреїк

*Прикарпатського національного університету імені В. Стефаника;
фізико-хімічний інститут; 76018, м. Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57;
e-mail: freik@pu.if.ua*

Зроблено огляд основних фізико-хімічних властивостей цинк телуриду. Досліджено фазову діаграму рівноваги матеріалу. Представлено енергетичну структуру власних дефектів напівпровідника. Проведено розрахунок концентрацій точкових дефектів у нестехіометричному та самолегованому ZnTe.

Ключові слова: цинк телурид, точкові дефекти, енергія йонізації.

Зміст

Вступ

1. Фазова діаграма рівноваги Zn-Te.
2. Фізико-хімічні властивості цинк телуриду.
3. Дефектна підсистема нелегованого цинк телуриду.
4. Енергетична структура власних дефектів у ZnTe.
5. Нестехіометричні точкові дефекти у кристалах цинк телуриду.
 - 5.1. Нестехіометричний ZnTe.
 - 5.2. Процеси самолегкування.
 - 5.3. Результати та їх обговорення.

Висновки

Література

Вступ

Дослідження широкозонних напівпровідникових кристалів типу A^2B^6 в багатьох випадках обумовлене складністю отримання низькоомних зразків р- і n-типу провідності через ефекти самокомпенсації і неконтрольованого впливу дефектів на кристалічну структуру.

На основі напівпровідників типу A^2B^6 реалізовано цілий ряд пристроїв і приладів. Це, зокрема, світлодіоди і лазери, які працюють у області ближнього інфрачервоного і видимого діапазону, оптичні фільтри, сонячні елементи і давачі рентгенівського і гамма випромінювання, електрооптичні сенсори з високою чутливістю для когерентного детектування в області частот вищих 30 ТГц [1].

Важливим як з модельної, так і з практичної точки зору представником групи A^2B^6 є цинк телурид, який відноситься до широкозонних напівпровідників. ZnTe є перспективним матеріалом для сучасної оптоелектроніки, акустoeлектроніки і лазерної техніки [3]. Зокрема, цей напівпровідник широко застосовується при виготовленні вікон сонячних елементів, електролюмінісцентних діодів, діелектричних фільтрів. Та-

кож, ZnTe виступає в якості бар'єрного матеріалу при створенні низькорозмірних структур різного роду (квантових точок, квантових ям, надграток), на основі напівпровідникових сполук типу A^2B^6 [5].

Однак широке застосування цинк телуриду на сьогодні неможливе через значні технологічні труднощі отримання цієї сполуки з контрольованими електрофізичними параметрами, що визначаються різного роду дефектами кристалічної ґратки.

Метою даної роботи є огляд основних фізико-хімічних властивостей цинк телуриду, обчислення концентрації точкових дефектів у нестехіометричному та самолегованому ZnTe, а також представлення енергетичної структури власних дефектів матеріалу.

1. Фазова діаграма рівноваги Zn-Te

Одним з найважливіших питань дослідження нестехіометричності монокристалів, зокрема напівпровідників типу A^2B^6 , є вивчення залежностей температури і тиску цих матеріалів. Цю інформацію містять P-T-X (тиск-температура-склад) фазові діаграми. Для системи Zn-Te, T-X проекції P-T-X діаграми досліджувалися у роботі [8]. P-T проекції цієї діаграми вивчалися шляхом візуального спостереження точок плавлення (ZnTe + Te) і (ZnTe + Zn) зразків у запаяних кварцових ампулах, розміщених у двотемпературній печі [11]. У цій же роботі повідомляється про розрахунок тиску пари уздовж лінії ліквідусу та оцінка лінії солідусу в системі Zn-Te.

Діаграма стану системи Zn-Te представлена на рис. 1. В системі присутня одна сполука ZnTe, яка плавиться конгруентно при 1512 К [6] і утворює вироджені евтектики зі своїми компонентами. Згідно даних роботи [7] температура плавлення ZnTe складає 1568 К. У роботі [6] повідомляється про те, що в системі ZnTe наявне відхилення від стехіометрії в бік надлишку телуру до 50,02 ат. %, що відповідає $\sim 10^{18}$ ат/см³ [8]. Крім того, слід зауважити, що згідно даних [9] виявлено також помітну нестехіометрію на боці надлишку цинку [10]. Це означає, що ZnTe, у досліджуваному інтервалі температур, є двосторонньою, а не односторонньою фазою, як вважалося раніше згідно результатів електрофізичних вимірювань [8].

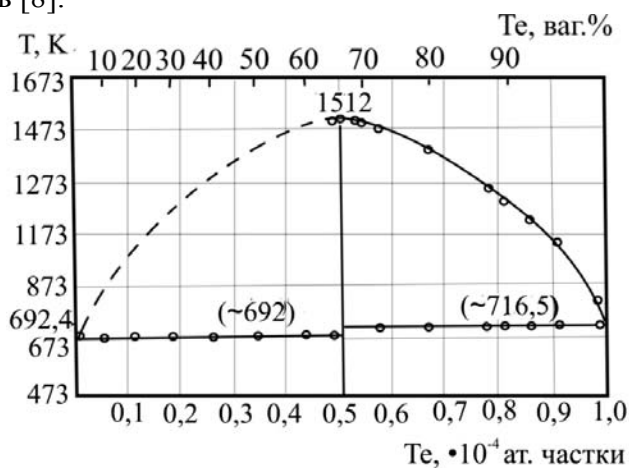


Рис.1. T-X-діаграма рівноваги системи Zn-Te]

За квазірівноважних умов росту цих кристалів далеко не завжди забезпечується пряма залежність їх фізичних властивостей від складу, оскільки внаслідок ретроградного характеру лінії солідусу на перетині Т-х фазової діаграми (рис. 2) концентрація вільних носіїв визначається важкоконтрольованою взаємодією стехіометричних дефектів і легуючих (фоонових) домішок.

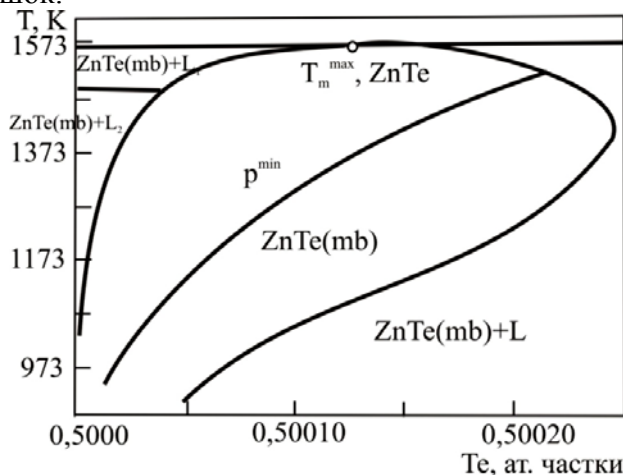


Рис.2. Фазова Т-Х-діаграма рівноваги для області гомогенності сполуки цинк телуриду [4]

Р-Т проекція системи Zn-Te представлена на рис. 3 [11]. Експериментальні точки визначають рівновагу фаз VLS (газ + Zn-насичений розплав + Zn-насичений ZnTe), SLV (Te-насичений ZnTe + Te-насичений розплав + газ) і конгруентної сублимації ($S = V$). На рис.3, також подаються дані про рівновагу системи рідина-газ для чистого Zn і Te згідно [15], [16] та високотемпературних вимірювань області плавлення ZnTe [14]. Форма Р-Т проекції аналогічна Р-Т проекції системи Cd-Te [13]. Область сублимації нестехіометричної фази ZnTe відповідає рівновазі трьох фаз: криві VLS, SLV і крива мінімального тиску газу $S = V$ (послідовність фаз у трифазних рівновагах відповідає збільшенню концентрації Te). Тиск пари на кривій VLS, виміряний до 760 мм. рт. ст., нічим не відрізняється від тиску насиченої пари чистого Zn. Це явище підтвердили автори роботи [12] для температур менших 1473 К. Чисельна апроксимація експериментальних даних показала, що газ у цій рівновазі є майже чистим цинком [11]. На кривій SLV тиск пари збігається з чистим Te приблизно до 1073 К. При більш високих температурах крива SLV змінюється слабше, ніж $L(\text{Te})V$ і проходить через максимум при температурі близько 1373 К. Розрахунок складу газу X_V показав, що при низьких температурах це майже чистий Te, у той час як при 1080°C $X_V \cong 99,02\%$ Te.

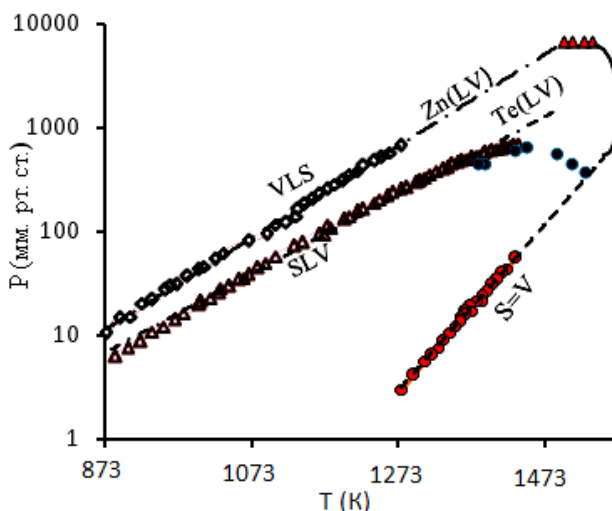
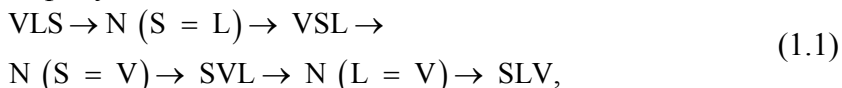


Рис.3. P-T проекція фазової діаграми системи Zn-Te. Незаповнені символи (VLS, SLV, і S=V): експериментальні результати [11]; заповнені символи: [12]; суцільна лінія: розрахунки [14]

Геометричний аналіз фазової рівноваги є результатом наступної послідовності фаз у системі Zn-Te:



де N – інваріантна точка для відповідних конгруентних процесів (плавлення, сублімації і випаровування). Відносне розташування точок у фазовому P-T-X просторі полягає в наступному:

$$\begin{aligned} P (\text{L} = \text{V}) &< P (\text{S} = \text{V}) < P (\text{S} = \text{L}), \\ T (\text{L} = \text{V}) &< T (\text{S} = \text{V}) < T (\text{S} = \text{L}) < T_{\max}, \\ X (T_{\max}) &< X (T (\text{S} = \text{L})) < X (T (\text{S} = \text{V})) < X (T (\text{L} = \text{V})). \end{aligned} \quad (1.2)$$

Максимальна нестехіометрія у ZnTe була визначена в точці фазового переходу $\text{VLS} \rightarrow \text{VS}$ (максимальна розчинність Zn), аналогічно до CdTe [13]. Склад кристалу розраховувався як різниця між масами Zn і Te в початковому зразку і в газоподібному стані у точці фазового переходу. Для розрахунку випарованої маси необхідними є значення парціальних тисків всіх видів газів. Газоподібна фаза в системі Zn-Te складається з $\text{Zn}(\text{g})$ і полімерів телуру – Te_n , $n = 1-7$. Щоб визначити всі парціальні тиски (а, отже, склад пари X_V), використовувалися константи рівноваги реакції полімеризації Te спільно з енергією Гіббса ZnTe, яка вважалася незмінною при $T = \text{const}$ у нестехіометричному матеріалі.

2. Фізико-хімічні властивості цинк телуриду

Для ZnTe характерне існування трьох поліморфних модифікацій: до 8,9-9,5 ГПа – кубічної (сфалерит F43m), вище 8,9-9,5 ГПа – тригональної (кіновар P3₁21) і вище 11,5-13 ГПа – орторомбічної (Cmcm) [23]. Однак, структура кіноварі в ZnTe зберігає координаційне число $z=4$, так як у початковій кубічній фазі, на відміну від деяких інших напівпровідників A^2B^6 [23]. Параметр ґратки кубічної модифікації

ZnTe $a = 6,089 \text{ \AA}$ [16], відстань Zn-Te – $2,64 \text{ \AA}$, Zn-Zn – $4,32 \text{ \AA}$ [18]. Стала ґратки залежить від температури наступним чином (0-450 C°) :

$$a = 6,1015 + 5,157 \cdot 10^{-5}T + 8,2728 \cdot 10^{-9}T^2$$

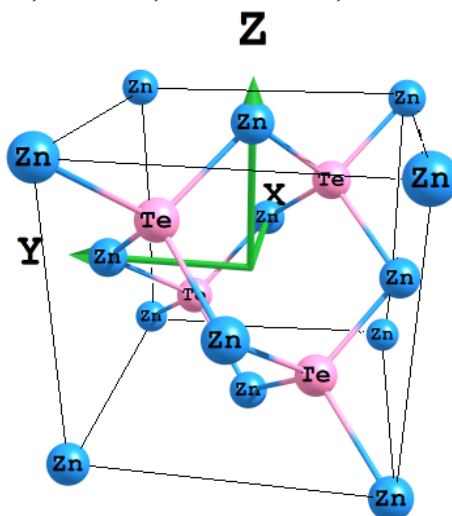


Рис.4. Структура сфалеритної модифікації ZnTe

Структура кіноварі ZnTe при кімнатній температурі і тиску $p=8,9 \text{ ГПа}$ має параметри ґратки: $a=4,105 \text{ \AA}$, $c=9,397 \text{ \AA}$ [21]. Згідно ab-initio розрахунків, параметри орторомбічної вюрцитної модифікації ZnTe при кімнатній температурі і тиску $p=15,7 \text{ ГПа}$ складають: $a=5,379 \text{ \AA}$, $b=5,971 \text{ \AA}$, $c=5,010 \text{ \AA}$ [21].

Густина цинк телуриду складає – $5,636 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$; твердість за шкалою

Мооса – 3,0; різниця електронегативностей дорівнює 0,7 [6]. Для цинк телуриду встановлено критичний тиск фазового переходу, який дорівнює 140-150 кбар. Тиск пари телуриду цинку в температурному інтервалі 500-720 °C може бути розрахований за формулою:

$$\lg P (\text{мм.рт.ст.}) = \frac{10627}{T} + 9,539. \quad (1.3)$$

Теплота сублімації телуриду рівна $131,6 \text{ кДж/моль}$ [25], енергія дисоціації ZnTe складає 118 кДж/моль [25].

Цинк телурид виготовляється сплавленням компонентів в кварцевих вакуумних ампулах (покритих всередині графітом) або синтезом із парової фази. Термодинамічні константи реакції:

$$\Delta G = -115,2 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}} [26], \Delta S_{298}^0 = 77,82 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}} [26].$$

Згідно літературних даних [27], [31], ZnTe характеризується провідністю р-типу, що пояснюється надлишком телуру. У роботі [28] повідомляється про отримання кристалів n-типу з темновим питомим опором при кімнатній температурі від 10^5 до $10^7 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ і рухливості електронів

при освітленні порядку $340 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$. Рівноважна концентрація дірок, виміряна на зразках ZnTe при температурі 700-950 °С і тиску пари цинку 10-400 мм. рт. ст., змінюється в залежності від тиску пари цинку і температури [6]. Рухливість дірок в ZnTe змінюється пропорційно $T^{-1,5}$ і дорівнює $300 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$; діелектрична проникність рівна 18,6; теплопровідність – $34 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кал}}{\text{см} \cdot \text{с} \cdot \text{К}}$ [28].

Таблиця 1. Фізико-хімічні параметри цинк телуриду

Фізична величина	Значення	Література
Стала ґратки, Å	Модифікації:	[16]
	• кубічна $a=6,098$;	[21]
	• тригональна $a=4,105$, $c=9,397$;	[21]
	• орторомбічна $a=5,379$, $b=5,971$, $c=5,010$	[21]
Густина, $\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	5,636	[6]
Твердість по шкалі Мооса	3,0	[6]
Різниця електронегативностей	0,7	[6]
Теплота сублімації телуриду, кДж/моль	131,6	[25]
Енергія дисоціації, кДж/моль	118	[25]
Рухливість електронів, $\frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$	340	[28]
Рухливість дірок, $\frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$	300	[28]
Діелектрична проникність	18,6	[28]
Теплопровідність – $\frac{\text{кал}}{\text{см} \cdot \text{с} \cdot \text{К}}$	$34 \cdot 10^{-3}$	[28]
Ширина забороненої зони, еВ ($T=293 \text{ K}$)	2,12	[28]
	2,06	[29]
Магнітна сприйнятливість	$1,98 \cdot 10^{-6}$	[30]
Ефективна маса	0,6m	[28]
Коефіцієнти п'єзоопору	$M_{11}=12,6$, $M_{12} = 4,24$, $M_{44}=32$	[28]

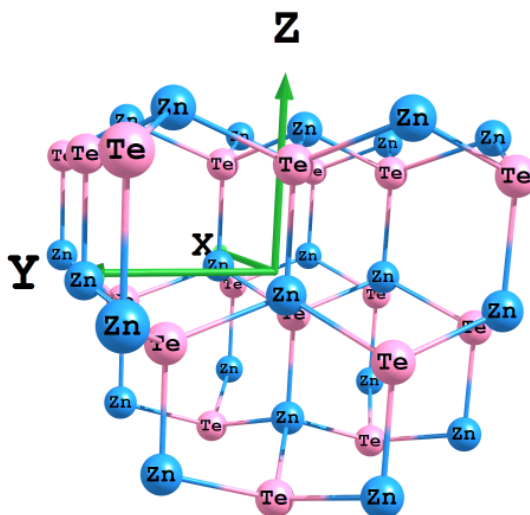


Рис.5. Структура вюрцитної модифікації ZnTe

Ширина забореної зони ZnTe була визначена із результатів вимірювання температурної залежності електропровідності на високоомному матеріалі, отриманому шляхом легування індієм [28]. Ширина забореної зони, визначена оптичними методами, при кімнатній температурі складає 2,06 еВ [29].

Дослідження температурної залежності об'ємної магнітної сприйнятливості монокристалів цинк телуриду стехіометричного складу в інтервалі 293-600 К показало, що при кімнатній температурі магнітна сприйнятливість рівна $1,98 \cdot 10^{-6}$ і не залежить від температури [30]. Дослідження магнітної сприйнятливості пресованих зразків цинк телуриду дало величини в кілька разів менші, ніж для монокристалів [30].

Із результатів дослідження температурних залежностей холлівських рухливостей, проведених у роботі [28], було розраховано значення ефективної маси $0,6m$ та константи зв'язку для міжзонного розсіювання $S_4 = 15 - 20$ еВ. Дані авторів [28] представлені на рис. 6. Величину ефективної маси дірок оцінювали шляхом співставлення експериментальних даних холлівських рухливостей з теоретичними значеннями, які обчислювалися на основі розгляду різних механізмів розсіювання. Проте отримане таким чином значення ефективної маси у цій же роботі піддається сумніву.

Стала Холла для стехіометричних легованих селеном зразків, має додатній знак і монотонно зменшується з підвищенням температури. Для ZnTe відмічена асиметрія електричних властивостей [30].

Характер температурної залежності в'язкості і електропровідності сплавів системи телур-цинк в області концентрацій 20-70 ат. % Te в інтервалі температур 1553-1673 К дозволяє зробити висновки про збереження у цинк телуриді при плавленні гомеоплярних зв'язків.

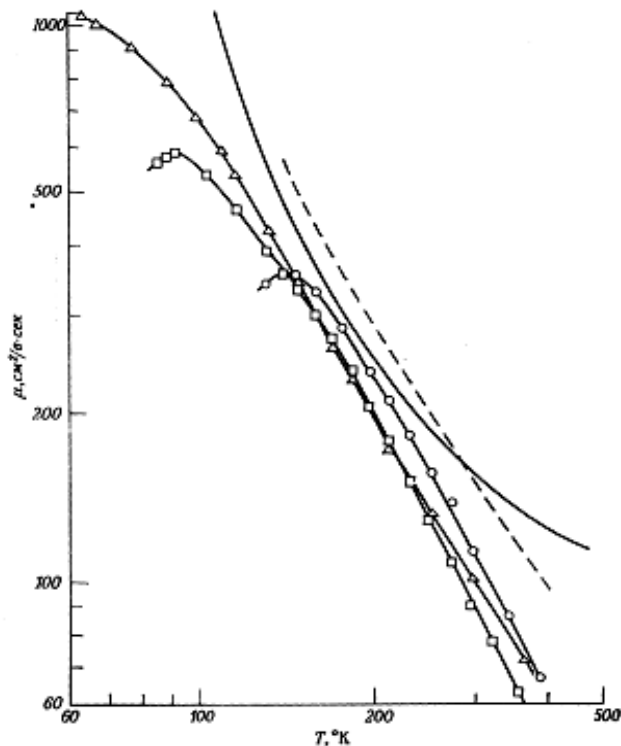


Рис.6. Температурна залежність холлівської рухливості двох нелегованих (○ і □) і легованих сріблом Δ кристалів ZnTe [28]

Із досліджень, проведених у роботі [28], були виміряні коефіцієнти п'єзоопору ZnTe-типу при кімнатній температурі. Використавши ці дані, а також значення констант пружності, автори [28] обчислили коефіцієнти п'єзоопору $M_{11}=12,6$, $M_{12} = 4,24$ і $M_{44}=32$. Ці результати підтверджуються моделлю виродженої валентної зони, яка характерна для цинк телуриду.

3. Дефектна підсистема нелегованого цинк телуриду

На практиці, як правило, кристали використовуються у нерівноважних умовах при кімнатних і більш низьких температурах. Для того, щоб прогнозувати властивості таких кристалів і керувати ними, необхідні знання концентрації власних дефектів, а також їх вплив на енергетичну структуру.

Якщо цинк телурид отримати шляхом витягування із розплаву при 1573 K і тиску пари 10^5 Па, то у кристалі спостерігаються включення телуру. Вказані дефекти зникають при нагріванні кристалів до 1373 K в атмосфері гелію і парі ZnTe, однак подальше нагрівання і швидке охолодження знову призводять до їх утворення. Цей процес пояснюється тим, що при підвищенні температури відбувається випаровування цинку, що, в свою чергу, є причиною утворення вакансій цинку. Описане явище підсилюється при підвищенні тиску пари телуру і зменшується при підвищенні тиску пари цинку.

В процесі охолодження вакансії цинку коагулюють, приводячи до осадження частинок телуру вздовж ліній дислокацій. Якщо кристали

охолоджувати повільно при низькому тиску пари телуру, то вакансії дифундують до поверхні кристалів, і частинки телуру випаровуються. Очевидно, такий же механізм зникнення атомів телуру в процесі відпаду [6].

Власними акцепторними дефектами у ZnTe являються двократно заряджені вакансії цинку, що обумовлює відхилення складу сполуки ZnTe від стехіометрії у сторону телуру. Концентрація вакансій залежить від парціального тиску компонентів. Збільшення парціального тиску телуру зазвичай призводить до збільшення концентрацій вакансій цинку. Найменша концентрація носіїв струму в зразках ZnTe-типу була досягнена після прогрівання кристалів ZnTe при температурі 1273K у розплавленому цинку і складала 10^{14} - 10^{15} ат/см². Енергія утворення двократно заряджених вакансій цинку складає 3,95 eV [6].

Також, у роботі [6] повідомляється про те, що було синтезовано ZnTe n-типу. Матеріал отримали під тиском аргону (P=30-50 ат) із елементів з надлишком цинку 20%. Розплав охолоджували за методом Бріджмена від температури 1553 K до 1373 K протягом 5 год з наступним закалюванням у маслі. Отримані кристали характеризуються опором порядку 10^6 - 10^7 Ом·см і рухливістю електронів до $350 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$ [6].

Дослідження температурної залежності рухливості ZnTe показало, що в області температур від 100 до 1000 K величина рухливості пропорційна $T^{-1,5}$. Таким чином, у вказаному інтервалі температур домінує розсіювання на акустичних фонах, що свідчить про те, що хімічний зв'язок в ZnTe має, в основному, ковалентний характер.

4. Енергетична структура власних дефектів у ZnTe

Будучи прямозонним напівпровідником, ZnTe має високу фоточутливість і може з успіхом застосовуватися для ефективного перетворення сонячної енергії [31].

Як уже зазначалося, нелегований цинк телурид характеризується р-типом провідності, тому інформації про донорні рівні у зонній структурі напівпровідника небагато. Згідно високотемпературних досліджень ефекту Холла і провідності, домінуючий акцепторний дефект повинен бути двозарядний, наприклад V_{Zn}^{2-} або Te_i^{2-} [31]. Проте дані щодо самодифузії компонентів свідчать про нейтральність Te_i . Отже, в енергетичному інтервалі від E_v до $E_g/2$ слід шукати енергії йонізації тільки двозарядних і однозарядних вакансій цинку, а також їх комплексів.

На основі результатів дослідження фотопровідності (ФП) та фотолюмінесценції (ФЛ) у легованому алюмінієм цинк телуриді, було визначено два акцепторних рівні $E_v+0,25$ eV і $E_v+(0,6-0,65)$ eV. Інтенсивність люмінесценції збільшувалася при термічній обробці кристалів у парах телуру і зменшувалася при такій же обробці в парах цинку. Виходячи з цього можна зробити висновок, що згадані рівні обумовлені або вакансіями цинку або їх комплексами.

Таблиця 2. Енергетичні рівні власних дефектів у ZnTe

Тип дефекту	Енергетичне розташування рівня, еВ	Метод визначення	Література
V_{Zn}^0	$E_v+0,45$	Термостимульовані струми (ТС), індукована домішкова ФП	[34]
V_{Zn}^-	$E_v-0,106$	Фото-ЕПР, ФЛ	[32]
	$E_v+0,26$	ТС, індукована домішкова ФП	[34]
V_{Zn}^{2-}	$E_v+0,400$	Фото-ЕПР, ФЛ	[32]
V_{Te}^+	$E_v+0,729$	Фото-ЕПР, ФЛ	[32]
V_{Te}^{2+}	$E_v+0,212$	Фото-ЕПР, ФЛ	[32]

У роботі [32], на основі аналізу загальних закономірностей у зміні спектрів фотостимульованого електронного парамагнітного резонансу (фото-ЕПР) та ФЛ для ряду сполук $A^{II}B^{VI}$ запропоновано модель розміщення енергетичних рівнів вакансій у ZnTe: $V_{Te}^+ - E_v+0,729$ еВ, $V_{Te}^{2+} - E_v+0,212$ еВ, $V_{Zn}^- - E_v-0,106$ еВ, $V_{Zn}^{2-} - E_v+0,400$ еВ.

Дещо інше значення енергії йонізації двократно йонізованої вакансії цинку наведено у [32]: $E_v+0,7$ еВ. А у роботі [34] вакансії цинку у станах V_{Zn}^0 , V_{Zn}^- приписано рівні $E_v+0,45$ еВ і $E_v+0,26$ еВ відповідно.

У плівках ZnTe з власними дефектами, проте авторами не уточнено з якими конкретно, пов'язують рівні із енергіями активації відповідно $E_1=(0,21\pm 0,01)$ еВ, $E_2=(0,58\pm 0,02)$ еВ [34].

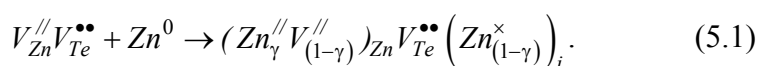
Аналіз температурної залежності ЕП, проведений у [34], показує, що в області кімнатних температур вона визначається глибокими центрами з енергією активації $\sim 0,88$ еВ [34], що за даними авторів відповідає енергії йонізації атомів купруму і вакансій цинку.

5. Нестехіометричні точкові дефекти у кристалах цинк телуриду

5.1. Нестехіометричний ZnTe

Кристалоквазіхімічні формули дають можливість описувати дефектний стан сполуки із нестехіометрією в області гомогенності. В основу методу покладено поняття про антиструктуру [37], якою для цинк телуриду є $V_{Zn}^{//}V_{Te}^{**}$, де $V_{Zn}^{//}$ і V_{Te}^{**} – двозарядна негативна вакансія цинку і двозарядна позитивна вакансія телуру. При цьому здійснюється суперпозиція кристалохімічної формули досліджуваної сполуки $Zn_{Zn}^xTe_{Te}^x$ із кристалоквазіхімічним кластером.

Кристалоквазіхімічне представлення легуючого кластера для n-ZnTe (надлишок цинку у границях області гомогенності), за умови часткового (γ) заміщення цинком вакансій у катіонній підгратці ($Zn_{Zn}^{//}$) і утворення міжвузлового цинку (Zn_i^x), описується як



Тут Zn_{Zn}^{\times} , Te_{Te}^{\times} – цинк і телур у вузлах кристалічної ґратки, “ \times ” – нейтральний заряд, α – мольна частка легуючого компонента, e' – концентрація електронів.

Кристалоквазіхімічна формула:

$$(1-\alpha)Zn_{Zn}^{\times}Te_{Te}^{\times} + \alpha \left(Zn_{\gamma}^{//} V_{(1-\gamma)}^{//} \right)_{Zn} V_{Te}^{\bullet\bullet} \left(Zn_{(1-\gamma)}^{\times} \right)_i \rightarrow \\ \rightarrow \left(Zn_{\gamma\alpha+1-\alpha}^{\times} V_{\alpha(1-\gamma)}^{//} \right)_{Zn} \left(Te_{(1-\alpha)}^{\times} V_{\alpha}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Zn_{\alpha(1-\gamma)(1-\delta)}^{\bullet} \right)_{Zn} Z_{\alpha\delta(1-\gamma)}^{\bullet\bullet} h_i + \\ (5.2) \alpha (\gamma + \delta - \delta\gamma + 1) e'$$

де h_i – концентрація дірок. Зауважимо, що тут враховано диспропорціонування (δ) зарядового стану міжвузлового Цинку Zn_i^{\times} :

$$Zn_i^{\times} \rightarrow \left(Zn_{\alpha(1-\gamma)(1-\delta)}^{\bullet} \right)_{Zn} Z_{\alpha\delta(1-\gamma)}^{\bullet\bullet} + (1 + \delta) e'$$

У хімії вигідно використовувати мольні частки – кількість дефектів, які припадають на один моль речовини. Але у зонній моделі концентрацію електронів і дірок виражають числом частинок в одиниці об'єму, тобто приймають у вигляді дійсних концентрацій. Враховуючи цю обставину, виразимо концентрацію дефектів (N) через їхні мольні частки (β). Концентрація дефектів визначатиметься залежностями:

$$\left[V_{Zn}^{//} \right] = A\alpha(1-\gamma), \left[Zn_i^{\bullet} \right] = A\alpha(1-\gamma)(1-\delta); \left[V_{Te}^{\bullet\bullet} \right] = A\alpha; \\ \left[Zn_i^{\bullet\bullet} \right] = A\alpha\delta(1-\gamma); n = A\alpha(\gamma + \delta - \delta\gamma + 1), n_H = |n - p|. \quad (5.3)$$

У нашому випадку рівняння електронейтральності матиме вигляд:

$$2 \left[V_{Zn}^{//} \right] + n = \left[V_{Te}^{\bullet} \right] + \left[Zn_i^{\bullet} \right] + 2 \left[Zn_i^{\bullet\bullet} \right] + p, \quad (5.4)$$

а холлівська концентрація носіїв струму з врахуванням (5.3) і (5.4)

$$n_H = 2 \left[V_{Te}^{\bullet\bullet} \right] + \left[Zn_i^{\bullet} \right] + 2 \left[Zn_i^{\bullet\bullet} \right] - 2 \left[V_{Zn}^{//} \right]. \quad (5.5)$$

Тут $A = \frac{2Z}{a^3}$, Z – число структурних одиниць (молекул) в елементарній комірці ($Z=4$).

Аналогічно, кристалоквазіхімічний кластер р-ZnTe (надлишок телуру у межах області гомогенності):

$$V_{Zn}^{//} V_{Te}^{\bullet\bullet} + \frac{1}{2} Te_2 \rightarrow V_{Zn}^{//} \left(Te_{\chi}^{\bullet\bullet} V_{1-\chi}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Te_{1-\chi}^{\times} \right)_i. \quad (5.6)$$

Накладання кластера (5.6) на кристалохімічну формулу ZnTe за умови, що спектр точкових дефектів містить двозарядні вакансії цинку $V_{Zn}^{//}$, двозарядні вакансії телуру $V_{Te}^{\bullet\bullet}$ і двозарядні міжвузлові атоми телуру $\left[Te_i^{//} \right]$ дасть наступний результат:

$$(1-\beta)Zn_{Zn}^{\times}Te_{Te}^{\times} + \beta V_{Zn}^{//} \left(Te_{\chi}^{\bullet\bullet} V_{1-\chi}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Te_{1-\chi}^{\times} \right)_i \rightarrow \\ \left(Zn_{(1-\beta)}^{\times} V_{\beta}^{//} \right)_{Zn} \left(Te_{1-\beta+\beta\chi}^{\times} V_{\beta(1-\chi)}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Te_{\beta(1-\chi)}^{//} \right)_i + \beta(1+\chi) e'. \quad (5.7)$$

Тут β – відхилення від стехіометричного складу в бік телуру, χ –

частка атомів телуру у міжвузлях. Концентрація дефектів при цьому буде: $[V_{Zn}^{//}] = A\beta$; $[Te_i^{//}] = A(1-\chi)$;

$$[V_{Te}^{**}] = A(1-\chi); p = A\beta(1+\chi). \quad (5.8)$$

Рівняння електронейтральності матиме вигляд:

$$2[V_{Zn}^{//}] + 2[Te_i^{//}] + n = p + 2[V_{Te}^{**}], \quad (5.9)$$

а холлівська концентрація:

$$n_H = 2[V_{Te}^{**}] - 2[V_{Zn}^{//}] - 2[Te_i^{//}] \quad (5.10)$$

5.2. Процеси самолегкування

Для випадку кристалів n-ZnTe:Te накладання кластера (5.6) на кристалоквазіхімічну формулу n-ZnTe (5.2) за умови, що спектр точкових дефектів містить двозарядні вакансії цинку $V_{Zn}^{//}$, двозарядні вакансії телуру V_{Te}^{**} , однозарядні Zn_i^\bullet і двозарядні Zn_i^{**} міжвузлові атоми цинку, дасть наступний результат:

$$(1-x) [(Zn_{\gamma\alpha+1-\alpha}^\times V_{\alpha(1-\gamma)}^{//})_{Zn} (Te_{(1-\alpha)}^\times V_{\alpha}^{**})_{Te} (Zn_{\alpha(1-\gamma)(1-\delta)}^\bullet Zn_{\alpha\delta(1-\gamma)}^{**})_i + \alpha(\gamma + \delta - \delta\gamma + 1)e'] + x(V_{Zn}^{//} Te_{Te}^{**}) \rightarrow \\ (Zn_{(\gamma\alpha+1-\alpha)(1-x)}^\times V_{\alpha(1-\gamma)(1-x)+x}^{//})_{Zn} (Te_{(1-\alpha)(1-x)+x}^\times V_{\alpha(1-x)}^{**})_{Te} \\ (Zn_{\alpha(1-\gamma)(1-\delta)(1-x)}^\bullet Zn_{\alpha\delta(1-\gamma)(1-x)}^{**})_i + \alpha(\gamma + \delta - \delta\gamma + 1)(1-x)e' + 2xh^\bullet, \quad (5.11)$$

де x – атомна частка надлишкового телуру, α – мольна частка легуючого компонента, γ – частка атомів цинку у катіонних вузлах, δ – диспропорціонування зарядового стану міжвузлового цинку Zn_i^\times , e' – концентрація електронів, h^\bullet – концентрація дірок.

Концентрація дефектів визначатиметься залежностями:

$$[V_{Te}^{**}] = A\alpha(1-x); [V_{Zn}^{//}] = A(\alpha(1-\gamma)(1-x) + x); \\ [Zn_i^\bullet] = A\alpha(1-\gamma)(1-\delta)(1-x); [Zn_i^{**}] = A\alpha\delta(1-\gamma)(1-x); p = 2Ax; \\ n = A\alpha(\gamma + \delta - \delta\gamma + 1)(1-x). \quad (5.12)$$

Рівняння електронейтральності матиме вигляд:

$$2[V_{Zn}^{//}] + n = 2[V_{Te}^{**}] + [Zn_i^\bullet] + 2[Zn_i^{**}] + p, \quad (5.13)$$

а холлівська концентрація носіїв

$$n_H = 2[V_{Te}^{**}] + [Zn_i^\bullet] + 2[Zn_i^{**}] - 2[V_{Zn}^{//}] \quad (5.14)$$

Для кристалів p-ZnTe:Zn, накладаючи кластер $Zn_{Zn}^{//}V_{Te}^{**}$ на кристалоквазіхімічну формулу p-ZnTe (5.7), за умови, що спектр точкових дефектів містить двозарядні вакансії цинку $V_{Zn}^{//}$, двозарядні вакансії телуру V_{Te}^{**} та двозарядні міжвузлові атоми телуру $Te_i^{//}$, отримаємо:

$$\begin{aligned}
 & (1-y) \left\{ \left(Zn_{(1-\beta)}^{\times} V_{\beta}^{\prime\prime} \right)_{Zn} \left(Te_{1-\beta+\beta\chi}^{\times} V_{\beta(1-\chi)}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Te_{\beta(1-\chi)}^{\prime\prime} \right)_i + \beta(1+\chi) e' \right\} \\
 & \quad + y \left(Zn_{Zn}^{\prime\prime} V_{Te}^{\bullet\bullet} \right) \rightarrow \\
 & \rightarrow \left(Zn_{(1-\beta)(1-y)+y}^{\times} V_{\beta(1-y)}^{\prime\prime} \right)_{Zn} \left(Te_{(1-\beta+\beta\chi)(1-y)}^{\times} V_{\beta(1-\chi)(1-y)+y}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Te_{\beta(1-\chi)(1-y)}^{\prime\prime} \right)_i + \\
 & \quad + \beta(1+\chi)(1-y) h^{\bullet} + 2y e' .
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

Концентрації дефектів будуть рівні:

$$\begin{aligned}
 & \left[Te_i^{\prime\prime} \right] = A\beta(1-\chi)(1-y); \quad \left[V_{Zn}^{\prime\prime} \right] = A\beta(1-y); \\
 & \left[V_{Te}^{\bullet\bullet} \right] = A(\beta(1-\chi)(1-y) + y); \quad p = A\beta(1+\chi)(1-y); \quad n = 2Ay .
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Рівняння електронейтральності матиме вигляд:

$$2 \left[V_{Zn}^{\prime\prime} \right] + 2 \left[Te_i^{\prime\prime} \right] + n = 2 \left[V_{Te}^{\bullet\bullet} \right] + p , \tag{5.17}$$

а холлівська концентрація:

$$n_H = \left| 2 \left[V_{Te}^{\bullet\bullet} \right] - 2 \left[V_{Zn}^{\prime\prime} \right] - 2 \left[Te_i^{\prime\prime} \right] \right| . \tag{5.18}$$

5.3. Результати та їх обговорення

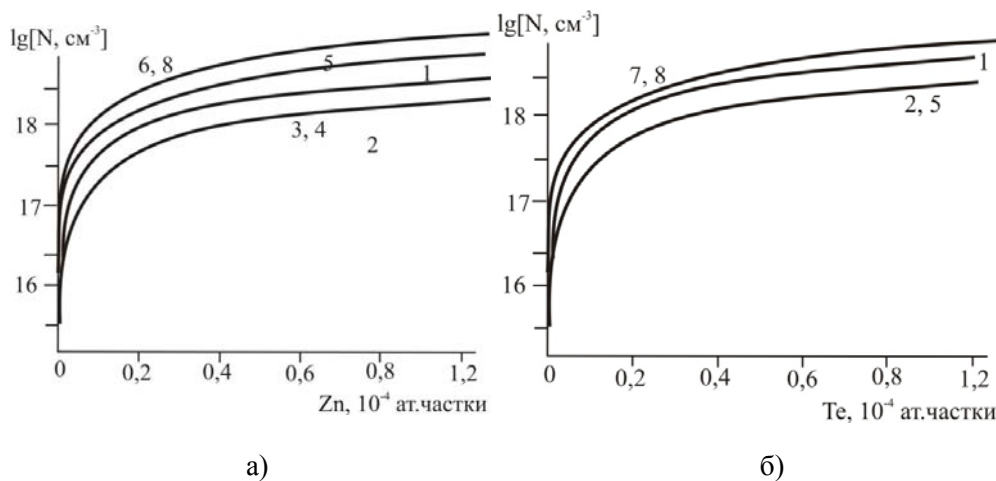


Рис. 7. Залежність концентрації переважаючих дефектів: $V_{Zn}^{\prime\prime}$ (1), $Te_i^{\prime\prime}$ (2), Zn_i^{\bullet} (3), $Zn_i^{\bullet\bullet}$ (4), $V_{Te}^{\bullet\bullet}$ (5), основних носіїв n (6), p (7) та холлівської концентрації n_H (8) у n -ZnTe (а) та в p -ZnTe (б) від відхилення від стехіометрії

З отриманих кристалоквазіхімічних формул (5.1)-(5.18) можна визначити не тільки переважаючі типи точкових дефектів, але і залежності їх концентрацій від хімічного складу – величини відхилення від стехіометрії (α , β), вмісту легуючих елементів (Zn, Te) відповідно. Результати проведених розрахунків наведено на рис.7-8. Так, зокрема, для кристалів n -ZnTe, домінуючими дефектами в яких є вакансії телуру ($V_{Te}^{\bullet\bullet}$) та міжвузлові атоми цинку (Zn_i^{\bullet} , $Zn_i^{\bullet\bullet}$), із збільшенням відхилення від стехіометрії (α) відбувається зростання усіх типів точкових дефектів та носіїв заряду (рис. 7,а). Для кристалів p -ZnTe, в якому домінують двозаряд-

дні вакансії цинку ($V_{Zn}^{//}$) і телуру ($V_{Te}^{••}$) та міжвузлові атоми телуру ($Te_i^{//}$), збільшення відхилення від стехіометрії в сторону телуру (β) обумовлює зростання концентрації всіх дефектів та холлівської концентрації (рис. 7,б).

Кристали n-ZnTe само леговані телуrom (рис. 8, а) при незначному вмісті телуру (менше $0,42 \cdot 10^{-4}$ ат.%) володіють n-типом провідності, за який відповідальними є двозарядні вакансії телуру ($V_{Te}^{••}$). Із збільшенням концентрації телуру відбувається повільне зменшення концентрації вакансій телуру ($V_{Te}^{••}$) (рис.8,а, крива – 2) за рахунок їх “заліковування”. При цьому зростає концентрація вакансій цинку ($V_{Zn}^{//}$) (рис.8,а – крива 1) і їх внесок у провідність матеріалу є домінуючим. При збільшенні вмісту телуру концентрація електронів зменшується, відбувається конверсія провідності матеріалу з n- на р-тип і подальше зростання дірок (рис.8,а).

Аналогічно для кристалів p-ZnTe, самолегованих цинком (рис.8,б) при незначній концентрації (менше $0,3 \cdot 10^{-4}$ ат. частки) зберігається р-тип провідності, відповідальними за який є двозарядні вакансії цинку ($V_{Zn}^{//}$) та міжвузлові атоми телуру ($Te_i^{//}$). Збільшення вмісту цинку зумовлює зменшення концентрації дірок та відбувається конверсія провідності матеріалу з р- на n-тип з подальшим зростанням концентрації електронів (рис.8,б). Останнє обумовлено зменшенням вакансій цинку ($V_{Zn}^{//}$).

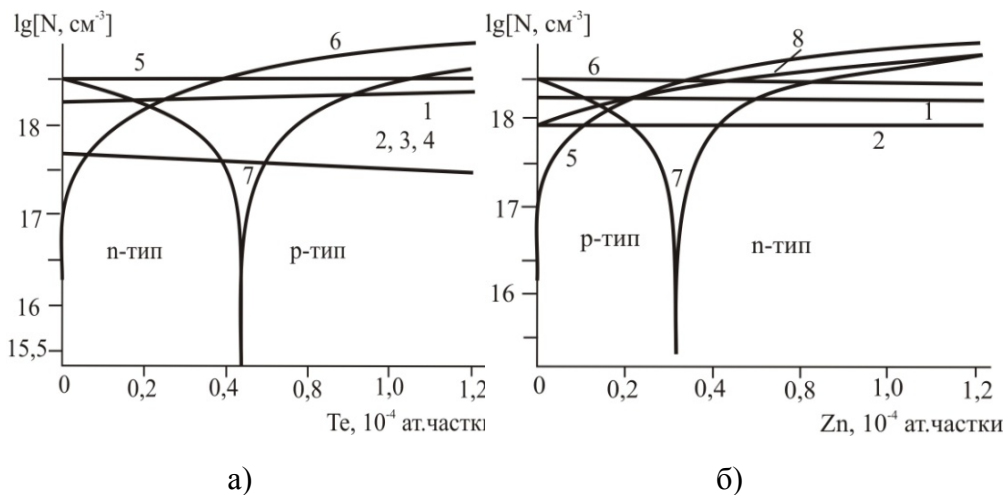


Рис.8. Залежність концентрації переважаючих точкових дефектів $V_{Zn}^{//}$ (1), $Te_i^{//}$ (2), Zn_i^{\bullet} (3), $Zn_i^{\bullet\bullet}$ (4), $V_{Te}^{\bullet\bullet}$ (8), основних носіїв n (6), p (7) та холлівської концентрації n_H (8) у n-ZnTe:Te (а) від концентрації легуючого компонента [Te] ($\alpha = 10^{-5}$ ат.частки, $\gamma = 0,5$, $\delta = 0,5$) та p-ZnTe:Zn (б) від концентрації [Zn] ($\beta = 10^{-5}$ ат.частки, $\chi = 0,5$)

Висновки

1. Проведено аналіз фазової діаграми рівноваги цинк телуриду, зокрема її Р-Т і Т-Х проєкції
2. Подано результати досліджень фізико-хімічних властивостей і дефектної підсистеми даного матеріалу. Встановлено тип домінуючих дефектів у кристалах ZnTe.
3. Показано, що власні дефекти у ZnTe, перебуваючи у різних зарядових станах, зумовлюють виникнення глибоких рівнів, локалізованих переважно у нижній частині забороненої зони.
4. Запропоновано кристалоквазіхімічні формули, які визначають дефектну підсистему як нестехіометричних, так і самолегованих кристалів цинк телуриду. Розраховано залежності концентрацій власних точкових дефектів, вільних носіїв та холлівської концентрації носіїв від величини відхилення від стехіометрії. Показано, що для:
 - нестехіометричного ZnTe при збільшенні відхилення від стехіометрії на бік металу чи халькогену концентрація власних дефектів і холлівська концентрація носіїв струму зростають;
 - самолегованих кристалів n-ZnTe:Te із збільшенням концентрації телуру має місце зменшення концентрації вакансій в аніонній підґратці, зростає концентрація вакансій цинку і їх внесок у провідність матеріалу є домінуючим;
 - кристалів р-ZnTe:Zn із збільшенням вмісту Цинку концентрація дірок зменшується, відбувається конверсія провідності з р-типом провідності на n-тип і подальше зростання концентрації електронів.

Література

1. Багаев В.С. Распространение неравновесных акустических фононов в высокочистом крупнозернистом ZnTe / В.С.Багаев, Т.И.Галкина, А.И.Шарков, А.Ю.Клоков, В.П.Мартовицкий, В.В.Зайцев, Ю.В.Клевков // Физика твердого тела. – 2003. – Т.45. №11. – С. 1941-1945.
2. Клевков Ю.В. Морфология, двойникование и фотолюминесценция кристаллов ZnTe, выращенных методом химического синтеза компонентов из паровой фазы / Ю.В.Клевков, В.П.Мартовицкий, В.С.Багаев, В.С.Кривобок // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т.40. №2. – С. 153-159.
3. Галкина Т.И. Распространение неравновесных фононов в монокристаллическом ZnTe / Т.И.Галкина, А.Ю.Клоков, А.И.Шарков, Ю.В.Коростелин, В.В.Зайцев // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т.37. №5. – С. 539-542.
4. Данильченко С.М. Структура та електрофізичні властивості тонких плівок з'єднань ZnTe і ZnS / С.М.Данильченко, Т.Г.Калініченко, М.М.Колесник, Д.І.Курбатов, А.С.Опанасюк // Фізика і хімія твердого тіла. – 2008. – Т.9. №2. – С. 343-349.
5. Багаев В.С. Влияние отжига в парах и в жидком Zn на фотолюминесценцию высокочистых поликристаллов ZnTe / В.С.Багаев, В.В.Зай-

- цев, Ю.В.Клевков, В.С.Кривобок, Е.Е.Онищенко // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т.37. №3. – С. 299-303.
6. Абрикосов, Н.Х. Полупроводниковые соединения, их получение и свойства / Н.Х.Абрикосов и др. – М.: Наука, 1970. – 205 с.
 7. Sato K. Themeltingpointof ZnTe puregreen light-emitting diodes based on high quality ZnTe substratesand a thermal diffusion process / K.Sato, M.Hanafusa, A.Noda, A.Arakawa, T.Asahi, M.Uchida, O.Oda // Ieicetrans. electron. – 2000. – Т.Е83-С. №4. – Р. 579-584.
 8. Soxman E. J.Hollow Crystals of Hexagonal ZnS // J.Appl. Phys. – 1963. – №4. – Р.948.
 9. Аветисов И.Х., Геско Е.Н., Хариф Я.Л. // Тезисы докладов III Всесоюзной конференции “Материаловедение халькогенидных полупроводников”. – Черновцы, 1991. – С.54.
 10. Smith J.A Hight emperature study of native defects in ZnTe / J.Smith // J. Phys. Chem. Solids. Pergamon Press. – 1971. – V.32. – P. 2201-2209.
 11. Guskov V.N. P-T-X Phaset Equilibrium in the Zn-Te System / V.N.Guskov, J.H.Greenberg, A.S.Alikhanyan, A.M.Natarovsky, T.Feltgen, M.Fiederle, and K.W. Benz // Phys. stat. sol. – 2002. – V.229. №1. – P. 137-140.
 12. Shiozawa L.R. Research on Improved II-VI Compounds / L.R.Shiozawa, J.M. Jost, and G.A. Sullivan // Final Report, Contract. – 1968. – V.33. – № 615. – P.2708.
 13. Greenberg J.H. PeTeXp hase equilibrium and vapor pressures canning of non-stoichiometry in the Cd-Zn-Te system / J.H.Greenberg // Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials. – 2003. – V.47. – P. 196-238.
 14. A.S. Jordan and R.R. Zupp, J. Electrochem. – 1969. – V.116. – C. 1264.
 15. Hultgren R. Selected Values of Thermodynamic Properties of Metals and Alloys / R.Hultgren, R.L.Orr, P.D.Anderson, and K.K.Kelley // Wiley, New York. – 1963. – V.51. – P. 698.
 16. Brooks L.S., Chem J. Am.. Soc. – 1952. – V.74. – C. 227
 17. Yamanaka, T., Tokonami M.: Acta Crystallogr. B 41. – 1985. – V.41. – P. 298.
 18. Christensen, N.E., Christensen O.B.: Phys. Rev. B. – 1986. – V.33. – P. 4739.
 19. Hadni A., Claudel J., Strimer P.: Phys. Status Solidi. – 1968. – V.26. – P. 241.
 20. Yeh C.Y., Lu Z.W., Froyen S., Zunger A.: Phys. Rev. B. – 1992. – V.46. – P. 86.
 21. Nemes, R. J., McMahon, M. I., Wright, N. G., Allan, D. R.: J. Phys. Chem. Solids. – 1995. – V.56.
 22. Романенкова Л.В. Нестехиометрия теллурида цинка / Л.В.Романенкова, Н.В.Пальванова, А.Ю.Зиновьев, И.Х.Аветисов // Тези. Фізико-хімічні процеси в конденсованому стані і на межфазних границях. – С.234-237.
 23. Овсянников С.В. Термоэлектрические свойства тригональной и орторомбической модификаций теллурида цинка / С.В.Овсянников, В.В.Щекников // Письма в ЖЭТФ. – 2004. – Т.80. – №1. – С.41-44.

24. Агекян В.Ф. Фотолюминесценция монокристаллов ZnTe и CdTe, выращенных с применением транспортирующих газов, содержащих галогены / В.Ф.Агекян, Г.А.Ильчук, Ю.В.Рудь, А.Ю.Степанов // Физика твердого тела. – 2002. – Т.44. №12. – С. 2117-2119.
25. Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости. – М: Диалог-МГУ, 2000. – 292 с.
26. Fleming, J.G., Stevenson, D.A.: J. Electrochem. Soc. – 1989. – V.136. – P. 863.
27. Mahalingam T. Sebastian Microstructural Characterization of Electrosynthesized ZnTe Thin Films / T.Mahalingam, V.S.John, G.Ravi, P.J.Sebastian // Cryst. Res. Technol. – 2002. – Т.37. №4. – P. 329-339
28. Медведев С.А. Физика и химия соединений^{АІІВVI} / С.А. Медведев. – М.: Мир, 1970. – 624 с.
29. Bose D.N. High resistivity In-doped ZnTe: electrical and optical properties / D.N.Bose, S.Bhunia // Bull. Mater. Sci. – 2005. – V.28. №7. – P. 647-650.
30. Чижиков Д.М. Теллур и телуриды / Д.М.Чижиков, В.П.Счастливиий. – М.: Наука. – 1966. – С. 275.
31. Сакалас А. Точечные дефекты в полупроводниковых соединениях / А.Сакалас, З.Янушкевичюс. – Вильнюс: Мокслас. – 1988. – 153 с.
32. Meyer В.К. Native defect identification in II-VI materials / В.К.Meyer, W.Stadler // Journ. of Crys. Growth. – 1996. – V.161. – P. 119-127.
33. Taguchi T. Growth of high-purity ZnTe single crystal by the sublimation travel in heater method / T.Taguchi, S.Fujita, Y.Inuishi // Journ. Of Crys. Growth. – 1978. – V.45. – P. 204-213.
34. Ризаханов М.А. Структурно сложные двухдырочные и двухэлектронные медленные ловушки с бикинетическими свойствами в кристаллах p-ZnTe, n-ZnS / М.А.Ризаханов, Е.М.Зобов, М.М.Хамидов. – 2004. – Т.38, №1. – С. 49-55.
35. Махний В.П. Диффузионные слои ZnTe:Sn с электронной проводимостью / В.П.Махний, В.И.Гривул. – 2006. – Т.40, №7. – С. 794-795.
36. Морозова Н.К. Сульфид цинка. Получение и оптические свойства / Н.К.Морозова, В.А.Кузнецов. – М.: Наука, 1987. – 200 с.
37. Лисняк С.С. Кристаллоквазихимическая модель исследований в химии твердого тела / С.С.Лисняк // Неорганические материалы. – 1992. – Т.32. №2. – С. 1913-1917.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 18.12.2011 р.
Рекомендовано до друку д.х.н., професором Фреїком Д.М.*

THE SELF POINT DEFECTS AND PHYSIC-CHEMICAL PROPERTIES OF ZINC TELLURIDE**V. M. Chobanyuk, T. O. Parashchuk, G. Ja. Gurgula, N. D. Freik***PreCarpathian National University by V. Stefanyk;**Physical-Chemical Institute; 76000, Ivano-Frankivs'k, Shevchenko st., 57*

An overview of the basic physical and chemical properties of zinc telluride is made. It is the investigation of the equilibrium phase diagram of the material. It is transmitted power structure of their own semiconductor defects. It is the calculation of the concentration of point defects in unstoichiometrical and self doped ZnTe.

Key words: *zinc telluride, point defects, ionisation energy.*

УДК 546.48'24:544.022.384.2

КРИСТАЛОХІМІЯ ДЕФЕКТНОЇ ПІДСИСТЕМИ НЕСТЕХІОМЕТРИЧНОГО ПЛЮМБУМ ТЕЛУРИДУ

Л. В. Туровська

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника;
76018, м. Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57;
тел. 0342596082; e-mail: freik@pu.if.ua

Запропоновано квазіхімічні та кристалоквазіхімічні формули дефектної підсистеми в нестехіометричних кристалах PbTe. Уточнено значення констант рівноваги квазіхімічних реакцій утворення власних точкових дефектів у плюмбум телуриді. Використовуючи метод, що базується на мінімізації термодинамічного потенціалу системи „кристал-пара” як функції концентрації дефектів, розраховано рівноважні концентрації точкових дефектів, вільних носіїв заряду в залежності від технологічних факторів двотемпературного відпалу.

Ключові слова: плюмбум телурид, кристалоквазіхімія, квазіхімія, точкові дефекти, константи рівноваги, двотемпературний відпал, термодинамічний потенціал.

Вступ

Сполуки $A^{IV}B^{VI}$ та тверді розчини на їх основі є базовими матеріалами для створення термоелектричних перетворювачів енергії в середній області температур 500-750 К, а також фотоприймальних пристроїв і випромінювальних структур інфрачервоного діапазону оптичного спектра [1].

Серед них вигідно відрізняється за своїми властивостями плюмбум телурид: багатодолинний характер енергетичного спектру ($N=4$), низька ґраткова теплопровідність ($\chi=2,09 \cdot 10 \text{ Вт}\cdot\text{К}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$), порівняно високі рухливості носіїв ($\mu \approx 10^3 \text{ см}^{-2} \text{ В}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$), найбільше значення величини $\mu\chi^{-1}$, що обумовлює значну термоелектричну добротність ($Z_{\text{max}} Z = \alpha^2 \sigma / \chi$, де α – коефіцієнт термо-е.р.с., σ – питома електропровідність, χ – коефіцієнт теплопровідності).

Він кристалізується у структурі типу NaCl (рис.1), яка є характерною для йонних кристалів. Хімічний зв'язок є складним і наближається до йонно-ковалентно-металічного. За умови реалізації тільки йонного зв'язку можна стверджувати, що атом плюмбуму віддає два електрони і залишається у вигляді йона Pb^{2+} , а йони телуру перебувають у двозарядному від'ємному стані Te^{2-} . Йонність кристалічної ґратки підтверджується і у значній (на порядок величини) різниці між статичною ϵ_0 і високочастотною ϵ_∞ діелектричними проникностями (414 і 33 відповідно). PbTe характеризується значними відхиленнями від стехіометричного складу і двосторонньою областю гомогенності (рис. 2), що є причиною

значної концентрації (10^{18} - 10^{19} см⁻³) електрично активних власних дефектів [4].

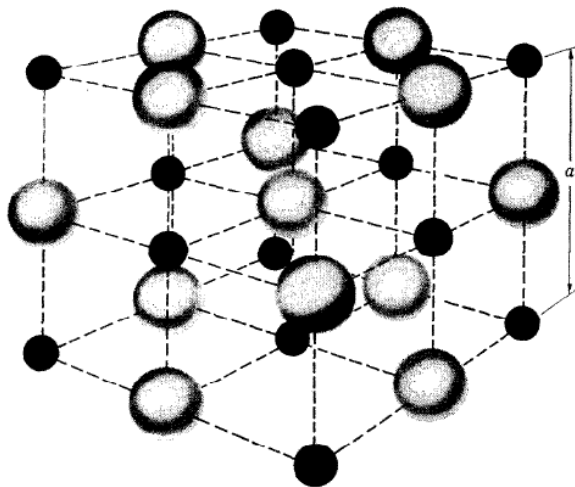


Рис.1. Кристалічна структура типу NaCl. Просторова гратка f.c.c. Йон металу в позиції (000) і йон неметалу - $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ [2]

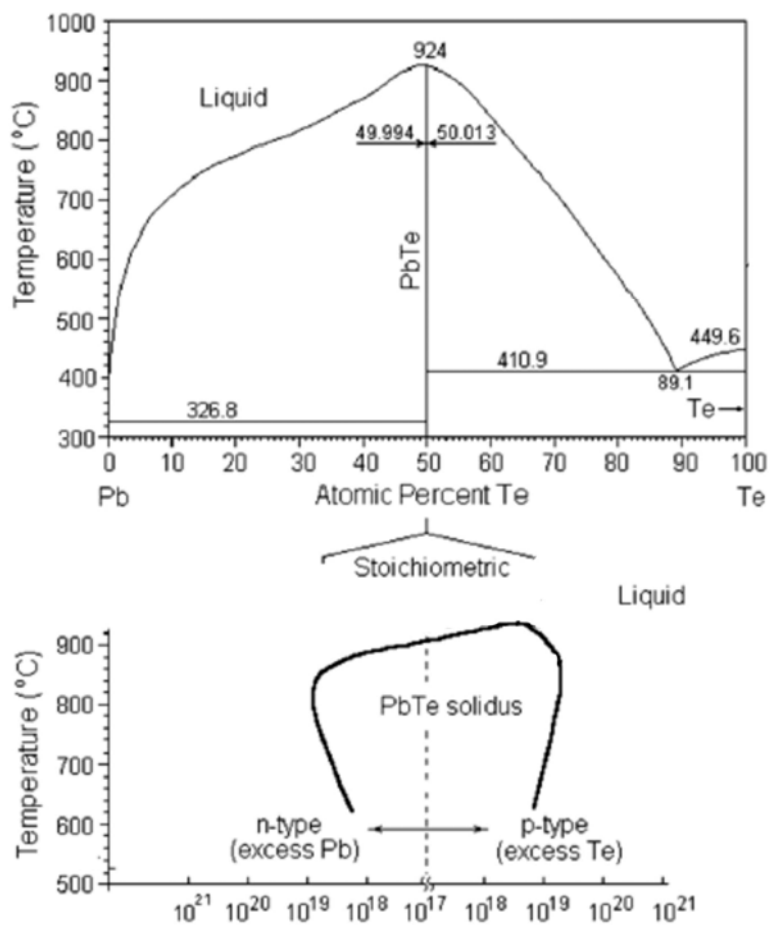


Рис.2. Фазова діаграма та область гомогенності PbTe [3]

На даний час, попри значну кількість експериментальних досліджень і теоретичних результатів, питання, пов'язані з кристалохімією точкових дефектів, їх зарядовим станом як у чистих кристалах $A^{IV}B^{VI}$, так і твердих розчинах на їх основі, залишаються дискусійними. Це значною мірою гальмує перспективу отримання матеріалу з наперед заданими властивостями. У зв'язку з цим задачі, що розв'язуються в даній роботі, пов'язані з дослідженнями природи домінуючих точкових дефектів, їх взаємодії у PbTe, і є актуальними для сучасного термоелектричного напівпровідникового матеріалознавства.

I. Кристалоквазіхімічне моделювання

1.1. Кристалоквазіхімічні формули нестехіометричного PbTe

В основу методу кристалоквазіхімічного аналізу дефектної підсистеми покладено поняття про антиструктуру, на основі якої здійснюється суперпозиція кристалоквазіхімічних кластерів базової і легуючої сполуки [5]. Антиструктурою п्लомбум телуриду є галеніт $V_{Pb}''V_{Te}^{\bullet\bullet}$, де V_{Pb}'' і $V_{Te}^{\bullet\bullet}$ – двократно заряджені негативна вакансія п्लомбуму і позитивна вакансія телуру, „ $\prime\prime$ ” і „ $\bullet\bullet$ ” – негативний і позитивний заряди відповідно.

Кристалоквазіхімічний кластер n-PbTe (надлишок п्लомбуму в границях області гомогенності) з врахуванням диспропорціювання вакансій у катіонній підгратці буде:

$$V_{Pb}''V_{Te}^{\bullet\bullet} + Pb^0 \rightarrow [Pb_{1-\sigma}^x V_{\sigma(1-\delta)}'' V_{\gamma\delta}']_{Pb} V_{Te}^{\bullet\bullet} (Pb_{\sigma}^{\bullet\bullet})_i + (2 + \sigma\delta)e^- .$$

Тоді кристалоквазіхімічна формула n-PbTe:

$$(1 - \alpha) \{ Pb_{Pb}^x Te_{Te}^x \} + \alpha \left\{ [Pb_{1-\sigma}^x V_{\sigma(1-\delta)}'' V_{\gamma\delta}']_{Pb} V_{Te}^{\bullet\bullet} (Pb_{\sigma}^{\bullet\bullet})_i + (2 + \sigma\delta)e^- \right\} \rightarrow \\ \rightarrow [Pb_{1-\alpha\sigma}^x V_{\alpha\sigma(1-\delta)}'' V_{\alpha\sigma\delta}']_{Pb} [Te_{1-\alpha}^x V_{\alpha}^{\bullet\bullet}]_{Te} (Pb_{\alpha\sigma}^{\bullet\bullet})_i + \alpha(2 + \sigma\delta)e^- . \tag{1}$$

Тут $[V_{\alpha\sigma}'']_{Pb} \rightarrow [V_{\alpha\sigma(1-\delta)}'']_{Pb} + [V_{\alpha\sigma\delta}']_{Pb} + \alpha\sigma\delta e^-$, α – величина відхилення від стехіометрії на боці Pb, e^- – електрон, „x” – нейтральний заряд, δ – коефіцієнт диспропорціювання зарядового стану вакансій п्लомбуму, σ – частка міжвузлових атомів п्लомбуму.

Аналогічно кристалоквазіхімічне представлення нестехіометричного p-PbTe (надлишок телуру у границях області гомогенності) описується як:

$$V_{Pb}''V_{Te}^{\bullet\bullet} + Te^0 \rightarrow [V_{1-\delta}'' V_{\delta}']_{Pb} [Te_{1-\gamma}^x V_{\gamma}^{\bullet\bullet}]_{Te} (Te_{\gamma}^x)_i + 2(1 - \gamma)h^+ + \delta e^- .$$

Формула:

$$(1 - \beta) \{ Pb_{Pb}^x Te_{Te}^x \} + \beta \left\{ [V_{1-\delta}'' V_{\delta}']_{Pb} [Te_{1-\gamma}^x V_{\gamma}^{\bullet\bullet}]_{Te} (Te_{\gamma}^x)_i + 2(1 - \gamma)h^+ + \delta e^- \right\} \rightarrow \\ \rightarrow [Pb_{1-\beta}^x V_{\beta(1-\delta)}'' V_{\beta\delta}']_{Pb} [Te_{1-\beta\gamma}^x V_{\beta\gamma}^{\bullet\bullet}]_{Te} (Te_{\beta\gamma}^x)_i + \beta(2 - 2\gamma - \delta)h^+ . \tag{2}$$

Тут $[V_{\beta}^{//}]_{Pb} \rightarrow [V_{\beta(1-\delta)}^{//}]_{Pb} + [V_{\beta\delta}']_{Pb} + \beta\delta e^{-}$, β – величина початкового відхилення від стехіометрії на боці Те, h^{+} – дірка.

1.2. Розрахунок концентрації точкових дефектів

Одержані кристалоквазіхімічні формули (1) і (2) дають можливість розрахувати концентрацію точкових дефектів та вільних носіїв заряду (n, p) як в n-PbTe, так і p-PbTe.

В хімії вигідно використовувати мольні частки – кількість дефектів, які припадають на один моль речовини. Але у зонній моделі концентрацію електронів і дірок природно виражати числом частинок в одиниці об'єму, тобто у вигляді дійсних концентрацій. Враховуючи цю обставину, виразимо концентрацію дефектів (N) через їхні мольні частки α (β).

Концентрація частинок бінарної сполуки в 1 см^3 визначається:

$$N = \frac{2\rho N_A}{M} \alpha,$$

де ρ – густина ($\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$), $N_A=6,022\cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$, M – молярна маса ($\text{г}\cdot\text{моль}^{-1}$). Враховуючи, що густину можна визначити через параметр елементарної комірки (a) як

$$\rho = \frac{MZ}{N_A} \frac{1}{a^3},$$

де Z – число структурних одиниць (молекул) в елементарній комірниці ($Z=4$), для N остаточно отримаємо:

$$A = \frac{2Z}{a^3}.$$

Рівняння електронейтральності для (1):

$$n + q_{V_{Pb}''} [V_{Pb}^{//}] + q_{V_{Pb}'} [V_{Pb}'] = q_{V_{Te}''} [V_{Te}^{**}] + q_{Pb_i^{**}} [Pb_i^{**}],$$

де $n = A\alpha(2 + \sigma\delta - \sigma)$, $[V_{Pb}^{//}] = A\alpha\sigma(1 - \delta)$, $[V_{Pb}'] = A\alpha\sigma\delta$, $[V_{Te}^{**}] = A\alpha$, $[Pb_i^{**}] = A\alpha\sigma$, $q_{V_{Pb}'} = 1$; $q_{V_{Pb}''} = q_{V_{Te}''} = q_{Pb_i^{**}} = 2$.

Тоді холлівська концентрація буде:

$$n_H = A\alpha(2 + \sigma\delta).$$

Для надстехіометрії телуру рівняння електронейтральності, згідно (2), буде:

$$q_{V_{Pb}''} [V_{Pb}^{//}] + q_{V_{Pb}'} [V_{Pb}'] = p + q_{V_{Te}''} [V_{Te}^{**}],$$

де $p = A\beta(2 - 2\gamma - \delta)$, $[V_{Pb}^{//}] = A\beta(1 - \delta)$, $[V_{Pb}'] = A\beta\delta$, $[V_{Te}^{**}] = A\beta\gamma$, $q_{V_{Pb}'} = 1$; $q_{V_{Pb}''} = q_{V_{Te}''} = 2$.

Холлівська концентрація буде:

$$n_H = A\beta(2 - 2\gamma - \delta).$$

1.3. Обговорення результатів

У випадку n-PbTe, згідно рис. 3, а, зі збільшенням вмісту надстехіометричного плюмбуму (α) зростають значення холлівської концентрації n_H (рис.3, а – крива 1) та концентрації таких точкових дефектів, як двозарядні вакансії телуру V_{Te}^{2+} , одно- і двозарядні катіонні вакансії V_{Pb}^{1-} , V_{Pb}^{2-} , міжвузлові атоми плюмбуму Pb_i^{2+} (рис. 3, а – криві 2, 3, 4, 5); при цьому концентрація двозарядних вакансій телуру значно вища. Відповідно для p-PbTe, як видно з рис. 3, б, зі зростанням вмісту надстехіометричного телуру зростають холлівська концентрація носіїв заряду (рис. 3, б – крива 1) та концентрації одно-, двозарядних вакансій плюмбуму, аніонних вакансій та телуру в міжвузлі (рис.3, б – криві 2, 3, 5, 6). Концентрація двозарядних катіонних вакансій на порядок вища.

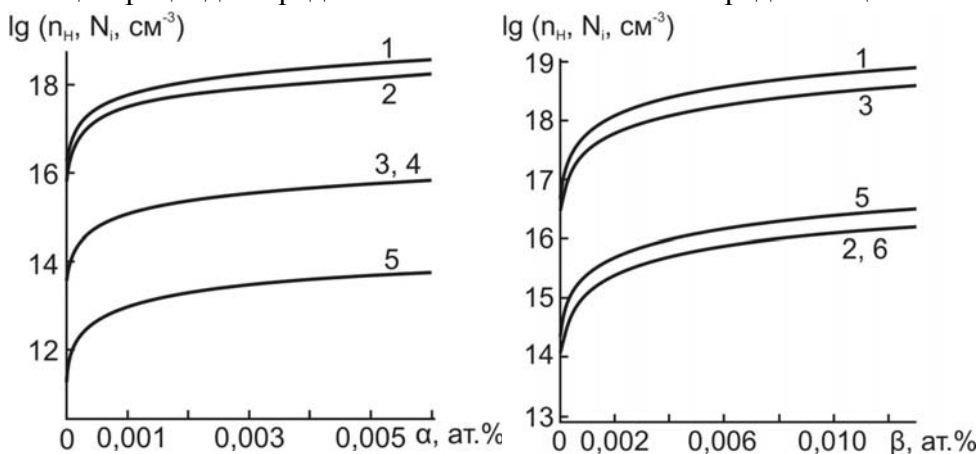


Рис.3. Розраховані значення холлівської концентрації носіїв заряду ($1-n_H$) та концентрації точкових дефектів N_i (2- V_{Te}^{2+} , 3- V_{Pb}^{2-} , 4- Pb_i^{2+} , 5- V_{Pb}^{1-} , 6- Te_i^0) у кристалах n-PbTe (а) та p-PbTe (б) від вмісту надстехіометричного компоненту (Pb (α), Te (β) відповідно)

II. Квазіхімічне моделювання

2.1. Система рівнянь квазіхімічних реакцій

Стехіометричний склад плюмбум телуриду можна змінювати, задавши парціальний тиск складових компонентів (свинець, телур) над твердою фазою чи температуру в методі двотемпературного відпалу.

Рівновагу “кристал-пара” в цьому випадку можна описати за допомогою системи рівнянь квазіхімічних реакцій, наведених у таблиці 1.

Тут $K = K_0 \exp(-\Delta H / kT)$ – константи рівноваги; P_{Te_2} – парціальний тиск пари телуру; e^- – електрони; h^+ – дірки; n і p – концентрації електронів і дірок відповідно; „v” – пара.

Реакція (I) описує утворення нейтральних вакансій та міжвузлових атомів плюмбуму, а (V) – нейтральних вакансій плюмбуму при взаємодії з парою телуру; (II)-(III) – реакції йонізації утворених дефектів; (IV)

– реакція збудження власної провідності. Рівняння (VI) – загальна умова електронейтральності кристала.

Таблиця 1. Система рівнянь квазіхімічних реакцій

№ п/п	Рівняння реакції	Константа рівноваги	K^0 , (см^{-3} , Па)	ΔH , еВ
I	$Pb_{Pb} = Pb_i^0 + V_{Pb}^0$	$K_F = [V_{Pb}^0] \cdot [Pb_i^0]$	$4,8 \cdot 10^{48}$	2,96
II	$Pb_i^0 = Pb_i^+ + e^-$	$K_a = [Pb_i^+] \cdot n / [Pb_i^0]$	$1,25 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,01
III	$V_{Pb}^0 = V_{Pb}^- + h^+$	$K_b = [V_{Pb}^-] \cdot p / [V_{Pb}^0]$	$1,83 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,01
IIIa	$V_{Pb}^0 = V_{Pb}^{2-} + 2h^+$	$K'_b = [V_{Pb}^{2-}] \cdot p^2 / [V_{Pb}^0]$	$3,35 \cdot 10^{30} \cdot T^3$	0,02
IV	$n \cdot p = e^- + h^+$	$K_i = n \cdot p$	$7,42 \cdot 10^{29} \cdot T^3$	0,38
V	$\frac{1}{2} Te_2^V = V_{Pb}^0 + Te_{Te}^0$	$K_{Te_2^V} = [V_{Pb}^0] \cdot P_{Te_2}^{-1/2}$	$4,0 \cdot 10^{17}$	0,28
VI	$[V_{Pb}^-] + 2[V_{Pb}^{2-}] + n = [Pb_i^+] + p$			

Рівняння (1)-(6) дають можливість визначити концентрацію електронів n через константи рівноваги K та парціальний тиск пари телуру P_{Te_2} . Отримуємо рівняння 3-го степеня відносно n .

Знаючи концентрацію електронів, користуючись співвідношеннями (I)-(V), можна знайти холлівську концентрацію носіїв заряду n_H , концентрацію дірок p , одно- та двозарядних вакансій плюмбуму $[V_{Pb}^-]$, $[V_{Pb}^{2-}]$, однозарядних міжвузлових атомів плюмбуму $[Pb_i^+]$:

$$n_H = n - K_i / n; \quad p = K_i / n;$$

$$[V_{Pb}^-] = K_b \cdot R \cdot n \cdot K_i^{-1};$$

$$[V_{Pb}^{2-}] = K'_b \cdot R \cdot n^2 \cdot K_i^{-2};$$

$$[Pb_i^+] = K_a K_F R^{-1} n^{-1},$$

$$\text{де } R = K_{Te_2^V} P_{Te_2}^{1/2}.$$

Константи K_a, K_b, K_i розраховували теоретично, використовуючи зонну теорію невироджених напівпровідників. Константу рівноваги реакції йонізації акцепторних дефектів визначали за формулою: $K_b = N_v \exp(-E_a / kT)$, де E_a – енергія йонізації акцепторних точкових дефектів; N_v – густина станів у валентній зоні $N_v = 2(2\pi m_{pd}^* kT / h^2)^{3/2}$, m_{pd}^* – ефективна маса дірок для густини станів екстремумів енергії.

Аналогічно знайдено константу рівноваги реакції йонізації донорних дефектів: $K_a = N_{\bar{n}} \exp(-E_d / kT)$, тут E_d – енергія йонізації донорних точкових дефектів; N_c – густина станів у зоні провідності. Приймали, що $K'_a = K_a^2$. Константу рівноваги реакції збудження власної провідності одержимо з виразу $K_i = N_c N_v \cdot \exp(-E_g / kT)$, де E_g – ширина забороненої зони. На відміну від більшості напівпровідників, в плумбум телуриді ширина забороненої зони в області низьких температур лінійно зростає, а при температурах, вищих 500 К, лінійність температурної залежності порушується, і ширина забороненої зони прямує до сталого значення (0,38 еВ).

Отримавши таким чином константи K_a , K_b , K_i , значення константи K_F знайшли, апроксимуючи експериментальні залежності границь області гомогенності (рис. 3) від температури виразами:

$$\partial_{Pb}(ci^{-3}) = (K_a \cdot K_F / K_{Te_2V} \cdot P_{Te_2}^{1/2})^{1/2};$$

$$\partial_{Te}(ci^{-3}) = (K_a \cdot K_{Te_2V} \cdot P_{Te_2}^{1/2})^{1/2}.$$

Константу K_{Te_2V} знаходили, апроксимуючи експериментальні залежності логарифма парціального тиску телуру від оберненої температури (рис.4). Знайдені, таким чином, ефективні значення K_0 і ΔH для констант наведені в таблиці 1.

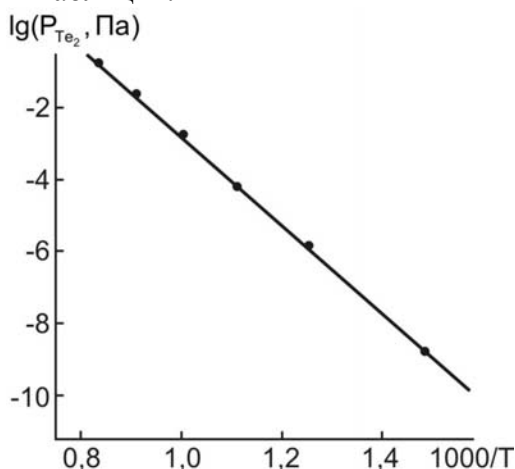


Рис.4. Залежність парціального тиску пари телуру від оберненої температури при p-n-переході (p = n). Точки – експеримент [6]

2.2. Результати розрахунку

Результати розрахунку залежності холлівської концентрації вільних носіїв заряду n_H від температури відпалу T при сталих парціальних тисках пари телуру P_{Te_2} наведені на рис.5. З графіка видно, що при низьких температурах відпалу отримуємо кристали p-типу провідності. З підвищенням температури відпалу і сталому парціальному тиску пари телуру холлівська концентрація дірок зменшується і при деякій температурі відбувається зміна типу провідності з p-типу на n і починає зрос-

тати концентрація електронів, що досить непогано узгоджується з експериментом.

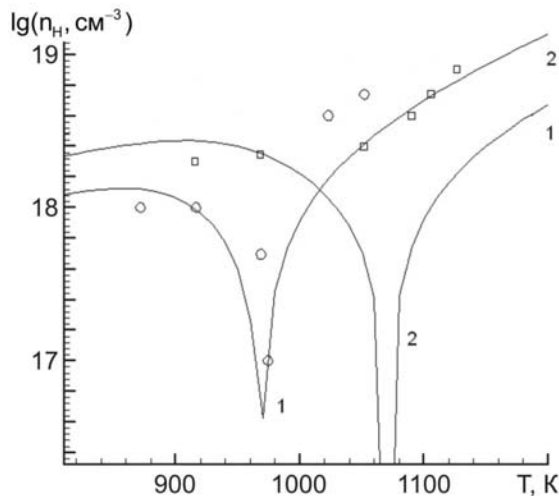


Рис.5. Залежність холлівської концентрації вільних носіїв заряду від температури відпалу при парціальному тиску телуру (P_{Te_2} , Па): 0,086 (1), 1,396 (2); точки – експеримент [5]

Результати розрахунку залежності холлівської концентрації електронів n_H від тиску пари телуру P_{Te_2} при сталих температурах відпалу T наведені на рис.6. При низьких парціальних тисках пари телуру отримуються кристали $PbTe$ n-типу провідності. Із збільшенням парціального тиску пари телуру при постійній температурі відпалу концентрація електронів спадає, і при певному значенні тиску пари телуру спостерігається зміна типу провідності з n на p-тип і в подальшому зростає концентрація дірок.

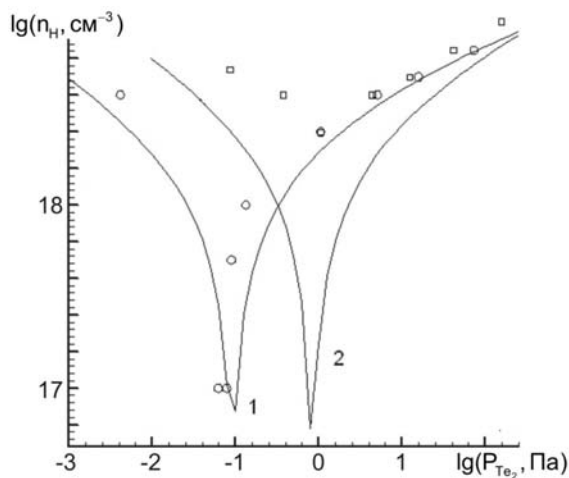


Рис.6. Залежність холлівської концентрації носіїв заряду від парціального тиску пари телуру при сталих значеннях температури відпалу (T , К): 970 (1), 1050 (2); точки – експеримент [5]

Розрахунок концентрації вільних носіїв заряду та йонізованих дефектів показав, що при низьких температурах відпалу переважають

двократно йонізовані вакансії плюмбуму V_{Pb}^{2-} (рис.7 – крива 4). З ростом температури зростає концентрація всіх дефектів і найшвидше – Pb_i^+ , що і пояснює температурний хід холлівської концентрації n_H .

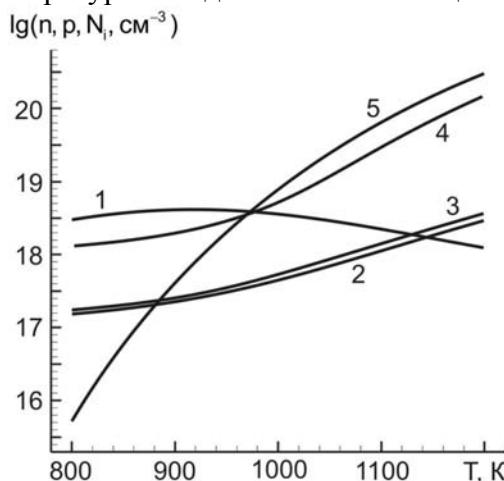


Рис.7. Залежність концентрацій носіїв заряду та йонізованих дефектів N_i від температури відпалу T кристала при тиску пари телуру $0,086$ Па: 1 – p , 2 – n , 3 – $[V_{Pb}^-]$, 4 – $[V_{Pb}^{2-}]$, 5 – $[Pb_i^+]$

Підвищення парціального тиску пари телуру при незмінній температурі відпалу призводить до росту концентрації дірок (рис.8 – крива 1), концентрація електронів в кристалі при цьому зменшується (крива 2). Це обумовлено зростанням концентрації одно- та двозарядних вакансій плюмбуму V_{Pb}^- , V_{Pb}^{2-} (рис.8 – крива 3, 4) і зменшенням концентрації міжвузлових атомів плюмбуму Pb_i^+ із збільшенням парціального тиску пари телуру (рис.8 – крива 5).

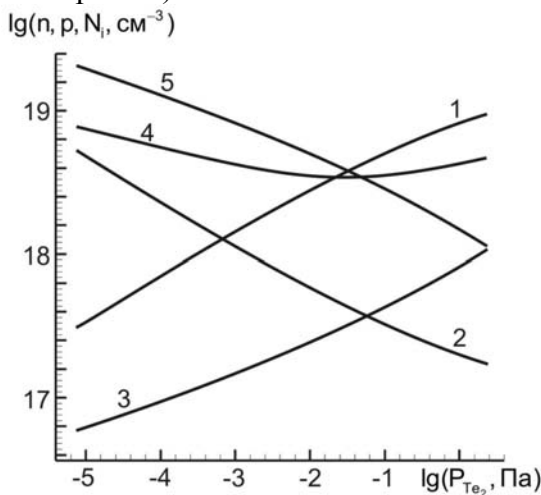


Рис.8. Залежність концентрацій носіїв заряду та йонізованих дефектів від тиску пари телуру P_{Te_2} при температурі відпалу кристала 970 К: 1 – p , 2 – n , 3 – $[V_{Pb}^-]$, 4 – $[V_{Pb}^{2-}]$, 5 – $[Pb_i^+]$

III. Термодинаміка точкових дефектів

Метод термодинамічних потенціалів дає змогу визначати концентрації точкових дефектів безпосередньо від термодинамічних параметрів (температура та тиск) системи, проте отримання чисельних результатів пов'язане зі значними труднощами, зумовленими трансцендентністю розв'язуваних при цьому рівнянь.

3.1. Рівняння рівноваги у системі «кристал – пара»

Рівноважні концентрації точкових дефектів у кристалі при двотемпературному відпалі безпосередньо визначали з системи рівнянь, що описують рівновагу в гетерогенній багатокомпонентній системі при заданих тиску P і температурі T [7]:

$$\mu_i^s = \mu_i^g, \quad (3)$$

де $\mu_i^{s(g)}$ – хімічний потенціал i -го компонента ($i=Pb, Te$) у парі g чи кристалі s .

Хімічний потенціал пари [8]:

$$\mu^g = kT \ln P + \mu_0. \quad (4)$$

Для одноатомного газу Pb :

$$\mu_0 = kT(-\ln(kT) + \ln(h^3 / (2\pi mkT)^{3/2})).$$

Для двоатомного газу Te_2 :

$$\begin{aligned} \mu_0 = kT(-\ln(kT) + \ln(h^3 / (2\pi mkT)^{3/2}) \\ + \ln(h^2 / 8\pi^2 IkT) + \ln(h\nu / kT)). \end{aligned}$$

Тут m – маса атома або молекули, $I=ml^2$ – момент інерції молекули, l – відстань між ядрами молекули, ν – внутрішня частота коливань молекули.

Для визначення хімічних потенціалів дефектів, що дорівнюють хімічному потенціалу компоненту, взятому зі знаком «+» або «-», у кристалі використовували процедуру диференціювання енергії Гіббса G за концентрацією дефекту. Енергію Гіббса подавали у вигляді:

$$\begin{aligned} G = G_0 + \sum(E + F_{vib})[D] + nE_C - pE_V \\ - T(S_n + S_p + S_k), \end{aligned}$$

де G_0 – енергія Гіббса, що не залежить від наявності дефектів, E – енергія утворення дефекту, F_{vib} – вільна коливна енергія дефекту, $[D]$ – концентрації дефекту D , n та p – концентрації електронів та дірок, E_C , E_V – енергії дна зони провідності та стелі валентної зони, S_k – конфігураційна ентропія, S_n , S_p – ентропії електронів у зоні провідності та дірок у валентній зоні. Сумування ведеться по всіх підгратках і всіх дефектах у підгратці.

Енергії однократно та двократно йонізованих дефектів визначаються за формулами:

$$E_1 = E_0 - \frac{Z}{|Z|} \varepsilon_1; \quad E_2 = E_0 - \frac{Z}{|Z|} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2),$$

де E_0 – енергія утворення нейтрального дефекту, Z – зарядовий стан дефекту, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – перший та другий рівні йонізації утвореного дефекту.

Зміна вільної коливної енергії кристалу при утворенні дефекту:

$$F_{vib} = \pm \left\{ 3kT \ln \left(\frac{T_\theta}{T} \right) - kT \right\} + x \cdot 3kT \ln \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right),$$

де x – кількість атомів що змінили частоту своїх коливань з ω_0 на ω .

Ентропію визначали за законом Больцмана:

$$S_k = k \ln(\prod W_j) = \sum k \ln(W_j) = \sum S_j,$$

де W_j – термодинамічна ймовірність j -ї підґратки. Для підґратки з кількома різними видами дефектів:

$$W_j = \frac{N_j!}{(N_j - \sum [D])! \cdot \prod [D]!},$$

де N_j – концентрація вузлів, у яких може утворитися дефект.

Для електронів, легких та важких дірок термодинамічні ймовірності дорівнюють:

$$W_n = \frac{N_C!}{(N_C - n)! n!}, \quad W_{p,l} = \frac{N_{V,l}!}{(N_{V,l} - p_l)! p_l!},$$

$$W_{p,h} = \frac{N_{V,h}!}{(N_{V,h} - p_h)! p_h!},$$

де $N_C, N_{V,l}, N_{V,h}$ – густини станів у зоні провідності, зоні легких та важких дірок відповідно.

Концентрації електронів, легких та важких дірок розраховувались за формулами:

$$n = \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{\frac{b\mu}{kT}}, \quad p_l = \left(\frac{2\pi m_{h,l}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{-b \frac{\mu + E_{g,l}}{kT}},$$

$$p_h = \left(\frac{2\pi m_{h,h}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{-b \frac{\mu + E_{g,h}}{kT}},$$

де коефіцієнти a та b – поправки, що враховують ступінь виродження носіїв і вираховуються чисельно при апроксимації інтеграла Фермі, $E_{g,l}$ – ширина забороненої зони між зоною легких дірок і зоною провідності, $E_{g,h}$ – ширина забороненої зони та між зоною важких дірок і зоною провідності.

Враховуючи, що ефективна маса електронів залежить від їх концентрації за законом:

$$m^* = m_0 \left(1 + \frac{2\mu}{E_g} \right),$$

та припускаючи, що аналогічна залежність справедлива і для ефективної маси легких дірок, матимемо:

$$n = \left(\frac{2\pi m_{e,0}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{b \frac{\mu}{kT}} \left(1 + \frac{2\mu}{E_g} \right)^{\frac{3}{2}},$$

$$p_l = \left(\frac{2\pi m_{h,0,l}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{-b \frac{\mu + E_{g,l}}{kT}} \left(1 + \frac{2\mu}{E_g} \right)^{\frac{3}{2}},$$

$$p_h = \left(\frac{2\pi m_{h,h}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{-b \frac{\mu + E_{g,2}}{kT}}.$$

Хімічний потенціал електронів μ може бути визначеним з рівняння електронейтральності:

$$\sum Z[D] = \left(\frac{2\pi m_{e,0}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{b \frac{\mu}{kT}} \left(1 + \frac{2\mu}{E_g} \right)^{\frac{3}{2}} - \left[\left(\frac{2\pi m_{h,0,l}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{-b \frac{\mu + E_{g,l}}{kT}} \left(1 + \frac{2\mu}{E_{g,l}} \right)^{\frac{3}{2}} - \left(\frac{2\pi m_{h,h}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} a e^{-b \frac{E_{g,h} + \mu}{kT}} \right].$$

Додавання проводиться по всіх йонізованих дефектах.

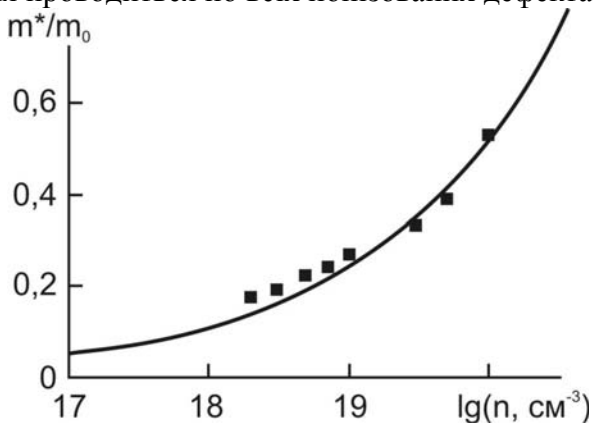


Рис.9. Залежність ефективної маси електронів від їх концентрації для PbTe. Точки – експеримент [9], крива – апроксимація функцією (5)

У такому вигляді дане рівняння не може бути розв'язане аналітично, тому для спрощення цієї задачі експериментальні дані [9] були апроксимовані функцією (рис.9):

$$\frac{m^*}{m_{e,0}^*} = \alpha n^\beta = 0,111 \cdot 10^{-6} \cdot n^{\frac{1}{3}} \quad (5)$$

Враховуючи (5):

$$n = a \cdot \left(\frac{2\pi m_{e,0}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\alpha n^{\frac{1}{3}} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\mu}{kT}}.$$

Або

$$n = N_c \cdot a e^{-\frac{\mu}{kT}},$$

$$\text{де } N_c = a \cdot N_{C,0}^2 \cdot \alpha^3 \cdot e^{-\frac{\mu}{kT}}, \quad N_{C,0} = \left(\frac{2\pi m_{e,0}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Аналогічно для легких дірок:

$$p_l = N_{V,l} a e^{-\frac{\mu + E_{g,l}}{kT}},$$

$$\text{де } N_{V,l} = a \cdot N_{V,0,l}^2 \cdot \alpha^3 \cdot e^{-\frac{\mu + E_{g,l}}{kT}}, \quad N_{V,0,l} = \left(\frac{2\pi m_{h,0,l}^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

З врахуванням отриманих виразів, повне рівняння електронейтральності:

$$\sum ZD = \alpha^3 a^2 N_{C,0}^2 e^{-\frac{2b\mu}{kT}} - \left[\alpha^3 a^2 N_{V,0,l}^2 e^{-\frac{2b(E_{g,l} + \mu)}{kT}} + a N_{V,h} e^{-\frac{E_{g,h} + \mu}{kT}} \right].$$

Даний вираз можна привести до вигляду:

$$\alpha^3 a^2 N_{C,0}^2 \left(e^{-\frac{b\mu}{kT}} \right)^4 - \sum ZD \cdot \left(e^{-\frac{b\mu}{kT}} \right)^2 - a N_{V,h} e^{-\frac{E_{g,h}}{kT}} \left(e^{-\frac{b\mu}{kT}} \right)^1 - \alpha^3 a^2 N_{V,0,l}^2 e^{-\frac{2bE_{g,l}}{kT}} = 0$$

Отримане рівняння є поліномом четвертого степеня, яке може бути розв'язане аналітично. При високих температурах можна знехтувати впливом зони легких дірок. Тоді рівняння електронейтральності матиме вигляд:

$$\sum ZD = \alpha^3 a^2 N_{C,0}^2 e^{-\frac{2b\mu}{kT}} - a \cdot N_V e^{-\frac{E_g + \mu}{kT}},$$

звідки

$$\mu = \frac{1}{b} \cdot kT \cdot \ln \left[\frac{\frac{1}{6} \left\{ 108B + 12\sqrt{-12A^3 + 81B^2} \right\}^{\frac{1}{3}}}{+2A \left\{ 108B + 12\sqrt{-12A^3 + 81B^2} \right\}^{-\frac{1}{3}}} \right],$$

$$\text{де } A = \frac{\sum ZD}{\alpha^3 a^2 N_{C,0}^2}, \quad B = \frac{aN_V e^{-b \frac{E_g}{kT}}}{\alpha^3 a^2 N_{C,0}^2}.$$

Отже, враховуючи, що хімічний потенціал дефекту у кристалі ви- значається як

$$\begin{aligned} \mu_{D_i} &= \frac{\partial G}{\partial D_i} = E + F_{vib} + E_c \frac{dn}{dD_i} \\ &- E_v \frac{dp}{dD_i} - T \left(\frac{dS_n}{dD_i} + \frac{dS_p}{dD_i} + \frac{dS_k}{dD_i} \right), \end{aligned}$$

отримаємо для високих температур:

$$\begin{aligned} \mu_{D_i}^S &= E_i + F_{vib,i} - kT \ln \left(\frac{N_J - \sum [D]}{[D]} \right) \\ &+ \left[\begin{aligned} &E_c - kT \left(\ln \frac{N_C - n}{n} - \frac{N_C}{2n} \ln \frac{N_C - n}{N_C} \right) + \\ &p \left(E_V + kT \left(\ln \frac{N_V - p}{p} \right) \right) \end{aligned} \right] \cdot \frac{b}{kT} \frac{\partial \mu}{\partial D}. \end{aligned} \quad (6)$$

Таким чином, для розрахунку рівноважної концентрації точкових дефектів при двотемпературному відпалі розв'язується система рівнянь типу (3), в якій хімічні потенціали визначаються з рівнянь (4) та (6). Кожне таке рівняння записується для всіх точкових дефектів, що присутні у кристалі. Систему рівнянь розв'язували шляхом мінімізації квадратичної функції від нев'язок за допомогою математичного пакету MAPLE.

3.2. Енергії утворення та йонізації точкових дефектів

Енергії йонізації дефектів приймалися рівними значенням, отриманим у [10]. Зокрема, у [10] встановлено, що положення рівнів заселеності вакансій визначаються міжелектронною взаємодією. Остання враховувалась у рамках обмеженого наближення Хартрі-Фока. Виявилось, що міжелектронна взаємодія сильно трансформує раніше запропоновану модель Паради і Пратта [11]. Так, наприклад, V_{Pb} у PbTe призводить до виникнення енергетичного рівня у забороненій зоні, що відсутній в одноелектронній теорії. Незначною варіацією параметрів моделі можна добитися точного співпадіння рівня заселеності вакансії плюмбуму з відомим експериментальним значенням на 75 меВ нижче зони провід-

ності плумбум телуриду [10]. Експеримент також вказує на акцепторний характер цього рівня [10].

Основний результат розрахунку, проведеного у [10] без підгоночних параметрів, полягає в тому, що він передбачає існування рівнів перезарядки вакансій в A^4V^6 поблизу країв дозволених зон.

Визначений у роботі рівень $E_C - 0,075$ eВ відповідає переходу V_{Pb} з однократного в двократний акцепторний стан, а рівень $E_C + \approx 0,2$ eВ – переходу V_{Te} з однократного в двократний донорний стан. Рівні нейтральних станів вакансії металу $E_V - \approx 0,8$ eВ і вакансії халькогену $E_C + \approx 0,7$ eВ лежать далеко від країв забороненої зони.

Варто зазначити, що у роботі [12] методом низькотемпературної калориметричної спектроскопії в полікристалічних зразках n-PbTe з незначним ($\approx 0,1$ ат %) надлишком свинцю виявлена δ -подібна особливість у густині станів зони провідності, інтерпретована як вузька ($\approx 0,01$ eВ) смуга резонансних станів, пов'язаних з вакансійними дефектами у аніонній підгратці досліджуваних зразків. Оцінка енергетичного положення вакансійного рівня над краєм зони провідності на основі даних про залежність $\epsilon_F(n)$ для PbTe при $T=77$ К дає величину $\epsilon_1(V_{Te})=165\pm 15$ меВ, що добре узгоджується з результатами розрахунку [10].

При розрахунку концентрацій точкових дефектів вважали, що з ростом температури енергія йонізації дефекту зростає пропорційно до збільшення відстані між зоною провідності та зоною легких дірок.

Енергії утворення точкових дефектів були прийняті рівними значенням, отриманим у роботі [13] ($E_0(V_{Pb})=2.48$ eВ, $E_0(V_{Te})=1.94$ eВ), які водночас є близькими до значень, отриманих у [14] ($E_0(V_{Pb})=2.187$ eВ, $E_0(V_{Te})=2.135$ eВ). Проте такий вибір не дозволив кількісно правильно пояснити експериментальні дані. Тому значення енергій утворення вважали варіаційним параметром. Також варіаційними параметрами вважали зміни частот коливань атомів в околі дефектів, оптимальні значення яких наведені у табл.2.

Таблиця 2. Енергетичні параметри точкових дефектів у кристалах PbTe

	V_{Pb}	V_{Te}
$E_0, \text{eВ}$	4,18	3,19
$\epsilon_1, \text{eВ [10]}$	$E_C-0,075$	$E_C+0,165$
$\epsilon_2, \text{eВ [10]}$	$E_V-0,8$	$E_C+0,7$
x	6	6
ω/ω_0	2,90	4,00

3.3. Обговорення результатів дослідження

Розраховані концентрації точкових дефектів в залежності від температури відпалу T та парціального тиску пари телуру P_{Te} представлені на рис.10-11. Параметри, що при цьому використовувались, наведено у табл.3. Як видно, теоретично визначені концентрації вільних носіїв задовільно описують експериментальні дані.

Таблиця 3. Основні параметри кристалів PbTe

Параметр	Значення	Література
Внутрішня частота коливань молекули Te_2	$0,625102 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$	[15]
Відстань між ядрами у молекулі Te_2	$2,59 \cdot 10^{-10} \text{ м}$	[15]
Константа $K = P_{\text{Te}_2}^{1/2} P_{\text{Pb}}$	$K = 10^{(-17720/T+9,54)} \cdot (101325)^{3/2}$, $\text{Па}^{3/2}$	[8]
$E_g (0 < T < 300)$, еВ	$0,18 + 4 \cdot 10^{-4} \cdot T$	[16]
$E_g (T > 400)$, еВ	0,38	[17]
Ефективна маса електронів	$0,142 \cdot m_0 \cdot (T/120)^{0,4}$	[7]
Ефективна маса дірок легких	$0,142 \cdot m_0 \cdot (T/120)^{0,4}$	[16]
Ефективна маса дірок важких	$1,10 \cdot m_0$	[18]
Температура Дебая	$T_\theta = 125 \text{ К}$	[9]

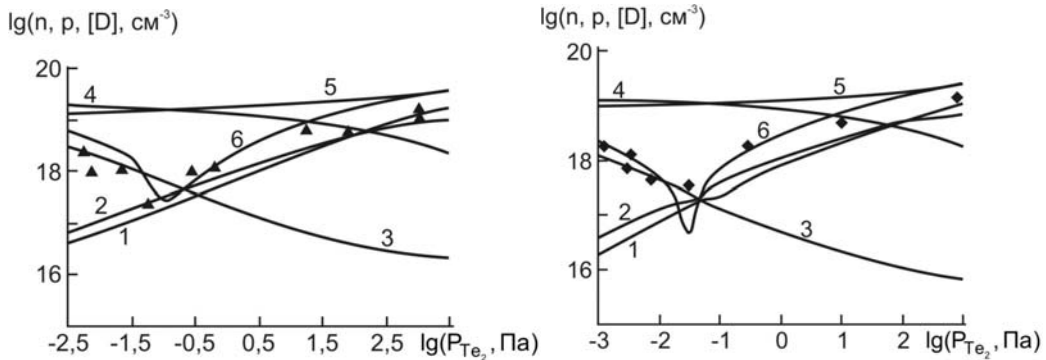


Рис.10. Залежність концентрації точкових дефектів $[D]$ (1 – V_{Pb}^- ; 2 – V_{Pb}^{2-} ; 3 – V_{Te}^{2+}), електронів (n – 4), дірок (p – 5) та холлівської концентрації (n_H – 6) у PbTe від тиску пари телуру P_{Te_2} при двотемпературному відпалі за температури (T , К): 918 (а); 973 (б). Криві – розрахунок, точки – експеримент [16]

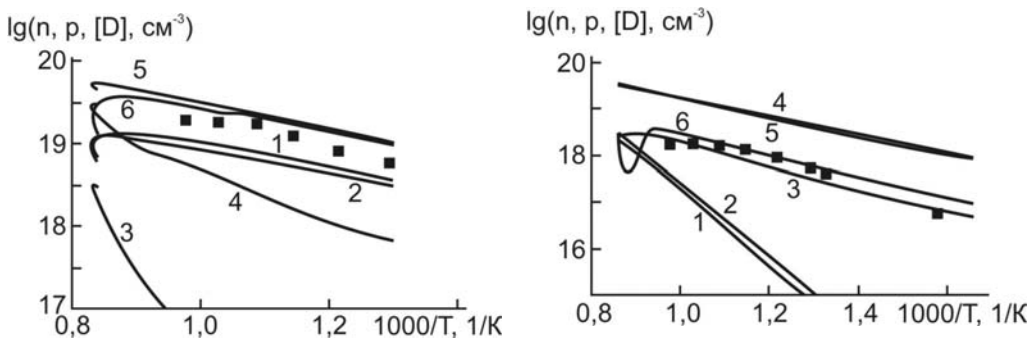


Рис.11. Залежність концентрації точкових дефектів $[D]$ (1 – V_{Pb}^- ; 2 – V_{Pb}^{2-} ; 3 – V_{Te}^{2+}), електронів (n – 4), дірок (p – 5) та холлівської концентрації (n_H – 6) у PbTe від температури відпалу T при максимальному тиску пари телуру P_{Te_2} (а) і свинцю P_{Pb} (б) в умовах високотемпературної рівноваги. Криві – розрахунок, точки – експеримент [16]

Згідно проведеного розрахунку, в матеріалі, насиченому свинцем, домінуючими дефектами є двократно йонізовані вакансії телуру (V_{Te}^{2+}), а насиченому телуrom – однократно і двократно йонізовані вакансії плюмбуму (V_{Pb}^{-} , V_{Pb}^{2-}). При фіксованому значенні температури відпалу із зростанням тиску пари телуру концентрація двократно заряджених вакансій плюмбуму росте швидше, ніж однократно заряджених вакансій, таким чином, що в околі n-p-переходу домінуючими є V_{Pb}^{2-} , а при максимальному тиску пари телуру – V_{Pb}^{-} (рис.10).

Залежність концентрації точкових дефектів та носіїв струму від температури представлена на рис.11 при максимальному тиску пари свинцю в умовах високотемпературної рівноваги.

Концентрації нейтральних вакансій плюмбуму та нейтральних і однократно йонізованих вакансій телуру є набагато меншими, аніж концентрації вище перелічених дефектів, через що на графіку їх залежності не наведені. Варто зазначити, що за умови справедливості прийнятої моделі розташування енергетичних рівнів вакансій, для того щоб концентрації нейтральних дефектів були співмірними з концентраціями йонізованих, необхідно, щоб рівень Фермі знаходився глибоко у дозволенних зонах: $E_{\text{V}} \approx 0,8$ eV – для вакансії плюмбуму, $E_{\text{C}} \approx 0,7$ eV – для вакансії телуру. Оскільки досягнути такого виродження практично неможливо, то при розрахунку дефектної підсистеми можна використовувати моделі, що не враховують нейтральних дефектів.

Отримані при моделюванні більші значення енергій утворення дефектів у порівнянні з літературними даними можуть бути пояснені особливостями електронної підсистеми кристалів плюмбум телуриду, що не завжди вдається врахувати при розрахунках. Так, зокрема, прості моделі на зразок [13], що використовувались при обчисленні енергій утворення вакансій, не враховують спин-орбітальної взаємодії, яка є суттєвою у кристалах PbTe [19]. Також при розрахунках не враховано деформацій ґратки в околі дефектів, зумовлених ефектом Яна-Тейлора [10, 20], що також може суттєво (на кілька десятків електрон-вольт) змінити енергію утворення йонізованих дефектів.

Проте, варто зазначити, що запропонована модель досить точно описує дані холлівських вимірювань та температурну залежність лінії солідусу з боку надлишку свинцю та телуру, що може бути підтвердженням її адекватності.

Висновки

1. На основі запропонованих кристалохімічних формул нестехіометричного n- і p-PbTe зі складним спектром точкових дефектів: V_{Pb}^{2-} , V_{Pb}^{-} , V_{Te}^{2+} , Pb_i^{2+} , Te_i^0 розраховано залежності холлівської концентрації та концентрації точкових дефектів від величини відхилення від стехіометрії.

2. Показано, що діркова провідність плюмбум телуриду пов'язана із вакансіями у катіонній V_{Pb}^{2-} , V_{Pb}^- , а електронна – у аніонній V_{Te}^{2+} підгратках кристалічної структури плюмбум телуриду.

3. За допомогою квазіхімічних реакцій процесів дефектоутворення в кристалах плюмбум телуриду при двотемпературному відпалі уточнено значення констант рівноваги для дефектів різного зарядового стану.

4. Методами термодинамічних потенціалів розраховано баричні та температурні залежності концентрації точкових дефектів, вільних носіїв струму та холлівської концентрації. Встановлено технологічні умови, при яких формується матеріал n- або p-типу провідності.

Література

1. Абрикосов Н.Х. Полупроводниковые материалы на основе соединенной $A^{IV}B^{VI}$ / Н.Х.Абрикосов, Л.Е.Шелимова. – М.: Наука, 1975. – 195 с.
2. KITTEL C. Introduction to Solid State Physics, 7rd edition / Charles Kittel. – Wiley, 1996. – 689 p.
3. Dariel M.P. Carrier concentration gradient generated in p-type PbTe crystals by unidirectional solidification / M.P. Dariel, Z. Dashevsky, A. Jarashnely, S. Shusterman, A. Horowitz // Journal of Crystal Growth. – 2002. – V. 234. – P. 164–170.
4. Фреїк Д.М. Кристалохімія і термодинаміка атомних дефектів у сполуках / Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, М.О. Галушак, М.В. Пиц, Г.Д. Матеїк. – Івано-Франківськ.: Плай, 1999. – 164 с.
5. Лисняк С. С. Кристаллохимическая модель исследований в химии твердого тела / С. С. Лисняк // Неорганические материалы. – 1992. – Т. 29, № 9. – С. 1913-1917.
6. Зломанов В.П. Р-Т-х-диаграммы состояния системы металл-халькоген / В.П. Зломанов, А.В. Новоселова. – М.: Наука, 1987. – 207 с.
7. Семенченко В.К. Избранные главы теоретической физики / В.К. Семенченко. – М.: Просвещение, 1966, – 396 с.
8. Румер Ю.Б. Термодинамика, статистическая физики и кинетика / Ю.Б. Румер, М.Ш. Рывкин – М.: Наука, 1972. – 400 с.
9. Дубровская И.Н. Исследование непараболичности зоны проводимости PbTe методом измерения термоэдс в сильном магнитном поле / И.Н. Дубровская, Ю.И. Равич // ФТТ. – 1966. – Т.8, № 5. – С. 1455-1460.
10. Панкратов О.А. Многоэлектронные эффекты и зарядовые состояния вакансий в полупроводниках $A^{IV}B^{VI}$ / О.А. Панкратов, П.П. Поваров // ФТТ. – 1988. – Т.30, №3. – С. 880-882.
11. Parada N.J. New Model for Vacancy States in PbTe / N.J. Parada, G.W. Pratt // Phys. Rev. Lett. – 1969. – V. 22, № 5. – P. 180-182.
12. Черник И.А. Прямое наблюдение резонансных состояний, связанных с вакансионными дефектами в халькогенной подрешетке PbTe / И.А. Черник, А.В. Березин, С.Н. Лыков, Е.П. Сабо, Ю.Д. Титаренко // Письма в ЖЭТФ. – 1988. – Т. 48, В. 10. – С. 550-553.

13. Прокопів В.В. Енергії утворення моновакансій у кристалах A^3B^5 та A^4B^6 / В.В. Прокопів, І.В. Горічок, Л.Д. Юрчишин // Фізика і хімія твердого тіла. – 2010. – Т. 11, № 4. – С. 849-852.
14. Khang H. Theoretical study of deep-defect states in bulk PbTe and in thin films / H. Khang, S.D. Mahanti, J. Puru // Phys. Rev. – 2007. – V 76. – P. 115432-1–115432-18.
15. Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов / Ф. Крегер. – М.: Мир, 1972. – 640 с.
16. Чеснокова Д.Б. Моделирование процессов дефектообразования и свойства халькогенидов свинца / Д.Б. Чеснокова, М.И. Камчатка // НМ. – 2001. – Т. 37, № 2. – С. 157-164.
17. Грузинов Б.Ф. Положение уровня Ферми в сплавах PbTe, легированных примесью In, в области высоких температур / Б.Ф. Грузинов, И.А. Драбкин, Г.Ф. Захарюгина, А.В. Матвеев, И.В. Нельсон // ФТП. – 1979. – Т. 13, № 2. – С. 330-334.
18. Виноградова М.И. Параметры сложной валентной зоны и особенности проводимости в p-PbTe / М.И. Виноградова, В.И. Тамарченко, Л.В. Прокофьева // ФТП. – 1975. – Т. 9, № 3. – С. 483-487.
19. Волков Б.А. Зонная структура полупроводников группы A^4B^6 в приближении сильной связи на p-орбиталях / Б.А. Волков, О.А. Панкратов, А.В. Сазонов // ФТП. – 1982. – Т. 16, № 10. – С. 1734-1742.
20. Заячук Д.М. К вопросу о доминирующих механизмах рассеяния носителей заряда в теллуриде свинца / Д.М. Заячук // ФТП. – 1997. – Т. 31, № 2. – С. 1692-1713.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 18.12.2011 р.
Рекомендовано до друку д.х.н., професором Фреїком Д.М.*

CRYSTAL CHEMISTRY OF DEFECT SUBSYSTEM OF NON-STOICHIOMETRIC LEAD TELLURIDE

L. V. Turovska

*PreCarpathian National University by V. Stefanyk\$
76018, Ivano-Frankivs'k, Shevchenko st., 57;
ph. +380 (342) 59-60-82; e-mail: freik@pu.if.ua*

Quasichemical and crystal-quasichemical formulae of defect subsystem in nonstoichiometric PbTe crystals are offered. Values of equilibrium constants of quasichemical reactions of intrinsic point defects formation in lead telluride are revised. Using the method based on minimizing of the thermodynamic potential of "crystal-pair" system as a function of defect concentration, equilibrium concentration of point defects and free charge carriers, depending on technological factors two-temperature annealing are calculated.

Keywords: *lead telluride, crystal-quasichemistry, quasichemistry, point defects, equilibrium constants, two-temperature annealing, the thermodynamic potential.*

Нафтогазова

справа

УДК 622.276.1/7

УЗГОДЖЕННЯ РОБОТИ НАФТОВОГО ПОКЛАДУ І СВЕРДЛОВИНИ В ЧАСІ ЗА УМОВ ГАЗЛІФТНОГО ФОНТАНУВАННЯ ПРИ ПРОЕКТУВАННІ ТА ЕКСПЛУАТАЦІЇ СВЕРДЛОВИНИ

В. С. Бойко, Б. М. Міщук, Т. С. Веклин

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-21-95; e-mail: public@nung.edu.ua*

Досліджено спільну взаємно пов'язану роботу фонтанної свердловини і нафтового покладу при режимі розчиненого газу, що уможливорює розрахунок зміни в часі мінімального вибійного тиску.

Запропоновано методику розрахунку умови спільної роботи покладу і фонтанної свердловини на основі розв'язання рівнянь фільтрації флюїдів у пласті і руху газоводонафтового потоку у стовбурі свердловини. Виділено режими узгодженої і неузгодженої роботи цих двох ланок, а також стійкої і нестійкої роботи, що слід враховувати при проектуванні та експлуатації свердловин.

***Ключові слова:** нафтовий поклад, газліфтне фонтанування, режим розчиненого газу, вибійний тиск.*

Фонтанний спосіб експлуатації нафтових свердловин базується на використанні природної пластової енергії і, як природний спосіб, є найраціональнішим. Тому продовження тривалого періоду фонтанування залишається актуальним завданням на кожному нафтовому родовищі. Одним із найбільш доступним напрямків продовження тривалості є узгодження роботи свердловини і покладу в часі протягом усього “життя” цих двох послідовних ланок системи видобування нафти. У кількісному аспекті таке узгодження у часі не знайшло належного висвітлення в літературі. В якісному аспекті механізм узгодження роботи відомий [1,2], а в роботі [3] розглядаються тільки два режими (оптимальний і максимальний), хоч замовчується питання щодо достатньої кількості пластового газу для фонтанування, оскільки в даному випадку він є характерною пластової енергії. У нашій статті спільна робота нафтового покладу і свердловини кількісно узгоджується через вибійний тиск, оскі-

льки приплив флюїдів із пласта і піднімання рідини у стовбурі свердловини відбувається за рахунок пластової енергії.

Внаслідок нерозривності газонафтового потоку в системі "поклад-свердловина" тривале фонтанування свердловини є можливим лише за умови рівності витрат рідини, яка припливає із пласта ($Q_{пл}$), і рідини, котра піднімається на поверхню у стовбурі свердловини ($Q_{під}$), а тоді умову спільної узгодженої роботи покладу і свердловини записуємо так [2]:

$$Q_{пл} = Q_{під} = Q. \quad (1)$$

Фільтрація рідини в покладі (в продуктивному пласті) відбувається за лінійним чи нелінійним законами. Причин порушення лінійного закону фільтрації можна назвати багато (інерційні сили, деформації тріщин пласта, виділення газу із нафти, підключення інших пропластків в роботу і т. д.) [2]. При цьому опуклі до осі дебіту індикаторні лінії пов'язуються з газонапірним, розчиненого газу, гравітаційним чи мішаними режимами роботи нафтового покладу. Тому з метою узагальнення аналізу припливу до видобуваної продукції з витратою $Q_{пл}$ у свердловину описуємо узагальненим степеневим рівнянням нелінійного закону фільтрації у вигляді [4] (індикаторна лінія):

$$Q_{пл} = K'_0 (p_{пл} - p_e)^n = Q_{пл}(p_e), \quad (2)$$

де $p_{пл}$ – пластовий тиск (в околі свердловини, яка розглядається); p_e – тиск на вибої свердловини під час її роботи (вибійний тиск); n – показник режиму фільтрації ($1 \geq n \geq 0,5$); K'_0 – коефіцієнт пропорційності, а за $n=1$ – коефіцієнт продуктивності свердловини K_0 . Звідси випливає, що витрата рідини із пласта $Q_{пл}$ є функцією вибійного тиску p_e .

Фонтанна свердловина в разі газліфтного фонтанування (другий і третій типи фонтанування свердловини із початком виділення газу із нафти відповідно у стовбурі або в пласті) – це газорідинний піднімач, роботу якого можна описати такою функціональною залежністю (криві ліфтування) [2]:

$$Q_{нід} = Q_{нід}(V_0, p_1, p_2, L, d, \bar{\rho}, \bar{\mu}, \sigma) \quad (3)$$

де V_0 – об'ємна витрата вільного газу в газліфтному піднімачі, необхідна для його роботи; p_1 – тиск біля башмака ліфтових труб; p_2 – гирловий тиск (тиск на виході із свердловини, який ув'язує роботу системи "поклад-свердловина" із системою збору і підготовки видобуваної продукції); L, d – довжина і внутрішній діаметр ліфтових труб; $\bar{\rho}, \bar{\mu}$ – відношення відповідно густин і динамічних коефіцієнтів в'язкості фаз газорідинної суміші; σ – поверхневий натяг на межі розподілу фаз.

Оскільки витрата вільного газу V_0 зумовлена витратою припливу рідини за рівнянням (2), оскільки газ вивільняється із нафти при зниженні тиску в ній, а тиск p_1 біля башмака пов'язаний із вибійним тиском p_e , наприклад, у свердловині другого типу формулою

$$p_e = p_n + (H - L)\rho g, \quad (4)$$

то маємо такі додаткові функціональні залежності:

$$V_0 = V_0[Q_{пл}(p_e)] = V_0(p_e); \quad (5)$$

$$p_1 = p_1(p_e), \quad (6)$$

де p_n – тиск насичення нафти газом; H – глибина свердловини; ρ – густина рідини у свердловині; g – прискорення вільного падіння, причому у свердловинах другого типу $p_1 = p_n$, $L \leq H$, при $L = H$ тиск $p_1 = p_e = p_n$, а у свердловинах третього типу $L = H$, $p_1 = p_e < p_n$.

Тоді за сталих інших параметрів для конкретної свердловини приходимо до функціональної залежності

$$Q_{nid} = Q_{ni0}(p_e), \quad (7)$$

тобто через вибійний p_b тиск ув'язується робота покладу із роботою свердловини згідно із (1).

Розв'язком (коренем) рівняння (2) є шуканий вибійний тиск p_b . Спільне розв'язання рівнянь індикаторної лінії (2) і модифікованої (залежно від вибійного тиску стосовно фонтанної свердловини) кривої ліфтування (7) показано точки (чи точка) перетину ліній $Q_{nl}(p_e)$ і $Q_{ni0}(p_e)$ характеризують спільну узгоджену роботу покладу і свердловини ($Q_{nl} = Q_{ni0}$), а в решті випадків має місце неузгоджена робота ($Q_{nl} > Q_{ni0}$ або $Q_{nl} < Q_{ni0}$). Точці Н відповідає нестійка робота, оскільки найменші коливання вибійного тиску p_b спричиняють зривання фонтанування (точка 3), коли $Q_{ni0} = 0$, або перехід роботи в точку С. Це легко усвідомити, узгодивши зміну вибійного тиску p_b зі зміною висоти динамічного рівня h_o рідини у свердловині ($p_b = h_o \rho g$), наприклад, для свердловини другого типу. Якщо $Q_{nl} > Q_{ni0}$, то рідина, яка припливає, накопичується у стовбурі, і зростає вибійний тиск p_b , а за $Q_{nl} < Q_{ni0}$, навпаки, вибійний тиск p_b знижується. У такому розумінні точка С – це точка стійкої спільної узгодженої роботи пласта і піднімача.

Таким чином, тривале газліфтне фонтанування можливе тільки за однієї цілком певної величини вибійного тиску p_b . У разі зміни параметрів p_2 , L , d точка С стійкої спільної узгодженої роботи переміщуватиметься вздовж індикаторної лінії $Q_{nl}(p_e)$ відповідно до їх зміни угору або вниз (параметри p_2 , L , d технолог має змогу змінювати, наприклад, гирловий тиск за допомогою штуцера).

Проте за деякого поєднання цих параметрів, наприклад, за великого значення тиску на гирлі p_2 , модифікована крива ліфтування $Q_{ni0}(p_e)$ може не перетинатися з індикаторною лінією $Q_{nl}(p_e)$. Тоді фонтанування не відбуватиметься.

Модифікована крива ліфтування на рис.1 нарисована якісно. Її ніхто ще не розрахував. Будують графіки такої лінії або за лабораторними даними, або за даними промислового дослідження газліфтною (не фонтанною!) свердловини, або, в крайньому випадку, за трьома розрахунковими точками стосовно газліфтною свердловини (початок ліфтування, оптимальний і максимальний режими), використовуючи напівемпіричні формули О.П. Крилова [2]. Ми пропонуємо розрахункову методику побудови модифікованої кривої ліфтування стосовно фонтанної свердловини при газліфтному фонтануванні.

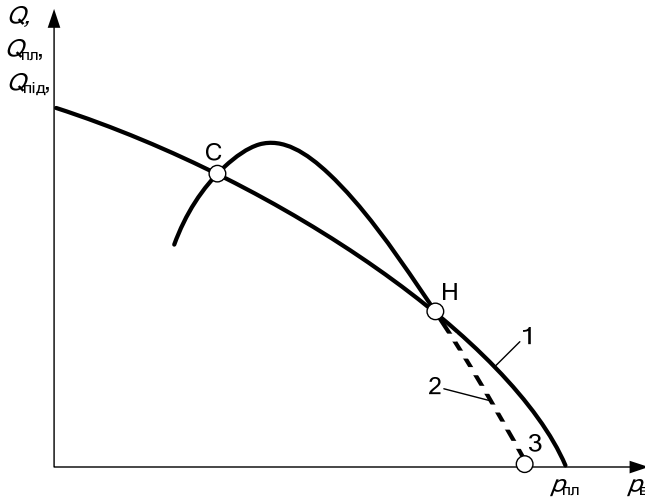


Рис.1. Графік спільної роботи нафтового покладу і фонтанної свердловини за газліфтного фонтанування: 1 – індикаторна лінія $Q_{пл}(p_в)$; 2 – модифікована крива ліфтування $Q_{від}(p_в)$; $p_{пл}$ – пластовий тиск

Методика розрахунку зводиться, в першу чергу, до побудови кривої розподілу тиску вздовж ліфтових труб газорідинного піднімача за одним із методів, описаних у монографії. В основу методики покладено гідродинамічну модель руху газорідинної суміші у вигляді:

$$\varepsilon = \frac{1}{\rho_p g} \frac{dp}{dl} = \frac{\rho_c}{\rho_p} + \frac{1}{\rho_p g} \left(\frac{dp}{dl} \right)_T + \frac{1}{\rho_p g} \left(\frac{dp}{dl} \right)_{in}, \quad (8)$$

де ε – загальний градієнт тиску, який виражено висотою стовпа рідини густиною ρ_p , що припадає на одиницю довжини труби; g – прискорення вільного падіння; ρ_c – густина газорідинної суміші; $\frac{1}{\rho_p g} \left(\frac{dp}{dl} \right)_T$ – градієнт тиску, який зумовлений силами гідравлічного опору і виражений висотою стовпа рідини густиною ρ_p , що припадає на одиницю довжини труби; $\frac{1}{\rho_p g} \left(\frac{dp}{dl} \right)_{in}$ – градієнт тиску, який зумовлений інерційними силами.

Усі складові цього рівняння є безрозмірними величинами, що полегшує розрахунки і узагальнення результатів дослідження.

У даній роботі для розрахунку розподілу тиску газорідинної суміші в піднімальних насосно-компресорних трубах та експлуатаційній колоні використано підмодель гомогенного (однорідного) руху, зокрема за методом Поетманна-Карпентера [5].

Розрахунки ряду кривих розподілу тиску в ліфтових трубах виконуємо за принципом “зверху-вниз” від гирлового тиску p_2 , задаючись цим тиском, витратою (дебітом) рідини Q та експлуатаційним газовим фактором. Інші характеристики флюїдів (нафти, газу, води), свердловини і режиму її роботи відомі. Для кожної кривої розподілу тиску задаємо одну конкретну витрату Q і одне значення газового фактора, а для побудови ряду кривих задаємо інші значення

витрати Q і газового фактора, починаючи від найменших, і знаходимо невідомі тиски p_v , які відповідають заданим дебітам Q (рис.2).

Для коректного розрахунку всю глибину L опускання (у вертикальних свердловинах – довжину) ліфтових труб розбиваємо під час розрахунку на ділянки (зверху-вниз): а) руху газоводонафтової суміші (від тиску p_2 до тиску p_n насичення нафти газом); б) руху водонафтової (рідинної) суміші (чи тільки нафти в необводнених свердловинах). При цьому на першій ділянці розглядаємо рух у ліфтових (насосно-компресорних) трубах, а на другій – в експлуатаційній колоні, тобто глибина опускання ліфтових труб L рівна глибині рівня тиску насичення (як це слід забезпечувати, з технологічної точки зору, у фонтанних свердловинах 2-го типу). Хоча можуть бути й інші випадки щодо довжини ліфтових труб, що нерідко зустрічається на практиці, а тоді на цих двох ділянках слід виділяти інтервали руху газоводонафтової суміші (суть методики від цього не змінюється).

Якщо у ході розрахунку кривої розподілу тиску $p(z)$ вздовж вертикальної координати z виявляється меншим або рівним тиску p_n , тобто $p(z) \leq p_n$, то ліфтові труби опускаємо до вибою свердловини, $L \cong H$, де H – глибина свердловини (у свердловинах 3-го типу). У свердловинах 3-го типу газ виділяється із нафти у стовбурі (як і у свердловинах 2-го типу), а також у вільному стані надходить у свердловину із покладу. Кількість вільного газу, що надходить із покладу, можна оцінити за формулою закону Генрі (у покладі режим розчиненого газу розвивається не повністю, не в усьому об'ємі зони дренування) або розрахувати за аналітичною методикою чи за методикою чисельного моделювання процесу розробки покладу.

Побудова кожної кривої розподілу тиску $p(z)$ завершується визначенням невідомого вибірного тиску p_v на глибині H , що відповідає заданому дебіту.

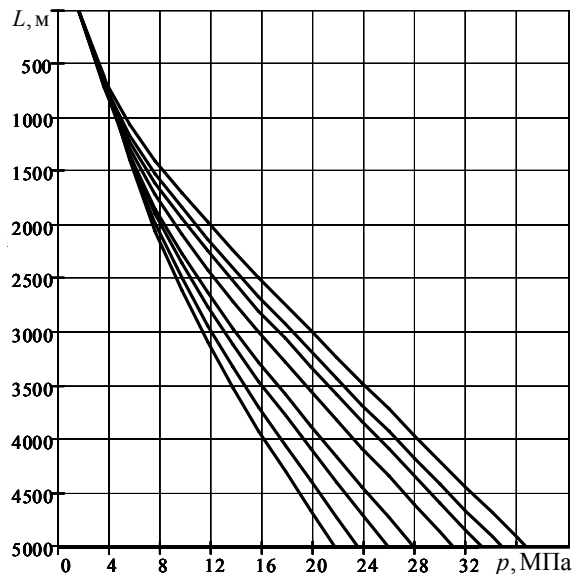


Рис.2. Криві розподілу тиску $p(z)$ уздовж стовбура фонтанної свердловини

За сукупністю відповідних значень Q і p_b (знайдених для ряду кривих розподілу тиску) будуємо криву ліфтування залежно від вибійного тиску p_b (аналогічно рис.1). На цей графік накладаємо індикаторну лінію і встановлюємо можливість або відсутність (лінії не перетинаються) фонтанування. Це показано на рис.3.

Відтак задаємо інше значення тиску p_2 і повторюємо розрахунки.

У разі потреби задаємо ще й інше значення діаметра ліфтових труб.

Для розрахунків нами прийнято: $H = 5000 \text{ м}$; $d = 0,073 \text{ м}$ (зовнішній діаметр НКТ); $T_{nl} = 390 \text{ К}$ (пластова температура); $G = 100 \text{ м}^3/\text{м}^3$ (газонасиченість пластової нафти); $p_n = 860 \text{ кг}/\text{м}^3$ (густина розгазованої нафти); $p_b = 1100 \text{ кг}/\text{м}^3$ (густина пластової води); $n_e = 0,3$ (об'ємна обводненість продукції); $p_{nac} = 40 \text{ МПа}$ (тиск насичення нафти газом); $p_{nl} = 43 \text{ МПа}$ (пластовий тиск); $p_{e1} = 1,5 \text{ МПа}$ (гирловий тиск, крива 1); $p_{e2} = 1 \text{ МПа}$ (крива 2); $p_{e3} = 0,5 \text{ МПа}$ (крива 3).

Криві розподілу тиску (рис.2) побудовані при гирловому тиску $p_{e1} = 1,5 \text{ МПа}$, витраті Q та газовому факторі G_0 , які змінюються в межах відповідно від 0 до $140 \text{ м}^3/\text{добу}$ та 0 до $750 \text{ м}^3/\text{м}^3$.

Таким чином, запропонована методика узгодженої роботи свердловини і пласта при газліфтному фонтануванні ($Q_{nl} = Q_{nid}$) оптимальна і тривала робота можлива лише в тому випадку, коли маємо спільне розв'язання рівнянь індикаторної лінії та модифікованої кривої ліфтування. Тоді отримуємо точки (чи точку) перетину ліній $Q_{nl}(p_e)$ і $Q_{nid}(p_e)$ (рис.3). У свою чергу, тривале газліфтне фонтанування можливе тільки за одного цілком певного значення вибійного тиску p_b .

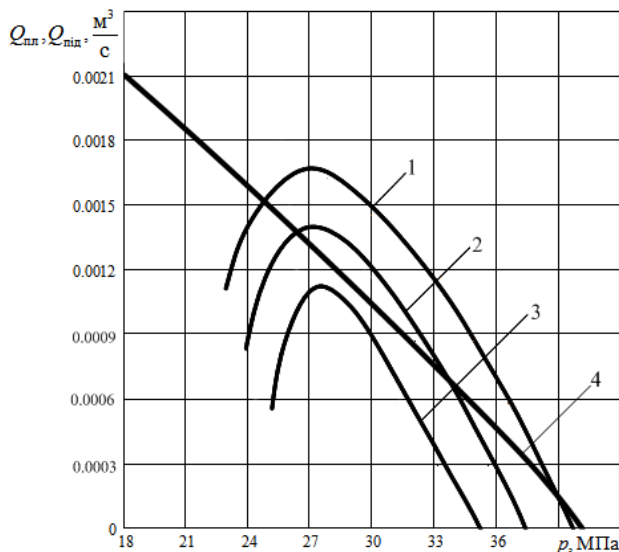


Рис.3. Графік спільної роботи нафтового покладу і фонтанної свердловини при газліфтному фонтануванні. 1,2,3 – криві ліфтування; 4 – індикаторна лінія

Змінюючи параметри p_2 , L , d , точка C стійкої спільної узгодженої роботи переміщуватиметься вздовж індикаторної лінії $Q_{nl}(p_g)$ відповідно до їх зміни угору або вниз. На виробництві технолог має змогу змінювати, наприклад гирловий тиск за допомогою штуцера, що й дає змогу досягти узгодження роботи нафтового покладу і свердловини в часі за умов газліфтного фонтанування.

Література

1. Бойко В.С. Розробка та експлуатація нафтових родовищ: Підручник для вищих навчальних закладів з грифом Міносвіти і науки України. 4-е доповнене видання / В.С.Бойко. – Київ: Міжнародна економічна фундація, 2008. – 488 с.
2. Бойко В.С. Підземна гідрогазомеханіка: 2-ге видання / В.С.Бойко, Р.В.Бойко. – Львів: Априорі, 2007. – 452 с.
3. Мищенко И.Т. Скважинная добыча нефти / И.Т.Мищенко. – Москва: “Нефть и газ” РГУ нефти и газа им. И. М.Губкина, 2003. – 836 с.
4. Бойко В.С. Проектування експлуатації нафтових свердловин: Підручник, для студентів ВНЗ / В.С.Бойко. – Івано-Франківськ: Нова Зоря, 2011. – 784 с.
5. Обводнення газових і нафтових свердловин. У 3-х томах, 4-х книгах / В.С.Бойко, Р.В.Бойко, Л.М.Кеба, О.В.Семінський; За ред. В.С.Бойка. – Том 3. – Особливості експлуатації свердловин. Книга друга. – Івано-Франківськ: Нова Зоря, 2011. – 701 с.

Стаття надійшла до редакційної колегії 28.12.2011 р.

Рекомендовано до друку д.т.н., професором Тарком Я.Б.

TIME MATCHING OF WORK OF OIL POOL AND WELL UNDER A GAS-LIFT FLOWING DURING WELL PLANNING AND OPERATION

V. S. Boiko, B. M. Mishchuk, T. S. Veklyn

Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;

76019, Ivano-Frankivs'k, Carpat'ska st., 15;

ph. +380 (3422) 4-21-95; e-mail: public@nung.edu.ua

Joint and interdependent operation of flowing well and oil pool in the mode of dissolved gas, which allows to calculate the time change of minimum bottom-hole pressure was investigated.

Methodology for calculating the conditions of joint operation of oil pool and flowing well based on solution of equations of fluid filtration in the layer and traffic flow in the well bore was investigated and proposed. Modes of coordinated and uncoordinated work of these two units, as well as steady and uneven operation which must be considered during the design and operation of wells were highlighted.

Key words: *oil pool, gas-lift flowing, mode of cut-in gas, coalface pressure.*

УДК 622.242

**ДОСЛІДЖЕННЯ НАДІЙНОСТІ ТУРБОКОМПРЕСОРІВ
ДИЗЕЛЬНИХ ДВИГУНІВ НАФТОГАЗОВОГО
ТЕХНОЛОГІЧНОГО ТРАНСПОРТУ ТА БУРОВИХ УСТАНОВОК
ЗА НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР НАВКОЛИШНЬОГО
СЕРЕДОВИЩА**

С. І. Криштопа, Л. І. Криштопа

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: retes@mail.ru*

Стаття присвячена дослідженню експлуатаційних режимів роботи дизельних двигунів з турбокомпресорами нафтогазового технологічного транспорту і бурових установок за низьких температур навколишнього середовища. Доведена актуальність питання та проаналізовані недоліки існуючої на даний час технічної документації з експлуатації дизельних двигунів. Проведені експериментальні дослідження величини тиску моторної оливи перед турбокомпресором і витрати моторної оливи через підшипники турбокомпресора. Запропоновані заходи, які дозволять запобігти передчасному виходу з ладу дизельних двигунів з турбокомпресорами нафтогазового технологічного транспорту і бурових установок за низьких температур навколишнього середовища.

Ключові слова: *бурові установки, нафтогазовий технологічний транспорт, силовий привід, дизельні двигуни, турбокомпресори.*

Розвиток газової та нафтової промисловості України пов'язаний з постійним збільшенням енергоозброєності галузі. Буріння свердловин та ефективне функціонування нафтогазового технологічного транспорту вимагає постійного підвищення потужності силових установок. Для збільшення літрової потужності дизельних двигунів з одночасним забезпеченням високої економічності в нафтогазовій галузі в даний час широко використовуються дизельні двигуни з турбонаддувом повітря, наприклад, 6 ЧН 21/21 (в бурових установках ЗД86-1), В2-500ТК-С4 (в НБО-Д), ЯМЗ-238 та КамАЗ-740 (в багатьох установках нафтогазового технологічного транспорту). Тому збільшення ресурсу та надійності турбокомпресорів таких двигунів є актуальним завданням для фахівців нафтогазової галузі.

Одним з найнесприятливіших експлуатаційних режимів роботи дизельного двигуна з турбокомпресором є режим пуску при низьких (нижче 0⁰С) температур. В цих умовах спостерігається значна затримка надходження моторної оливи до підшипників турбокомпресора, обумовлена гідравлічним опором трубопроводів на лінії всмоктування оливного насоса і на лінії нагнітання оливи підвищеної в'язкості. Затримка надходження моторної оливи призводить до зміни гідродинамічних умов роботи підшипників турбокомпресорів, і при порушенні режиму

прогрівання дизельного двигуна після пуску можлива відмова турбокомпресорів.

Несприятливі моменти, що супроводжують пуск дизельних двигунів з турбокомпресорами за крайніх температур навколишнього середовища, на даний час недостатньо враховані в рекомендаціях з експлуатації дизельних двигунів, які використовуються, в тому числі, в нафтогазовому технологічному транспорті. Наприклад, Ярославський моторний завод рекомендує обмежувати частоту обертання колінчастого вала дизельного двигуна з турбокомпресором під час його прогрівання. В технічній документації фірми Каммінс зазначено, що під час прогрівання не допускається різке підвищення частоти обертання колінчастого вала дизельного двигуна з турбокомпресором. Фірма Катерпіллер рекомендує обмежувати навантаження на двигун з турбокомпресором під час його прогрівання. Тобто, рекомендації мають занадто загальний характер.

Тому, завданням проведених досліджень було встановити, як залежить надійність роботи турбокомпресора від експлуатаційних режимів роботи двигуна та його технічного стану. Експериментальні дослідження проводились узимку 2010-2011 року на дизельному двигуні з турбокомпресором ЯМЗ-238, який використовується в багатьох установках нафтогазового технологічного транспорту.

Будова системи мащення цього двигуна є наступною. Моторна олива з піддону дизельного двигуна через сітчастий оливоприймач засмоктується шестеренчастим двосекційним насосом і через повнопоточковий сітчастий фільтр грубого очищення оливи надходить в головний оливний канал. В корпусі фільтру встановлено перепускний клапан. Коли різниця тиску до і після фільтра сягає 0,18-0,23 МПа, клапан відкривається. Після чого частина неочищеної оливи подається безпосередньо в оливну магістраль. Таке підвищення тиску може відбутися при засміченому фільтрі і при великій в'язкості оливи, наприклад, при пуску дизельного двигуна в холодну пору року. З оливного каналу по отворах в блоці циліндрів олива подається до пар тертя двигуна. Під тиском змащуються: корінні і шатунні підшипники колінчастого вала, підшипник у верхній головці шатуна, підшипники кулачкового вала механізму газорозподілу, підшипник проміжної шестерні приводу оливного насоса, вісь коромисла, паливний насос високого тиску, регулятор, поршневий компресор. З головного каналу частина оливи (близько 10%) подається до відцентрового фільтру очищення оливи. З відцентрового фільтру очищення далі олива зливається в піддон. В корпус підшипників турбокомпресора олива поступає з головного оливного каналу через спеціальний фільтр з паперовим фільтруючим елементом. Тонкість фільтрації оливи складає приблизно 30 мкм. З турбокомпресора олива зливається в піддон двигуна. Радіаторна секція оливного насоса подає оливу тільки в радіатор охолодження. З радіатора охолоджена олива також зливається в піддон. Особливістю систем мащення дизельних двигунів з турбокомпресорами є, переважно, наявність фільтру перед турбокомпресором.

Турбокомпресор є самою віддаленою від оливного насоса точкою мащення. Ця обставина вимагає дотримання певних умов запуску і прогрівання дизельного двигуна з турбокомпресором, особливо при негативних температурах навколишнього середовища. Основними показниками системи мащення, які впливають на ресурс турбокомпресора є величина тиску моторної оливи перед турбокомпресором та витрата моторної оливи через підшипники турбокомпресора.

Тиск P моторної оливи перед турбокомпресором можна визначити за формулою

$$P = P_n(1 - \Psi) \frac{\rho_o \mu_o}{2} \alpha_g R^2,$$

де P_n – тиск оливного насоса, Ψ – коефіцієнт гідравлічних втрат, ρ_o – густина моторної оливи, μ_o – в'язкість моторної оливи, α_g – коефіцієнт витрати моторної оливи, R – радіус оливного каналу перед турбокомпресором.

Витрата V моторної оливи через підшипники турбокомпресора знаходиться за залежністю

$$V = 2\alpha F_c \sqrt{\frac{2P}{\rho_o}},$$

де F_c – площа перерізу оливного каналу перед турбокомпресором.

Для визначення часу затримки надходження оливи до підшипників турбокомпресора та часу підняття тиску до рівня, встановленого нормативно-технічною документацією, були проведені дослідження за типових для України зимових температур. Пуски дизельного двигуна проводились при температурах мінус 5, мінус 10 та мінус 15°C та різними станами фільтруючих елементів фільтру турбокомпресора. Випробування проводили в однакових умовах на оливі М8Г₂. Визначення тиску в корпусі вузла підшипників і різних точках системи мащення двигунів, проводили цифровим давачем тиску. Давач тиску підключався до електронного мотор-тестера. Температуру оливи вимірювали хромель-капельними термопарами. Витрата моторної оливи через корпус підшипників турбокомпресора визначалась об'ємним методом.

Згідно нормативно-технічної документації, для забезпечення нормальної роботи підшипників турбокомпресора, мінімально необхідне значення тиску в корпусі підшипників повинно складати 0,15 МПа, а при пуску необхідно забезпечити витрату оливи через підшипники в діапазоні 150-200 мл за хвилину на оборотах холостого ходу, що відповідає тиску перед турбокомпресором 0,1-0,15 МПа.

Як показали досліди, при пуску дизельного двигуна з новим (чистим) оливним фільтром при температурі мінус 5°C олива до місця відбору з головного каналу до фільтру турбокомпресора поступає через 4-5 секунд, при температурі мінус 10°C олива до турбокомпресора поступає через 7-8 секунд, при температурі мінус 15°C олива до турбокомпресора поступає приблизно через 10-12 секунд.

Затримка надходження оливи до підшипників турбокомпресора при різних станах оливного фільтру дизельного двигуна при температурі мінус 10°C за вказаних вище умов складає: при установці нового елемента – 7-8 секунд; при установці забрудненого елемента, який відпрацював на дизельному двигуні 200 мотогодин – 23-25 секунд; при установці сильно забрудненого елемента, який відпрацював на дизельному двигуні 400 мотогодин – 60-70 секунд.

Підняття тиску перед турбокомпресором до 0,15 МПа при різних станах оливного фільтру дизельного двигуна при температурі мінус 10°C за вказаних вище умов складає: при установленні нового елемента – 14-15 секунд; при установленні забрудненого елемента, який відпрацював на дизелі 200 мотогодин – 60-65 секунд; при установці сильно забрудненого елемента, який відпрацював на двигуні 400 мотогодин – близько двох хвилин.

Таким чином, у ході досліджень були виявлені умови, що дозволяють запускати дизельний двигун за низьких температур, не погіршуючи працездатності вузла підшипників турбокомпресора. Перед пуском дизельного двигуна, який обслуговувався згідно регламенту та, відповідно, з чистим оливним фільтром турбокомпресора після тривалої (6-8 годин та більше) зупинки або заміни моторної оливи, необхідно запобігти передчасному запуску двигуна. Для цього необхідно встановити скобу рейки паливного насоса високого тиску в положення вимкненої подачі палива. Далі, протягом кількох секунд необхідно провертати стартером колінчастий вал без запуску двигуна. Цей час, в залежності від температури навколишнього середовища, повинен складати:

- при температурі мінус 5°C – 5 секунд,
- при температурі мінус 10°C – 8 секунд,
- при температурі мінус 15°C – 12 секунд.

При цьому необхідно переконатись за показами манометра на контрольно-вимірювальному щитку установки, що після прокрутки колінчастого вала дизельного двигуна в холостому режимі з'явився тиск оливи в системі мащення та в головному оливному каналі турбокомпресора. За появи тиску можна пускати двигун.

Експлуатація турбокомпресорного дизельного двигуна з істотно забрудненим оливним фільтром при низьких температурах навколишнього середовища неприпустима. Для появи оливи в каналах турбокомпресора необхідно крутити колінчастий вал двигуна занадто довго, що призведе до виходу з ладу стартера або суттєвого зменшення його ресурсу. Як варіант, можливе використання додаткового оливного насоса попередньої підкачки оливи з електричним або ручним приводом.

При зупинці двигуна та, відповідно, вала турбокомпресора в порожнині корпусу підшипників залишається невелика кількість оливи. Цієї кількості оливи достатньо для виключення пошкодження втулок протягом часу збільшення тиску перед турбокомпресором двигуна, якщо частота обертання колінчастого вала дизеля не перевищує оборотів холостого ходу. За цих умов роботи турбокомпресора не буде змін в поверх-

нях тертя вузла підшипників. Таким чином, після пуску дизель повинен працювати на режимі холостого ходу при частоті обертання не вище 700-800 обертів за хвилину, до появи стабільного тиску оливи перед турбокомпресором в діапазоні 0,1-0,15 МПа:

- за наявності нового фільтруючого елемента – 15 секунд;
- за наявності сильно забрудненого фільтруючого елемента – близько двох хвилин.

Витрата моторної оливи через підшипники турбокомпресора в початковий момент роботи дизельного двигуна при установленні нового фільтруючого елемента та температурі мінус 10°C за вказаних вище умов складає всього 50 мл за хвилину. У міру збільшення частоти обертання ротора різко зростає пропускна спроможність підшипників і при частотах обертання 20-30 тисяч оборотів за хвилину, що відповідає режиму максимального крутного моменту дизельного двигуна, витрата оливи складає вже близько 450 мл за хвилину, що відповідає тиску перед турбокомпресором менше 0,05 МПа.

Така недостатня подача оливи при високій частоті обертання ротора турбокомпресора призводить до втрати стійкості оливного шару у вузлі підшипників, що призводить до контактування поверхонь тертя. При огляді деталей вузла підшипників було відзначено пошкодження ділянок контакту. При тривалому контакті поверхонь спочатку з'являються мікропошкодження, які фіксуються за допомогою мікроскопа. Далі, а особливо за наявності в оливі абразивних частинок, виникають подряпини. Послідовне накопичення мікропошкоджень та подряпин призводить до якісних змін в роботі зв'язаних поверхонь вузла підшипників і, зрештою, до відмови вузла підшипників турбокомпресора при провертанні підшипника відносно корпусу. Наведена модель відмови підшипників турбокомпресора підтверджується і даними експлуатації. При розбиранні такого турбокомпресора характерним є сліди бронзи на валу ротора, втрата рухомості кілець турбінного ущільнення і підвищене нагароутворення. При роботі дизельного двигуна з таким дефектом спостерігається синій дим на випуску та підтікання моторної оливи через з'єднання після турбінного колеса турбокомпресора.

Література

1. Римеров Д.С. Двигатели буровых установок / Д.С.Римеров, М.Б.Астафьев. – М.: Недра, 1986.
2. Дизель В2. Описание и руководство по эксплуатации. – М.: Энергомашэкспорт, 1985. – 251 с.
3. Колчин А.И. Расчет автомобильных и тракторных двигателей: Учеб. пособие для вузов / А.И.Колчин, В.П.Демидов. – М.: Высш. школа, 1980. – 400 с.
4. Губертус Гюнтер. Диагностика дизельных двигателей с турбонаддувом / Гюнтер Губертус. – М.: ЗАО КЖИ “За рулем”, 2004. – 176 с.

5. Греков Л.В. Топливная аппаратура дизелей с турбонаддувом и электронным управлением / Л.В.Греков. – М.: Легион-Автодата, 2003. – 176 с.
6. Ильский А.Л. Расчет и конструирование бурового оборудования: Учеб. пособие для вузов / А.Л.Ильский, Ю.В.Миронов, А.Г.Чернобыльский. – М.: Недра, 1985. – 452 с.
7. Баграмов Р.А. Буровые машины и комплексы: Учебник для вузов / Р.А.Баграмов. – М.: Недра, 1988. – 501 с.
8. Двигатели внутреннего сгорания: Теория поршневых и комбинированных двигателей. Учебник для вузов/ Д.Н.Вырубов, Н.А.Ивашенко, В.И.Ивин и др.; Под ред. А.С.Орлина, М.Г.Круглова. – М.: Машиностроение, 1983. – 372 с.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 13.10.2011 р.
Рекомендовано до друку д.т.н., професором Мойсишиним В.М.*

RESEARCH OF RELIABILITY OF TURBOCOMPRESSORS OF DIESEL ENGINES OF OIL AND GAS TECHNOLOGICAL TRANSPORT AND BORING OPTIONS AT LOW AMBIENT TEMPERATURES

S. I. Kryshchtopa, L. I. Kryshchtopa

*Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;
76019, Ivano-Frankivs'k, Carpathians st., 15;
ph. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: e-mail: retes@mail.ru*

The article is devoted to research of operating office hours of diesel engines with turbocompressors of oil and gas technological transport and boring options at low ambient temperatures. Actuality of question is proved and the lacks of existent presently technical document on exploitation of diesel engines are analysed. Experimental researches of size of pressure of motor butter before turbocompressor and expense of motor butter through bearings of turbocompressor are conducted. Measures which will prevent premature death diesel engines with turbocompressors of oil and gas technological transport and boring options at low ambient temperatures are offered.

Key words: *Drilling units, oil and gas technological transport, power drive, diesel engines, turbocompressor.*

УДК 621.791.052:620.693

ОЦІНКА КІНЕТИКИ ЛОКАЛІЗОВАНИХ КОРОЗІЙНИХ ПОШКОДЖЕНЬ ЗВАРНИХ З'ЄДНАНЬ ТРУБ ЕЛЕМЕНТІВ ПАРОВОДЯНОГО ТРАКТУ

І. М. Дмитрах, Б. І. Колодій, О. Л. Білий, Р. Л. Лещак
*Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України;
79601, Львів, вул. Наукова, 5*

Різноманітні локальні корозійно-механічні та корозійні пошкодження труб елементів пароводяного тракту суттєво впливають на термін їх безпечної експлуатації. У даній роботі для дослідження було взято комбіновані зварні з'єднання труб зі сталей 12Х1МФ (малолегована сталь перлітного класу) та Х18Н10Т (неіржавіюча сталь аустенітного класу). Запропоновано методика розрахунку та прогностичні оцінки максимальної глибини корозійної пошкоджуваності компонентів зварного з'єднання, а також довжини зони корозійної активності зварного з'єднання різнорідних труб залежно від планованого терміну експлуатації в середовищах різного складу, що стануть базовими для побудови критерію руйнування стінки труби.

Ключові слова: *пароводяний тракт, малолегована сталь перлітного класу, неіржавіюча сталь аустенітного класу, комбіноване зварне з'єднання труб, локальні корозійні пошкодження, густина корозійного струму, чисельно-аналітична модель, глибина корозійної пошкоджуваності.*

Вступ

Різноманітні локальні корозійно-механічні та корозійні пошкодження труб елементів пароводяного тракту суттєво впливають на термін їх безпечної експлуатації. Особливо гострою є проблема корозійної пошкоджуваності зварних з'єднань [1].

Оскільки, зварне з'єднання є об'єктом, що складається з основного матеріалу, матеріалу зварного шва та деякої перехідної зони термічного впливу, то з корозійної (електрохімічної) точки зору його можна розглядати як складну багатоелектродну систему. В такій системі [2], з тим чи іншим ступенем імовірності, може протікати цілий спектр, часто конкуруючих між собою, фізико-хімічних процесів, що призводять до деградації механічних властивостей зварного з'єднання як шляхом інтенсивного анодного розчинення матеріалу (виникнення пітингів, корозійних виразок і т.п.), так і шляхом водневого окрихлення зварної зони (прискорення процесів утворення мікротріщин та зародження та розвиток макротріщин). Для таких об'єктів необхідно розвивати методи прогнозування розвитку локалізованих корозійних пошкоджень.

Результати досліджень та їх обговорення



Рис. 1. Об'єкт досліджень

У даній роботі для дослідження було взято комбіновані зварні з'єднання труб зі сталей 12X1МФ (малолегована сталь перлітного класу) та X18H10T (неіржавіюча сталь аустенітного класу) типорозміром $\varnothing 38 \times 4$ (комбіноване зварне з'єднання труб в стані поставки, що експлуатується на Бурштинській ТЕС за температури 545°C та тиску 140 атм.) та $\varnothing 42 \times 4$ (комбіноване зварне з'єднання труб, яке відпрацювало свій ресурс і було замінено через значні локальні корозійні пошкодження, що експлуатувалося на Вуглегірській ТЕС протягом 185 тис. год. за температури 540°C та тиску 38 атм.). Досліджуваний об'єкт зображений на рис. 1.

Використовуючи одержані експериментальним шляхом [3] стандартні електрохімічні параметри (потенціали корозії φ , анодні та катодні питомі поляризаційні опори b , питома електропровідність середовища σ), геометричні розміри досліджуваного об'єкту (півширина зварної зони l і внутрішній радіус r_0) і застосовуючи метод вирівнювання поляризації [3, 4], були одержані розрахункові співвідношення для визначення густини корозійного струму на внутрішній поверхні трубчатих зварних з'єднань сталей 12X1МФ–X18H10T у кожному з компонентів досліджуваного зварного з'єднання (1 - 12X1МФ; 2 - зварна зона; 3 - X18H10T [4]:

$$j_1(l, Z) = \frac{\sigma}{r_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[(\varphi_2 - \varphi_1 - \tilde{\varphi}_1) \exp(\lambda_m l) + (\varphi_3 + \tilde{\varphi}_3 - \varphi_2) \exp(-\lambda_m l)] \exp(\lambda_m Z)}{K_2^2 \lambda_m^2 + 1}; \quad (1)$$

$$j_2(l, Z) = \frac{\sigma}{r_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[(\varphi_3 + \tilde{\varphi}_3 - \varphi_2) \exp(\lambda_m Z) + (\varphi_1 + \tilde{\varphi}_1 - \varphi_2) \exp(-\lambda_m Z)] \exp(-\lambda_m l)}{K_2^2 \lambda_m^2 + 1}; \quad (2)$$

$$j_3(l, Z) = \frac{\sigma}{r_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[(\varphi_2 - \varphi_3 - \tilde{\varphi}_3) \exp(\lambda_m l) + (\varphi_1 + \tilde{\varphi}_1 - \varphi_2) \exp(-\lambda_m l)] \exp(-\lambda_m Z)}{K_2^2 \lambda_m^2 + 1}; \quad (3)$$

де $K_2, \lambda, \tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_3$ - змінні, що впливають з методу вирівнювання поляризації [4].

Одержаний розподіл за співвідношеннями (1)-(3) застосуємо для прогнозування кінетики корозійних пошкоджень. Для такого прогнозування використаємо поняття: фронт, глибина і швидкість корозії [5]. Фронт корозії – поверхня, яка обмежує зі сторони середовища об'єм металу без корозійного пошкодження. В нашому випадку цим фронтом є кінцева поверхня із змінною по осі Z твірною, бо густина корозійного струму на внутрішній поверхні труби залежить від Z і не залежить від

кутової координати. Глибина корозії (h) – нормальна координата точки фронту корозії, відрховувана від вихідної поверхні сплаву. В нас h є функція Z і часу t . Швидкість корозії – величина, яка визначається рівністю

$$v(Z, t) \approx h(Z, t)/t. \quad (4)$$

При аналітичному визначенні $v(Z, t)$ для сплавів приймемо два постулати. 1) Відносний вміст іонів окремих компонентів сплаву на його поверхні такий же, як і в його об'ємі. 2) Вклад окремих компонентів сплаву в сумарний струм електрохімічної корозії пропорційний відносному вмісту іонів цих компонентів на поверхні.

Використавши ці постулати та провівши ряд математичних перетворень прийдемо до співвідношення

$$m^{(p)}(Z, t) = \frac{1}{F} \cdot \frac{j(Z) \cdot S \cdot t}{\sum_{p=1}^P \frac{d_p \cdot Z_p}{A_p}}, \quad (5)$$

де d_p – відносний вміст по масі, A_p – маса атома в атомних одиницях, Z_p – валентність металу F – постійна Фарадея; p – порядковий номер у сплаві із P металів.

Якщо врахувати, що $m = D \cdot S \cdot h$ (D – густина сплаву), то із (4) і (5) одержимо швидкість корозії в m/c :

$$v(Z) = \frac{1}{F \cdot D} \cdot \frac{j(Z)}{\sum_{p=1}^P \frac{d_p \cdot Z_p}{A_p}}. \quad (6)$$

На практиці швидкість корозії визначають в $mm/рік$. Для одержання швидкості в таких одиницях треба m/c перевести в $mm/рік$. Тоді, врахувавши і величину F , одержимо із рівності (6) швидкість корозії в $mm/рік$:

$$v(Z) = \frac{326,8}{D} \cdot \frac{j(Z)}{\sum_{p=1}^P \frac{d_p \cdot Z_p}{A_p}}. \quad (7)$$

Описавши зміну в часі електрохімічних параметрів b, φ для кожного з компонентів з'єднання в першому наближенні за лінійним законом в та використавши співвідношення (1)-(3), (7), було одержано базу даних для визначення в часі глибини пошкодження елементів досліджуваного з'єднання. Використовуючи дану базу, були одержані залежності, за якими можна прослідкувати як змінювалися пошкодження елементів з'єднання різнорідних труб у часі. Схематично це зображено на рис.2.

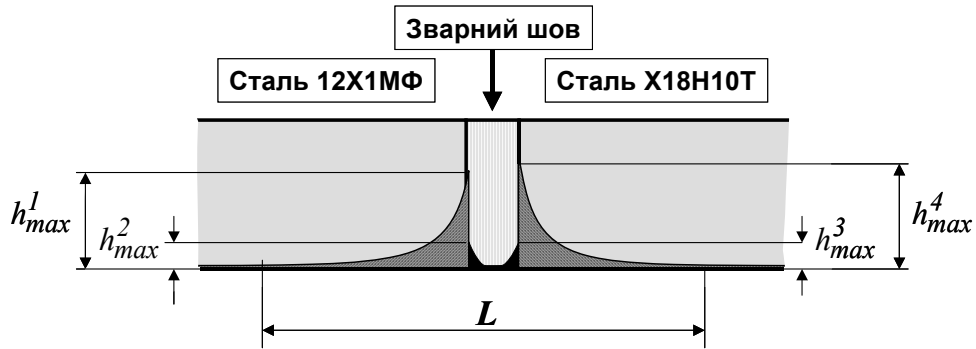


Рис.2. Схематичне представлення пошкоджень на стінках різнорідних труб, зварених кільцевим швом: $h_{\max}^i, i = 1-4$ - максимальна глибина пошкоджень на стику: 1 – труба зі сталі 12Х1МФ – зварна зона; 2 – зварна зона - труба зі сталі 12Х1МФ; 3 – труба зі сталі Х18Н10Т – зварна зона; 4 – зварна зона - труба зі сталі Х18Н10Т; L - довжина зони корозійної активності зварного з'єднання різнорідних труб

Слід відзначити, що при визначенні L брали до уваги, що величина корозійних пошкоджень не повинна перевищувати $1 \mu\text{m}$. Наведені нижче розрахункові дані подані для довжини зварної зони, що рівна 10 мм (що найкраще відповідає експериментальним дослідженням). Приклад такого розрахунку для різних середовищ з терміном експлуатації в 200 тис.год зображений на рис.3.

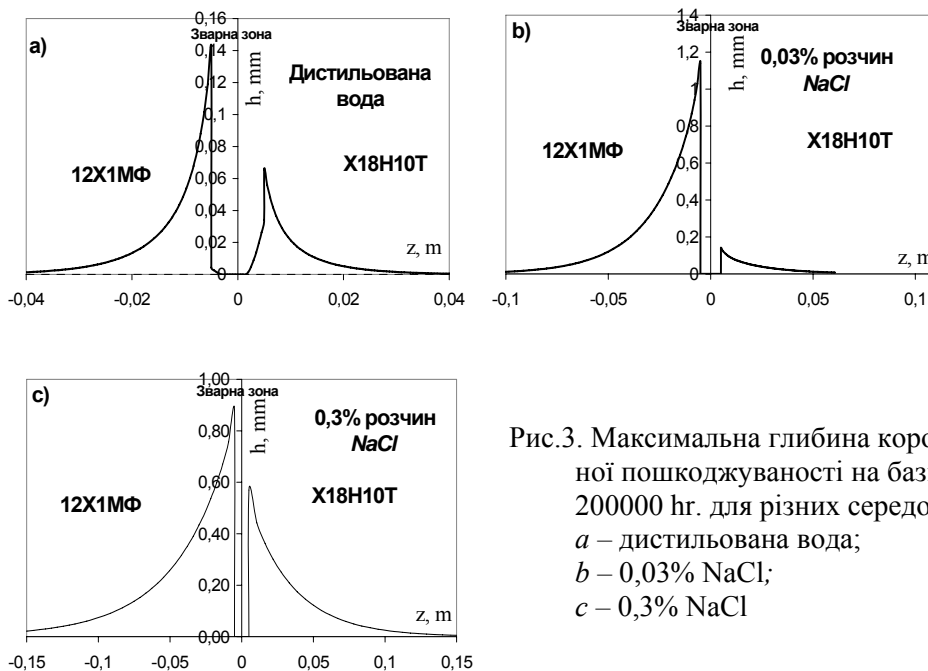


Рис.3. Максимальна глибина корозійної пошкоджуваності на базі 200000 год. для різних середовищ: а – дистильована вода; б – 0,03% NaCl; в – 0,3% NaCl

Як основний результат розрахунків, наведено залежності максимальної глибини пошкоджень на стиках в часі у зварному з'єднанні різнорідних труб та залежність довжини зони корозійної активності зварного з'єднання різнорідних труб, що подані у табл.1 і 2 та на рис.4 і 5.

Таблиця 1. Значення максимальної глибини корозійної пошкоджуваності компонентів зварного з'єднання різнорідних труб в середовищах різного складу в залежності від планованого терміну експлуатації

Елемент з'єднання	T , hours	h_{max} , mm		
		Дистильована вода	0,03 % NaCl	0,3 % NaCl
Сталь 12Х1МФ	100 000	0,12389	0,712	0,47553
	200 000	0,14122	1,14026	0,88226
	300 000	0,14122	1,28505	*
Сталь 12Х1МФ – зварна зона	100 000	0	0	0
	200 000	0,00426	0	0
	300 000	0,101	0	0
Зварна зона – Х18Н10Т	100 000	0,0341	0	0
	200 000	0,0341	0	0
	300 000	0,0341	0	0
Х18Н10Т	100 000	0	0,00289	0,00399
	200 000	0,0657	0,14065	0,56951
	300 000	0,31855	0,60358	*

* – значення h_{max} більше від товщини стінки труби

Таблиця 2. Значення максимальної глибини корозійної пошкоджуваності компонентів зварного з'єднання

T , hr	L , mm		
	Дистильована вода	0,03 % NaCl	0,3 % NaCl
50000	58,15	175,02	363,52
100000	60,16	196,72	496,69
150000	98,04	307,24	623,84
200000	112,31	334,87	639,35
250000	117,89	350,65	639,35
300000	121,61	364,47	639,35
350000	124,09	380,26	639,35
400000	125,95	388,15	639,35

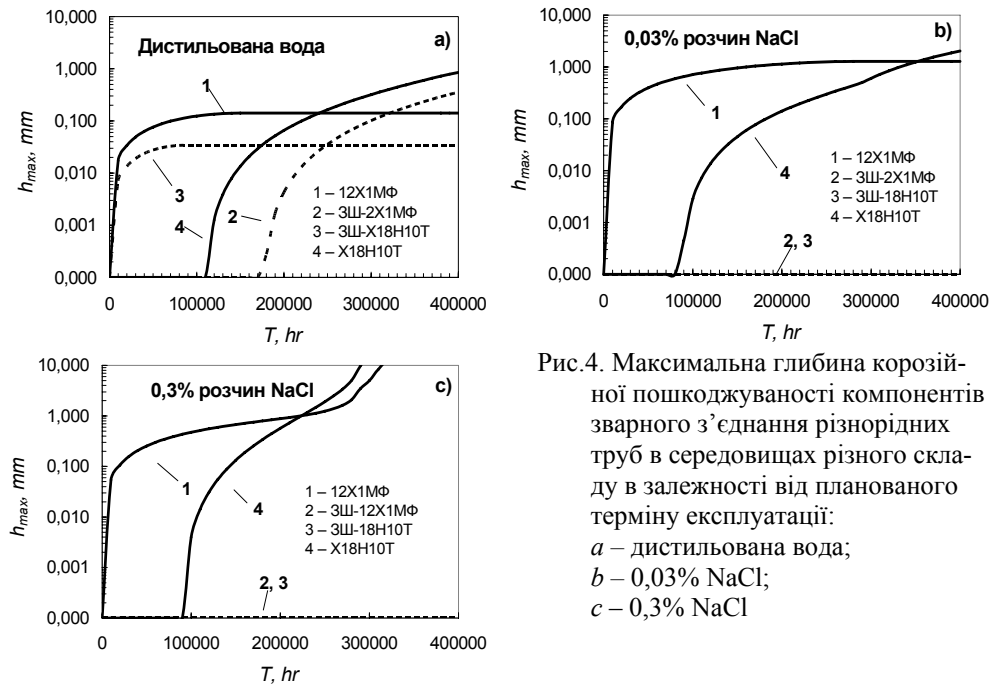


Рис.4. Максимальна глибина корозійної пошкоджуваності компонентів зварного з'єднання різнорідних труб в середовищах різного складу в залежності від планованого терміну експлуатації:
 а – дистильована вода;
 б – 0,03% NaCl;
 с – 0,3% NaCl

На рис.4 показано, коли і які компоненти зварного з'єднання руйнуються. Можна визначити такі моменти, коли частина труби, що виготовлена зі сталі 12X1MФ, переходить з анодної області в катодну. Також видно, що при довготривалій експлуатації частина труби, що виготовлена за сталі X18Н10Т, пошкоджується значно швидше. Це фактично неможливо спрогнозувати на основі короткотривалих експериментальних досліджень. Причому, це притаманно всім середовищам, які були використанні в розрахунках. Слід також зауважити, що для матеріалу зварної зони небезпечним є середовище без вмісту агресивних домішок, хоча при довготривалій експлуатації пошкодження є дещо меншими від 1 mm.

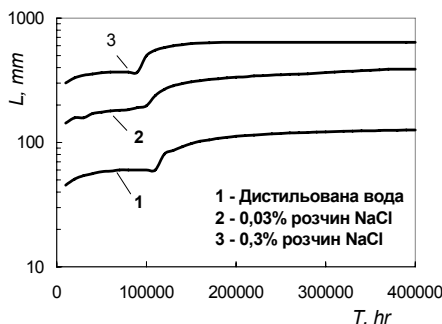


Рис.5. Довжина зони корозійної активності зварного з'єднання різнорідних труб у середовищах різного складу в залежності від планованого терміну експлуатації

Встановлено, що для всіх середовищ існує певний момент часу, коли відбувається стрибок у зростанні довжини зони корозійної активності зварного з'єднання труб. Якщо в більш агресивних середовищах початкове значення довжини цієї зони є відповідно більше, то цікаво зазначити, що згаданий стрибок відбувається майже в один і той самий момент часу, який рівний приблизно 100 тис. год.

Висновки

Запропоновано методику розрахунку та прогнозні оцінки максимальної глибина корозійної пошкоджуваності компонентів зварного з'єднання, а також довжини зони корозійної активності зварного з'єднання різнорідних труб залежно від планованого терміну експлуатації в середовищах різного складу. Наведені залежності дають можливість проаналізувати, коли і в яких елементах відбудеться руйнування стінок труби, а також визначити довжину зони корозійної активності в залежності від глибини дефекту. Дослідження показали, що труба зі сталі X18H10T руйнується за досягнення терміну експлуатації в 280 тис.год., а труба зі сталі 12X1MФ – 300 тис. год.

Глибина корозійної пошкоджуваності компонентів зварного з'єднання різнорідних труб у середовищах різного складу в залежності від планованого терміну експлуатації і довжина зони корозійної активності зварного з'єднання стануть базовими для побудови критерію руйнування стінки труби.

Література

1. Механіка руйнування і міцність матеріалів: Довідн. Посібник / Під заг. ред. В.В.Панасюка. Том 7: Надійність та довговічність елементів конструкцій теплоенергетичного устаткування / І.М.Дмитрах, А.Б.Вайнман, М.Г.Стащук, Л.Тот. Під ред. І.М. Дмитраха. – Київ: Академперіодика, 2005. – 378 с.
2. Дмитрах І.М. Вплив корозійних середовищ на локальне руйнування металів біля концентраторів напружень / І.М.Дмитрах, В.В.Панасюк. – Львів: Національна академія наук України. Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка. – 1999 р. – 341 с.
3. Иоссель Ю.Я. Математические методы расчета электрохимической коррозии и защиты металлов. Справ / Ю.Я.Иоссель, Г.Э.Кленов. – М.: Металлургия, 1984. – 272 с.
4. Новаковский В.М. К стандартной научной системе коррозионно-электрохимических понятий и терминов. I. Общие понятия / В.М.Новаковский // Защита металлов. – 1980. - № 3. – С. 250-264.
5. Білий О.Л. Чисельна оцінка густини корозійного струму на внутрішній поверхні трубчатих зварних з'єднань сталей 12X1MФ–X18H10T / О.Л.Білий, Р.Л.Лещак // Фізико-хімічна механіка матеріалів. – 2006. – Спец. вип. №5.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 10.11.2011 р.
Рекомендовано до друку д.т.н., професором Петриною Ю.Д.*

KINETICS ASSESSMENT OF LOCALISED CORROSION DAMAGES IN PIPE WELDS OF WATER-STEAM CIRCUIT ELEMENTS**I. M. Dmytrakh, B. I. Kolodiy, O. L. Bilyy, R. L. Leshchak***Karpenko Physico-Mechanical Institute, National Academy of Sciences of Ukraine; 79601, Lviv, Naukova st., 5*

Localised damaging of power unit components under long-term exploitation essentially impact on their reliability and safety. Nowadays, there are number problems among which the localised corrosion of water-steam circuit elements is the actual. Present work is devoted to problem of local corrosion of the welded joints of dissimilar pipes (low-alloyed pearlite steel 12X1MΦ and austenitic stainless steel X18H10T). Based on analytical determination of corrosion current density distribution on the external pipe's surface, the model and numerical procedure for kinetics assessment of localised corrosion damages was developed. As results the depth of corrosion damaging as function of time has been received for the welded zone area with take into account the environmental composition variables and materials degradation during term of exploitation. The length of corrosion activity zone at the weld has been also assessed. Evaluated model and received data can be served as basis for prediction of the given welded joint behaviour during long-term exploitation with the aim to prevent the catastrophic situations.

Key words: *power unit, water-steam circuit, low-alloyed pearlite steel, stainless austenitic steel, welded joints of dissimilar pipes, localised-corrosion damaging, corrosion current density,, numeric-analytical model, depth of corrosion damaging.*

УДК 622.69

КЛАСИФІКАЦІЯ ТИПІВ ВІДМОВ ГАЗОПЕРЕКАЧУВАЛЬНОГО ОБЛАДНАННЯ НА КОМПРЕСОРНИХ СТАНЦІЯХ “ДК УКРТРАНСГАЗ”

Р. М. Матвієнко

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-80-00; e-mail: romanager@rambler.ru*

Дано визначення типам зупинок газоперекачувальних агрегатів, проведено аналіз причин виникнення відмов обладнання компресорних станцій, побудовано графічні діаграми розподілу відмов, розраховано частку вимушених зупинок ГПА із загальної кількості всіх зупинок за звітні періоди

Ключові слова: газоперекачувальне обладнання, компресорна станція, газоперекачувальний агрегат, аварійна зупинка, вимушена зупинка.

До газоперекачувального обладнання (ГПО) будемо відносити газотурбінні двигуни, нагнітачі природного газу, обв'язку газоперекачувальних агрегатів, електрообладнання, паливну систему та систему мащення газоперекачувальних агрегатів (ГПА), крани та газову запірну арматуру, а також системи автоматичного управління ГПА.

В процесі експлуатації газоперекачувального обладнання на компресорних станціях (КС) можуть виникнути позаштатні аварійні ситуації, які локалізувати шляхом зупинки одного ГПА або іншого обладнання неможливо. Цим ситуаціям можна запобігти шляхом зупинки компресорної станції. Зупинка ГПА може бути нормальною, аварійною (зі стравленням та без стравлення газу) та вимушеною [1].

Нормальна зупинка (НЗ) агрегату проводиться в тому випадку, якщо немає необхідності в роботі нагнітача згідно технологічних міркувань або згідно плану даний агрегат виводиться в резерв або на планово-попереджувальний ремонт.

Аварійна зупинка (АЗ) виконується автоматично без втручання обслуговуючого персоналу при спрацюванні аварійних захистів або за командою оператора. АЗ виконується без попереднього охолодження двигуна. Автоматичне спрацювання АЗ відбувається при виході за діапазон допустимих значень певних параметрів нагнітача, двигуна чи агрегату загалом [1].

Аварійна зупинка ГПА, що виконується від спрацювання захистів, є автоматичною і передбаченою заводом-виробником як засіб забезпечення працездатності агрегату при виході експлуатаційних параметрів за гранично допустимі значення. До аварійних зупинок слід віднести будь-яку зупинку, якщо агрегат не може бути знову включений в роботу достатньо тривалий час.

Вимушена аварійна зупинка (ВЗ) здійснюється при натисканні кнопки аварійної зупинки або спрацюванні захистів агрегату, а також перекриттям подачі паливного газу або виключенням запалювачів.

Вимушеною зупинкою агрегату слід вважати таку зупинку, коли агрегат з незначної причини зупиняється (відключення автомату, помилкова робота захисту, помилкові дії персоналу, перегорання запобіжника і т.п.), але незадовго може бути знову включений в роботу після усунення дефекту.

Згідно даних, отриманими від управлінь магістральними газопроводами (УМГ) та об'єднаних диспетчерських управлінь (ОДУ), науково-виробничий центр технічної діагностики “Техдіагаз” щороку проводить аналіз причин аварійних та вимушених зупинок ГПА через відмови обладнання КС та помилки персоналу.

За даними УМГ через відмови різних видів за 9 місяців 2009 року зафіксовано 97 аварійних та вимушених зупинок ГПА [2], за 2010 рік – 182 аварійні та вимушені зупинки ГПА [3], а за 1-е півріччя 2011 року – 106 аварійних та вимушених зупинок ГПА [4].

Розподіл аварійних та вимушених зупинок ГПА внаслідок відмов в роботі обладнання КС (обладнання КВПіА, механічне, електрообладнання) та помилок персоналу за відповідні звітні періоди наведено на рис.1, 2 і 3:

- обладнання КВПіА – 27 відмов за 9 місяців 2009 року (77 відмов за 2010 рік, 36 відмов за 1-е півріччя 2011 року), що складає 28% (42%, 34%) від загальної кількості відмов відповідно;

- механічне обладнання – 48 (60, 39) відмов, що складає 49% (33%, 36%) від загальної кількості відмов відповідно;

- електрообладнання – 9 (38, 25) відмов, що складає 9% (21%, 24%) від загальної кількості відмов відповідно;

- тип обладнання, яке відмовило, не встановлено – 8 (4, 6) відмов, що складає 8% (2%, 6%) від загальної кількості відмов відповідно;

- помилки персоналу – 5 (3, 0) відмов, що складає 5% (2%, 0%) від загальної кількості відмов відповідно.

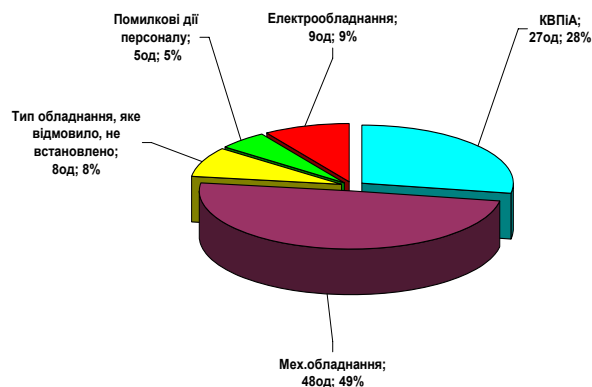


Рис.1. Розподіл відмов за типами обладнання за 9 місяців 2009 року (всього 97 відмов)

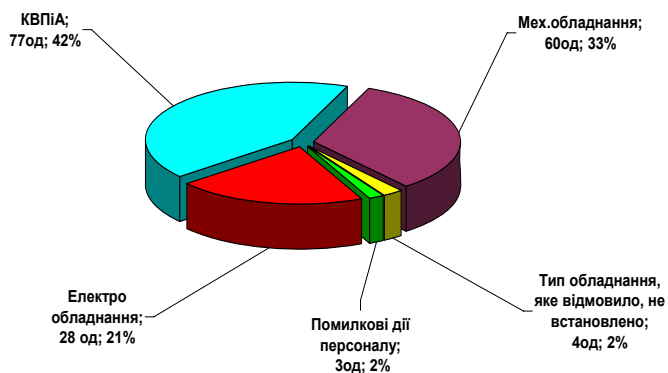


Рис.2. Розподіл відмов за типами обладнання за 2010 рік (всього 182 відмов)

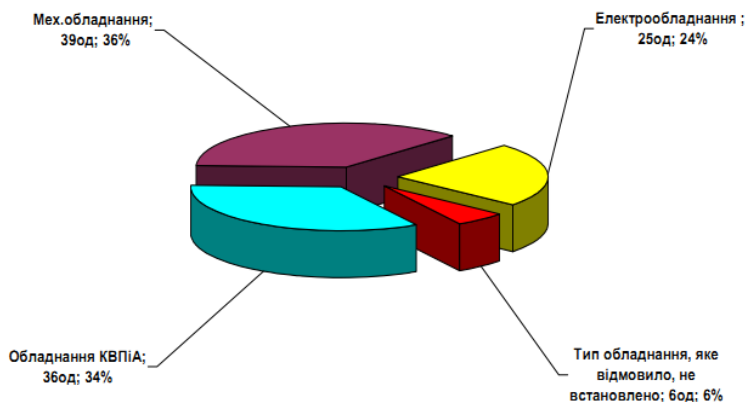


Рис.3. Розподіл відмов за типами обладнання за 1-е півріччя 2011 року (всього 106 відмов)

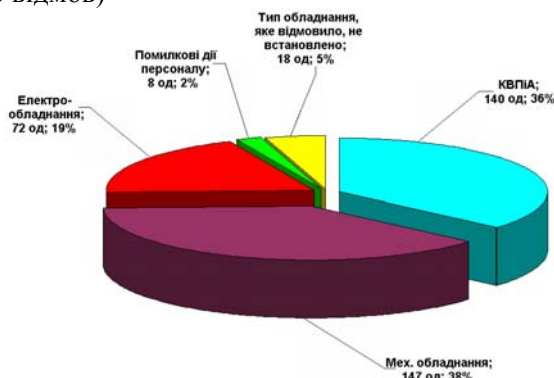


Рис.4. Сумарний розподіл відмов за типами обладнання 2009-11 роки (всього 385 відмов)

Провівши сумарний аналіз аварійних та вимушених зупинок ГПА за 9 місяців 2009 року, за 2010 рік і за 1-е півріччя 2011 року (всього 385 відмов) внаслідок відмов в роботі обладнання КС, встановлено розподіл відмов за три вказані періоди (рис.4):

- обладнання КВПіА – 140 відмов, що складає 36% від загальної кількості відмов;
- механічне обладнання – 147 відмов, що складає 38% від загальної кількості відмов;
- електрообладнання – 72 відмови, що складає 19% від загальної кількості відмов;
- помилки персоналу – 8 відмов, що складає 2% від загальної кількості відмов;
- тип обладнання, яке відмовило, не встановлено – 18 відмов, що складає 5% від загальної кількості відмов [2-4].

Важливим показником оперативності роботи персоналу є частка вимушених зупинок серед загальної кількості всіх зупинок. Збільшення значення даного співвідношення буде свідчити про оперативність та швидке реагування змінних інженерів на нештатні та аварійні ситуації, що, в свою чергу, сприяє швидкому приведенню агрегату, що вийшов із ладу, до нормального стану та зменшенню часу простою агрегату.

Серед 97 зупинок ГПА [2], що сталися на компресорних станціях ДК “Укртрансгаз” за 9 місяців 2009 року, аварійних зупинок було 63, вимушених – 34. В 2010 році було 182 зупинки ГПА [3], серед них 132 аварійні та 50 вимушених зупинок. За 1-е півріччя 2011 року було всього 106 зупинок ГПА [4], з них 74 аварійні та 32 вимушені.

Знайдемо відношення кількості вимушених зупинок до загальної кількості зупинок за кожен звітний період окремо.

Отже,

$$\begin{aligned}v_{2009} &= 34/97 = 0,35 \text{ (35,0 \%)}, \\v_{2010} &= 50/182 = 0,275 \text{ (27,5 \%)}, \\v_{2011} &= 32/106 = 0,302 \text{ (30,2 \%)}.\end{aligned}$$

Наявність таких цифр свідчить, змінним інженерам та персоналу по роботі з газоперекачувальним обладнанням в більшості випадків не вдається відразу виправити поломку агрегату, що призводить до більш тривалих простоїв газоперекачувальних агрегатів. Про це свідчить невелика кількість вимушених порівняно з кількістю аварійних зупинок ГПА.

Така статистика може свідчити про моральне та технічне зношення газоперекачувального обладнання, а також про складність відразу ідентифікувати першопричину поломки чи виходу із ладу обладнання.

Взагалі наявність великої кількості відмов, що виникають в різних режимах роботи ГПА, покладає велику відповідальність на змінних операторів газоперекачувальних агрегатів. Від їхніх навичок та розуміння ситуації, що виникає при роботі ГПА, залежить своєчасність та правильність прийнятих рішень. Крім того, для газоперекачувального агрегату характерним є складний зв'язок між контрольованими параметрами і показниками технічного стану. Зміна технічного стану якого-небудь елемента газоперекачувального агрегату може мати вплив одночасно на декілька контрольованих показників і, навпаки, контрольований параметр може змінюватись під впливом зміни технічного стану

декількох елементів ГПА. Таким чином, враховуючи вищесказане, виникає потреба у відборі персоналу за фізичними, психофізіологічними якостями, а також перевірка їхніх знань, вмінь та навичок за допомогою спеціальних комп'ютерних та комп'ютеризованих засобів (тренажерів).

Література

1. Алгоритм системи автоматичного керування ГПА-Ц1-16С з газотурбінним двигуном ДГ-90Л2 КС “Долина”. – Львів, 2003. – 62с.
2. Дочірня компанія філія науково-виробничий центр технічної діагностики “Техдіагаз”. Звіт зі статистичного аналізу аварійних та вимушених зупинок ГПА через відмови обладнання на КС ДК “Укртрансгаз” за 9 місяців 2009 року [Електронний ресурс].
3. Дочірня компанія філія науково-виробничий центр технічної діагностики “Техдіагаз”. Звіт зі статистичного аналізу аварійних та вимушених зупинок ГПА через відмови обладнання на КС ДК “Укртрансгаз” за 2010 рік [Електронний ресурс].
4. Дочірня компанія філія науково-виробничий центр технічної діагностики “Техдіагаз”. Звіт зі статистичного аналізу аварійних та вимушених зупинок ГПА через відмови обладнання на КС ДК “Укртрансгаз” за 1-е півріччя 2011 року [Електронний ресурс].

Стаття надійшла до редакційної колегії 11.12.2011 р.

Рекомендовано до друку д.т.н., професором Заміховським Л.М.

CLASSIFICATION OF GAZ-PUMPING EQUIPMENT'S REFUSES TYPES ON THE COMPRESSOR STATIONS DK UKRTRANSGAZ

R. M. Matviyenko

Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;

76019, Ivano-Frankivs'k, Carpatska st., 15;

ph. +380 (3422) 4-80-00; e-mail: romanager@rambler.ru

Determination is given to the types of stops of rocking gas aggregates over, the analysis of reasons of origin of refusals of equipment of the compressor stations is conducted, the graphic diagrams of distributing of refusals are built, the particle of the forced stops GPA is expected among the common amount of all stops for current period

Key words: *rocking gas equipment over, compressor station, rocking gas aggregate over, abrupt end, forced stop.*

ЧИСЕЛЬНА ОЦІНКА ГУСТИНИ КОРОЗІЙНОГО СТРУМУ НА ВНУТРІШНІЙ ПОВЕРХНІ ТРУБЧАСТИХ ЗВАРНИХ З'ЄДНАНЬ СТАЛЕЙ 12Х1МФ–Х18Н10Т

О. Л. Білий, Р. Л. Лещак

*Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України;
79601, м. Львів, вул. Наукова, 5*

Локальні корозійно-механічні та корозійні пошкодження труб теплоенергетичного призначення досить суттєво впливають на їх термін експлуатації та залишковий ресурс роботи в експлуатаційних умовах. У зв'язку з цим важливого значення набуває можливість передбачення терміну руйнування таких об'єктів. Для можливості такого прогнозування необхідно оцінити корозійні пошкодження досліджуваних об'єктів, спричинені корозійними струмами на внутрішній поверхні трубчастих зварних з'єднань. Об'єктом досліджень є комбіноване зварне з'єднання труб зі сталей 12Х1МФ та Х18Н10Т з різним терміном експлуатації. Запропоновано чисельно-аналітичну модель, за допомогою якої можна спрогнозувати аномальну поведінку досліджуваного об'єкту за його тривалої експлуатації, чого важко досягти шляхом прямих експериментальних досліджень.

Ключові слова: *комбіновані зварні труби, мало легована сталь перлітного класу, неіржавіюча сталь аустенітного класу, зварне з'єднання, густина корозійного струму, механіко-хімічні та корозійні пошкодження, чисельно-аналітична модель.*

Вступ

Як відомо, локальні корозійно-механічні та корозійні пошкодження труб теплоенергетичного призначення досить суттєво впливають на їх термін експлуатації та залишковий ресурс роботи в експлуатаційних умовах. На даний момент до 70% поломок і, як наслідок, простоїв теплоенергетичного обладнання відбувається за рахунок зародження та розвитку до руйнування непередбачуваних локальних корозійно-механічних та корозійних дефектів. Особливо гостро стоїть проблема комбінованих кільцевих зварних з'єднань труб на виході із пароперегрівачів. У зв'язку з цим важливого значення набуває можливість передбачення терміну руйнування таких об'єктів. Для можливості такого прогнозування необхідно оцінити корозійні пошкодження досліджуваних об'єктів, спричинені корозійними струмами на внутрішній поверхні трубчастих зварних з'єднань.

Об'єкт та методика досліджень

Об'єктом досліджень є комбіноване зварне з'єднання труб зі сталей 12Х1МФ (малолегована сталь перлітного класу) та Х18Н10Т (неіржавіюча сталь аустенітного класу) (рис.1) з різним терміном експлуатації (табл.1). Зварювання здійснювалось подвійним кільцевим зварним

швом у відповідності з ТУ [1]. Як зварювальний матеріал використовувався перехідний електрод ЦТ-10. Хімічний склад базових та зварювального матеріалів подається в [1]. Експлуатаційним середовищем для даного типу об'єктів є пароводяна суміш високих параметрів.

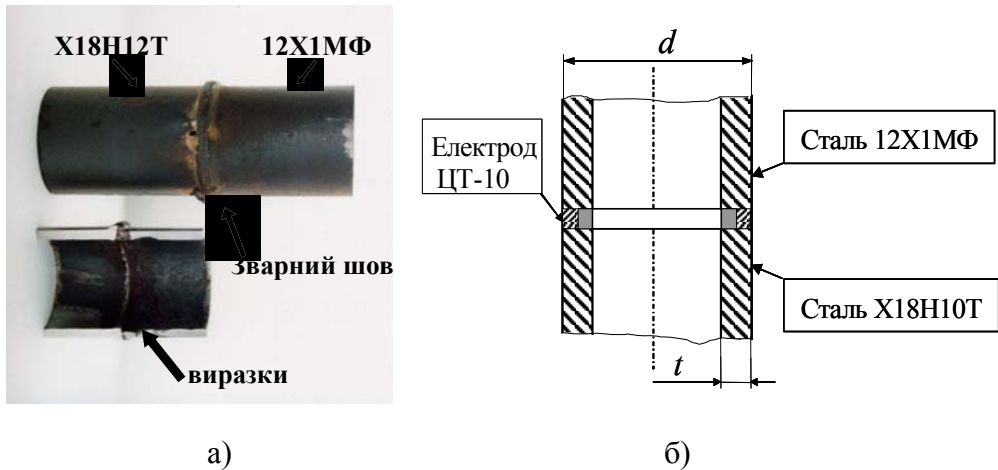


Рис.1. Об'єкт досліджень (а) та його схематичне подання (б)

Таблиця 1. Характеристики об'єкта досліджень

ТЕС	Сталь	Типорозмір, мм.	Термін експлуатації, тис. год.	Температура експлуатаційного середовища, °С	Тиск в трубі, атм.
Бурштинська	12X1MФ	38×4	Поставка	540	140
Бурштинська	X18H10T	38×4	Поставка	540	140
Вуглегірська	12X1MФ	42×4	185	540	38
Вуглегірська	X18H10T	42×4	185	540	38

Розглядуваний об'єкт, з точки зору електрохімічної корозії, є триелектродною системою, яка разом із системою безрозмірних циліндричних координат r, Z , віднесених до r_0 (внутрішнього радіуса труби $r_0 = d/2 - t$), представлена на рис.2. Ця система характеризується потенціалами корозії φ_n , питомими поляризаційними опорами b_n , питомою електропровідністю середовища σ , безрозмірною (віднесеною до r_0) півшириною зварної зони l і радіусом r_0 . Тут і надалі індекси $n = 1, 2, 3$ відносяться до величин в областях: $-\infty < Z < -l$, $-l < Z < l$, $l < Z < \infty$.

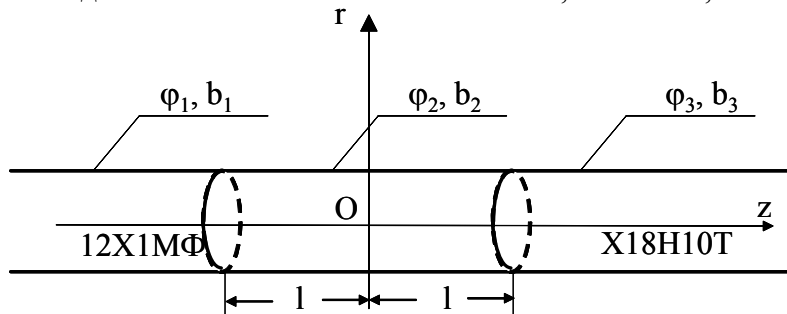


Рис.2. Схема досліджуваного об'єкта та система циліндричних координат

Метою дослідження є аналітичне і кількісне визначення густини струмів електрохімічної корозії. Це виражається через електричні потенціали середовища $\psi_n(r, Z)$. Вони задовольняють рівнянню Лапласа [2]:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) \psi_n(r, Z) = 0, \quad n = 1, 2, 3. \quad (1)$$

При визначенні густини струму $j_n(1, Z)$ із поверхні $r=1$, $-\infty < Z < \infty$ додатнім вважається струм із металу в середовище. Густину цього струму можна визначити із потенціалу $\psi_n(r, Z)$ двома способами.

1. Якщо враховувати, що електропровідність металів в 10^6 - 10^7 раз більша за електропровідність середовища, то можна прийняти електричний потенціал поверхні металу

$$\psi_m \approx \text{const} = 0. \quad (2)$$

$$\text{Тоді [3]} \quad j_n(1, Z) = \frac{-[\psi_n(1, Z) + \varphi_n]}{b_n}, \quad n = 1, 2, 3. \quad (3)$$

Далі буде показано, що $j_1(1, Z)$ і $j_3(1, Z)$ згасають вздовж Z по приблизно експоненціальному закону. Тому область ефективної дії корозійних струмів обмежена і можна вважати в цій області умову (2) і співвідношення (3) прийнятними.

2. Із закону Ома в диференціальній формі при використанні безрозмірного r буде

$$j_n(1, Z) = \frac{\sigma}{r_0} \left. \frac{\partial \psi_n(r, Z)}{\partial r} \right|_{r=1}. \quad (4)$$

Із прирівнювання правих сторін рівностей (3) і (4) впливає умова на поверхні $r=l$:

$$\left[\psi_n(r, Z) + K_n \frac{\partial \psi_n(r, Z)}{\partial r} \right]_{r=1} = -\varphi_n, \quad n = 1, 2, 3, \quad \text{де } K_n = \frac{\sigma b_n}{r_0}. \quad (5)$$

Потенціали $\psi_n(r, Z)$ задовольняють умовам (5), неперервності $\psi_n(r, Z)$ і $\frac{\partial \psi_n(r, Z)}{\partial Z}$ на перерізах $0 \leq r < 1, z = \pm l$ та умовам на нескінченності

$$\psi_1(r, Z = -\infty) = -\varphi_1, \quad \psi_3(r, Z = \infty) = -\varphi_3. \quad (6)$$

При визначенні $\psi_n(r, Z)$ використаємо метод вирівнювання поляризації [2], в якому за умови (5) для різних K_n замінюються єдиною умовою при сталому K . В ролі таких K вибрано K_2 . Тоді умова (5) стане:

$$\left[\psi(r, z) + K_2 \frac{\partial \psi(r, z)}{\partial r} \right]_{r=1} = \begin{cases} -(\varphi_1 + \tilde{\varphi}_1), & -\infty < z < -l, \\ -\varphi_2, & -l < z < l, \\ -(\varphi_3 + \tilde{\varphi}_3), & l < z < +\infty. \end{cases} \quad (7)$$

Тут $\tilde{\varphi}_1$ і $\tilde{\varphi}_3$ - поправки до потенціалів корозії φ_1 і φ_3 :

$$\tilde{\varphi}_1 = \frac{K_1 - K_2}{l_1} \int_{-\infty}^{-l} \left. \frac{\partial \psi_1(r, Z)}{\partial r} \right|_{r=1} dZ, \quad \tilde{\varphi}_3 = \frac{K_3 - K_2}{l_3} \int_l^{\infty} \left. \frac{\partial \psi_3(r, Z)}{\partial r} \right|_{r=1} dZ. \quad (8)$$

$\left. \frac{\partial \psi_n(r, Z)}{\partial r} \right|_{r=1}$ - усереднена величина на поверхнях ефективної корозії,

$n = 1, 3$. В ролі таких прийняті прилегли до шва частини поверхні труб, на яких зосереджено не менше 90 % корозійного струму з кожної із напівбезмежних труб.

Розв'язок рівняння Лапласа для $\psi(r, Z)$ при умовах (6), (7) та неперервність $\psi(r, Z)$ і $\frac{\partial \psi(r, Z)}{\partial Z}$ при $z = \pm l$ дано методом розподілу змінних. Підставивши $\psi(r, Z)$ в співвідношення (3) або (4), одержимо вирази густин струмів:

$$j_1(l, Z) = \frac{\sigma}{r_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[(\varphi_2 - \varphi_1 - \tilde{\varphi}_1) \exp(\lambda_m l) + (\varphi_3 + \tilde{\varphi}_3 - \varphi_2) \exp(-\lambda_m l)] \exp(\lambda_m Z)}{K_2^2 \lambda_m^2 + 1}; \quad (9)$$

$$j_2(l, Z) = \frac{\sigma}{r_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[(\varphi_3 - \tilde{\varphi}_3 - \varphi_2) \exp(\lambda_m Z) + (\varphi_1 + \tilde{\varphi}_1 - \varphi_2) \exp(-\lambda_m Z)] \exp(-\lambda_m l)}{K_2^2 \lambda_m^2 + 1}; \quad (10)$$

$$j_3(l, Z) = \frac{\sigma}{r_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{[(\varphi_2 - \varphi_1 - \tilde{\varphi}_3) \exp(\lambda_m l) + (\varphi_1 + \tilde{\varphi}_1 - \varphi_2) \exp(-\lambda_m l)] \exp(-\lambda_m Z)}{K_2^2 \lambda_m^2 + 1}. \quad (11)$$

Тут λ_m - корені рівняння $J_0(\lambda) - K_2 \lambda J_1(\lambda) = 0$, де $J_p(\lambda)$ - функції Бесселя p -ого порядку.

Для реалізації цієї чисельно-аналітичної моделі було проведено ряд експериментів. Досліджуваною поверхнею була внутрішня поверхня труби, що контактує з експлуатаційним середовищем. Інші поверхні закривалися ізолюючим матеріалом для забезпечення чистоти експерименту. Робочі середовища, що використовувались для випробувань, та їх параметри представлені у табл.2. З одержаних поляризаційних кривих [1] було визначено базові електрохімічні показники, з яких для розрахунку були використані (табл.3) потенціали корозії, з перетину Тафельських прямих, питомі катодні та анодні поляризаційні опори.

Таблиця 2. Параметри робочого середовища

Концентрація C_{NaCl} , % мас	Провідність κ , Sm/m	pH	Температура, °C
0 (дистильована вода)	$0,93 \times 10^{-3}$	5,9	15
0,03	$59,2 \times 10^{-3}$	6,5	15
0,3	0,557	6,8	15

На основі експериментальних досліджень були встановлені такі закономірності:

- із збільшенням концентрації агресивних домішок в середовищі, підвищуються корозійні струми і зменшуються пасивні ділянки як для матеріалу в стані поставки, так і для експлуатованого матеріалу;
- для експлуатованого матеріалу концентрація агресивних домішок в середовищі неоднозначно впливає на вище вказані матеріали;
- термін експлуатації залежно від вмісту агресивних домішок в середовищі також неоднозначно впливає на корозійну поведінку компонентів даного зварного з'єднання, що засвідчують результати.

Таблиця 3. Основні електрохімічні показники матеріалів зварного з'єднання [1]

Початковий вміст іонів	Потенціали корозії	Питомі поляризаційні опори		Початковий вміст іонів	Потенціали корозії	Питомі поляризаційні опори	
		b_k , Ом·м ²	b_a , Ом·м ²			b_k , Ом·м ²	b_a , Ом·м ²
C_{NaCl} , %	φ_k , V			C_{NaCl} , %	φ_k , V		
Сталь 12Х1МФ (поставка)				Сталь 12Х1МФ (відпрацьований матеріал)			
0	-0,375	3,937	4,132	0	-0,193	3,205	4,878
0,03	-0,427	0,460	0,340	0,03	-0,390	0,716	0,921
0,3	-0,433	0,339	0,297	0,3	-0,402	1,340	0,695
Зварна зона (поставка)				Зварна зона (відпрацьований матеріал)			
0	-0,169	4,717	4,831	0	-0,217	3,571	4,975
0,03	-0,235	0,800	0,563	0,03	-0,255	0,821	0,526
0,3	-0,360	0,484	0,133	0,3	-0,314	0,181	0,160
Сталь Х18Н10Т (поставка)				Сталь Х18Н10Т (відпрацьований матеріал)			
0	-0,021	8,772	11,278	0	-0,333	4,292	5,714
0,03	-0,312	3,279	4,566	0,03	-0,376	2,110	1,763
0,3	-0,369	1,976	2,232	0,3	-0,423	1,125	0,856

Результати та їх обговорення

На основі експериментальних даних, описаних у [1], та математичних розрахунків за формулами (6)–(8) була одержана база даних густини струмів з поверхні досліджуваних матеріалів за різних довжин зварної зони, вмісту $NaCl$ та у випадку поставки та відпрацьованого матеріалу.

Визначалася залежність густини струмів від осьової координати для нових і відпрацьованих матеріалів при товщині зварної зони 2 мм, 5 мм і 10 мм в дистильованій воді та розчинах $NaCl$ з концентраціями 0,03 та 0,3% по масі.

Результати обчислень для нових матеріалів у дистильованій воді та розчинах з різною концентрацією $NaCl$ при трьох ширинах зварної зони представлені на рис.3,а, с, е. Встановлено, що для майже всіх роз-

глянутих варіантів труба зі сталі 12Х1МФ є анодом, а труба зі сталі Х18Н10Т та зварна зона - катодами. Винятком є зварна зона товщиною 5 мм і 10 мм в дистильованій воді. У цих двох випадках зварна зона є частково катодом і меншою мірою, анодом. Тут утворюються пари катод-анод між кожним їх базових матеріалів та матеріалом зварної зони. Двополярність зварної зони пояснюється низькою електропровідністю середовища і, як наслідок, обмеженістю впливу базових матеріалів на матеріал зварної зони. Залежність густини струму для труб із обох сталей є приблизно експоненціальноспадною. Максимальне значення цієї густини є на стиках зі зварною зоною. Для віддалей від зварної зони, більших певної величини, густина струму зростає з ростом концентрації $NaCl$. Біля зварної зони густина струму зростає з ростом електрорушійної сили пари труба – зварна зона. Для розглянутого діапазону ширин зварної зони кількісна залежність густини струму від ширини цієї зони незначна.

У випадку відпрацьованих матеріалів (рис.3,b, d, f) зварна зона є катодом при всіх її ширинах. Встановлено, що труби з обох сталей при розглянутих ширинах зварної зони в дистильованій воді та розчинах $NaCl$ з $C=0,03\%$ і $C=0,3\%$ є анодами. Для всіх розглянутих ширин зварної зони та середовищах ця зона є катодом. Густина струму на ній значно більша, ніж для нових матеріалів. Залежність $j(l, z)$ для обох труб є, як і для нових матеріалів, експоненціальноспадною. Густина струму з ростом концентрації $NaCl$ по всій довжині труб, а не починаючи з певної віддалі від зварної зони, як це є для труб із нових матеріалів.

Висновки

На основі запропонованої чисельно-аналітичної моделі встановлено:

- із збільшенням концентрації агресивних домішок в середовищі зростають струми корозії;
- спостерігається спад корозійних струмів від зони зварного шва в глибину базових матеріалів за експоненціальним законом;
- із збільшенням ширини шва спостерігається збільшення його впливу на прилеглі ділянки зварюваних матеріалів, також, із збільшенням ширини зварної зони, більш яскраво проявляється нелінійна залежність розподілу в ній корозійних струмів;
- якщо порівнювати матеріали в стані поставки, та ті, що відпрацювали певний термін, то спостерігається яскраве вираження зони зварного шва в ролі катода, а сталь Х18Н10Т стає анодом.

За допомогою запропонованої чисельно-аналітичної моделі можна спрогнозувати можливу аномальну поведінку досліджуваних об'єктів при їх тривалому терміні експлуатації, що досить важко досягти шляхом прямих експериментальних досліджень.

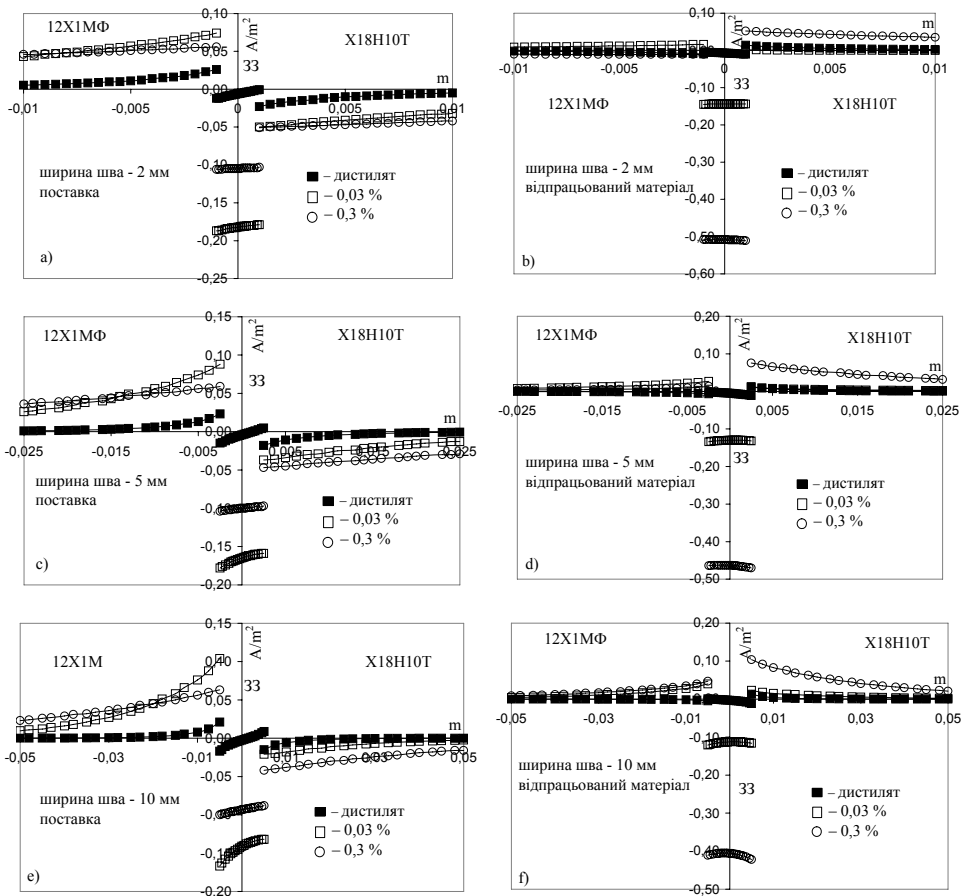


Рис.3. Залежності густини струмів $j(1, Z)$ для нових (а, с, е) та відпрацьованих матеріалів (b, d, f) в розчинах NaCl та дистильованій воді при ширинах зварної зони: а, b – 2 mm; c, d – 5 mm; e, f – 10 mm

Література

1. Лещак Р.Л. Вплив терміну експлуатації на корозійні властивості комбінованих зварних з'єднань труб теплоенергетичного призначення / Р.Л.Лещак, О.Л.Білий // Матеріали ХІХ відкритої науково-технічної конференції молодих науковців і спеціалістів Фізико-механічного інституту ім. Г.В. Карпенка Національної академії наук України (КМН-2005). – Львів: Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка Національної академії наук України. – 2005. – С. 35-40.
2. Иоссель Ю.Я. Математические методы расчета электрохимической коррозии и защиты металлов. Справ / Ю.Я.Иоссель, Г.Э.Кленов. – М.: Металлургия, 1984. – 272 с.
3. Колодій Б.І. Метод еквівалентного електрода для визначення електрохімічних струмів у корозійній виразці / Б.І.Колодій, І.М.Дмитрах, О.Л.Білий // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2002. – № 5. – С. 27-31.

Стаття надійшла до редакційної колегії 10.11.2011 р.
Рекомендовано до друку д.т.н., професором **Петриною Ю.Д.**

NUMERICAL EVALUATION OF CORROSION CURRENT DENSITY ON INTERNAL SURFACE OF PIPE WELDS OF 12X1MΦ AND X18H10T STEELS**O. L. Bilyy, R. L. Leshchak***Karpenko Physico-Mechanical Institute, National Academy of Sciences of Ukraine; 79601, Lviv, Naukova st., 5*

Local mechanochemical and corrosive damages of heat-and-power engineering pipes essentially influence on its exploitation time and remaining life in exploitation conditions. The most important is to have possibility to predict the time of destruction of such objects. To realise that possibility it is necessary to estimate analytically the parameters change of investigated materials. In this work it is proposed the analytical correlations to determine corrosion current density from inside surface of welded dissimilar pipes. They were obtained with help of polarities equilibrium method. These correlations were used for construction of relations of basis parameter: corrosion current density on internal surface of pipe welded joints of 12X1MΦ–X18H10T steels. This model were realized on the base of experimental research which were conducted on the specimens made of real objects. It is necessary to note that for the investigation it was taken objects with different time of exploitation: material in delivery conditions and with exploitation time about 200000 hovers. In this work the distribution of corrosion current density in each of components of pipe welded joint 12X1MΦ–X18H10T was analysed, namely, pipe made of 12X1MΦ (low-alloyed pearlitic steel) steel, welded zone between the pipes (it was taken different widths of welded zone within mathematical research), pipe made of X18H10T steel (stainless austenitic steel). It was made the comparative analysis of characteristics of material as in delivery conditions so as exploited. It was formed the conclusions based on experimental research and also numeric-analytical model. With help of proposed numeric-analytical model we can have unobvious dependences of investigation objects behaviour on composition of environment, investigated materials in the system, and exploitation time of the object, as it is hard to get within straight analysis of experimental data. Obtained results can be used in future to investigate the kinetics of local corrosive damages growth in such objects.

Key words: *welded dissimilar pipes, low-alloyed pearlitic steel, stainless austenitic steel, welded joints, corrosion current density, mechanochemical and corrosive damages, numeric-analytical model.*

Інформаційні технології

УДК 622.692.4

ПРОГНОЗУВАННЯ ОБ'ЄМІВ ВТРАТ НАФТИ У ВИПАДКУ ВИНИКНЕННЯ АВАРІЙНОЇ СИТУАЦІЇ

М. П. Возняк, Г. М. Кривенко, Л. В. Возняк

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-00-98; e-mail: gidro@nung.edu.ua*

Магістральні нафтопроводи є об'єктами підвищеної небезпеки. Система магістральних нафтопроводів вступила в період відмов, що призводять до аварій. Здійснено прогнозування об'ємів можливих витікань нафти через дефектні отвори в тілі труби. Запропоновано комп'ютерне моделювання процесу витікання нафти для визначення напрямку течії і площі забрудненої території в залежності від об'єму нафти, що витекла, та рельєфу місцевості.

Ключові слова: *нафтопровід, витрата, аварійна ситуація.*

Магістральні нафтопроводи України – це транспортні системи, які обслуговуються десятки років.

Прогнозування можливості виникнення аварійних ситуацій на об'єктах магістральних трубопроводів є актуальним, оскільки значна частина трубопроводів експлуатується понад двадцять років. Сучасні методи внутрішньотрубної діагностики нафтопроводів за допомогою інтелектуальних поршнів дозволяють з високою точністю визначити місцезнаходження дефектів у тілі труби та їх розміри, які необхідно знати при прогнозуванні можливих витікань нафти при розриві труби в дефектних місцях та моделюванні розтікання нафти. При цьому трубопровід повинен розглядатися як одне ціле з місцевістю в околицях трубопроводу. Техногенна взаємодія нафтопроводів з довкіллям призводить до деградації природного середовища навіть за умов безаварійної експлуатації трубопроводів. Техногенні аварії є одними з найбільш екологічно небезпечних. І тому дуже важливим є їх попередження [1].

Значний термін експлуатації призводить до старіння матеріалу труб, появи корозійних явищ, що є причиною утворення дефектів різних форм і розмірів в тілі труби, які спричиняють виникнення аварійних ситуацій. Першочерговість та значення досліджень в області забезпечення

безпеки при експлуатації трубопровідного транспорту підкреслюється в Законі України “Про об’єкти підвищеної небезпеки” [2].

Прогноз ризику аварій – це процес виявлення небезпек і оцінка ризику аварій на об’єктах підвищеної небезпеки для людей, їх майна та довкілля.

Метою даної роботи є зменшення впливу магістральних нафтопроводів на довкілля шляхом прогнозування об’ємів можливих витікань нафти у разі виникнення аварійних ситуацій..

Вихідними даними для реалізації поставленої мети є: дефекти в тілі труби, виявлені при проходженні інтелектуального поршня.

Фактори, які впливають на екологічний ризик:

- прогнозована витрата рідини через наявні дефекти в тілі труби;
- площа забрудненої території.

Фактор, який впливає на технічний ризик:

- тиск в місці дефекту.

Втрати нафтопродуктів за їх фізичним станом можна розділити на втрати в газоподібному та рідкому стані, а за причинами утворення – на експлуатаційні та аварійні.

Виникнення експлуатаційних втрат пов’язане з технічною недосконалістю транспортування. Аварійні втрати виникають внаслідок порушення правил технічної експлуатації, стихійного лиха, несанкціонованих врізань. Особливо велика кількість аварій виникає якраз через несанкціоновані врізання. При цьому площа нафтової плями S , яка утворюється при постійному витіканні, визначається в залежності від кількості розлитої нафти [3]. Точно розрахована величина витікань дасть можливість з більшою вірогідністю одержати інформацію про площу забруднення довкілля нафтопродуктами.

Для прогнозування очікуваних витоків з трубопроводу використаємо відому залежність з гідромеханіки

$$Q = \mu \cdot S \sqrt{2gH}, \quad (1)$$

де Q – витрата; μ – коефіцієнт витрати; S – площа отвору; g – прискорення вільного падіння; H – напір в точці пошкодження трубопроводу.

У літературних джерелах приведені залежності для визначення коефіцієнта витрати для отворів різної форми. При цьому застосування деяких із них для отворів неправильної форми вимагає визначення параметрів, які важко отримати за умов аварійної ситуації, тому виникає необхідність удосконалення цих залежностей. Виникає питання, як впливають найбільші поперечні та поздовжні розміри отворів на значення коефіцієнта витрати?

Вплив в’язкості на коефіцієнт витрати, як правило, досліджується при ламінарному режимі течії. При турбулентному режимі в’язкість рідини на значення коефіцієнта витрати практично не впливає. Режим руху нафти в магістральних нафтопроводах, як правило, турбулентний в зоні гідравлічно гладких труб.

Із збільшенням числа Рейнольдса, тобто із зменшенням впливу сил в'язкості, коефіцієнт швидкості φ зростає внаслідок зменшення коефіцієнта опору ζ , а коефіцієнт стискування ε зменшується, що призводить до гальмування рідини біля кромки отвору.

Коефіцієнт витрати μ , який визначається добутком φ на ε , із збільшенням числа Рейнольдса спочатку збільшується, що обумовлено стрімким зростанням φ , а потім, досягнувши максимального значення ($\mu_{max} = 0,69$ при $Re = 350$ (для круглих отворів)), зменшується внаслідок значного падіння ε і при більших значеннях числа Рейнольдса практично стабілізується. Для круглих отворів приймають наступні осереднені їх значення: $\mu = 0,62$, $\varphi = 0,97$, $\zeta = 0,065$, $\varepsilon = 0,64$ [4].

На основі статистичної обробки результатів експериментів [5] одержана така залежність для визначення коефіцієнта витрати при витіканні крізь некруглий отвір форми 1, яка використовується в таких межах

$$1 \leq \frac{l}{b} \leq 10 :$$

$$\mu = 0,62 + 0,0618 \lg \frac{l}{b}, \quad (2)$$

де l – найбільший поздовжній розмір отвору; b – найбільший поперечний розмір отвору.

Оскільки кількість витоку рідини залежить від тиску в точці витоку, то потрібно знати характер розподілу тиску вздовж трубопроводу для прогнозування можливих витоків. А для екологічної безпеки необхідно коригувати тиск на початку трубопроводу, оскільки він є найбільш небезпечний з точки зору виникнення проривів на трубопроводі.

Для розв'язку поставленої задачі об'єктом дослідження вибрано нафтопровід і використано промислові вимірювання витрати, тисків, температур, в'язкості на діючому трубопроводі.

Особлива увага звернена на прогнозування можливих витоків за даними внутрішньотрубною діагностики інтелектуальними поршнями, які вказують на наявність дефектів в певних точках трубопроводу та їх розміри. Експериментальні дослідження процесу витікання рідини з отворів неправильної форми, які мають місце при виникненні аварійних ситуацій у процесі експлуатації, їх статистична обробка дають змогу визначити коефіцієнт витрати, який потрібно знати для прогнозування витікань.

Розподіл тиску вздовж трубопроводу дасть змогу визначити величину можливих витікань у будь-якій точці трубопроводу, де виявлені дефекти в тілі труби, що необхідно для моделювання траєкторії витоку нафти та площі забрудненої території, впровадження заходів із попередження забруднення довкілля і зменшення впливу нафтопроводу на навколишнє середовище, що є особливо актуальним.

Використання геоінформаційних систем (ГІС) дає можливість на вищому рівні розв'язувати задачі екологічного моніторингу траси магістральних нафтопроводів, проводити моделювання наслідків аварійних

розливів нафти, ранжування ділянок трубопроводів за екологічним ризиком для проведення заходів щодо зменшення впливу нафтопроводу на довкілля.

Враховуючи, що велика частина інформації, необхідна для управління процесом транспорту нафти, характеризує географічне територіальне розташування об'єктів, використання ГІС дозволить вирішити значну кількість виробничих питань – де це місце знаходиться?

Перший тип питань вимагає з'ясування того, що знаходиться в заданому місці. Місце може бути визначене різними способами за назвою місцевості, за географічними координатами, виділенням на карті, яка зображена на екрані дисплею, наприклад, які магістральні трубопроводи наявні у даній місцевості.

Другий тип питань є оберненим до першого і полягає у в'ясненні або пошуку цього місця, де знаходиться географічний об'єкт або об'єкти, характеристики яких задовольняють деяким умовам. Наприклад, де на території заданого району знаходяться ділянки нафтопроводу з терміном експлуатації понад 20 років.

Розроблена комп'ютерна програма Vytik дозволяє спрогнозувати траєкторію розтікання нафти з дефектного отвору та площу забрудненої території у випадку виникнення аварійної ситуації (рис.1).

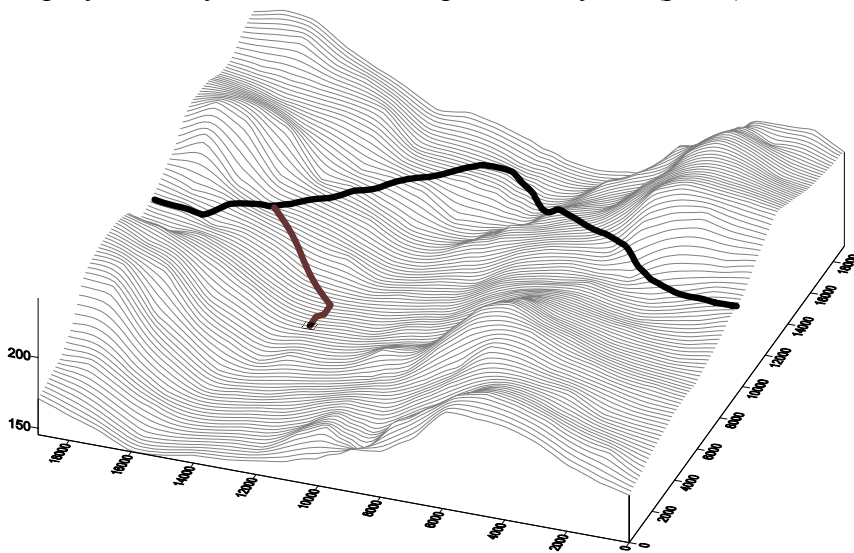


Рис.1 Зображення траєкторії витіку та площі забруднення в аксонометрії для 4 км ділянки трубопроводу, розлив нафти – 100 м^3

Для прогнозування об'ємних втрат нафти, маючи дані діагностування трубопроводів, отримані за допомогою інтелектуального поршня, визначимо витрату рідини при появі витоків із дефектів, які потрапили до групи ризику.

Прогнозована витрата визначається за залежністю [3]

$$Q = \mu \cdot S \sqrt{2g\Delta H} = \mu_{\phi} \cdot S \sqrt{2 \frac{P}{\rho}}, \quad (3)$$

де μ – коефіцієнт витрати крізь отвір некруглої форми, який апроксимуємо у вигляді ромба з діагоналями l і b (залежність (2.11)).

Геометричні розміри дефекту, його глибина та місцезнаходження в трубопроводі є результатом діагностування.

$$\Delta H = \frac{P - P_1}{\rho g}, \quad (4)$$

де P – тиск всередині трубопроводу; P_1 – тиск на зовнішній твірній труби, який залежить від середовища, куди витікає нафта.

Напір над центром отвору $p / \rho g$ визначається як віддаль від точки витікання до лінії гідравлічних нахилів трубопроводу в плановому режимі його експлуатації.

Коефіцієнт витрати μ_{ϕ} , який враховує фільтраційні властивості ґрунтів, рівний [4]

$$\mu_{\phi} = \left(\frac{1}{\mu^2} + \alpha \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

де α – коефіцієнт опору ґрунту.

$$\alpha = \frac{2gS^2v_n \cdot L}{Q \cdot k_{\phi} \omega \cdot v_e \cdot S_1}, \quad (6)$$

де v_n , v_e – в'язкість нафти і води відповідно; k_{ϕ} – коефіцієнт фільтрації ґрунту; S – площа перерізу аварійного отвору; ω – поправочний коефіцієнт на вологість ґрунту; Q – витрата рідини без врахування фільтраційних особливостей ґрунту; S_1 – середня площа перерізу змоченого нафтою ґрунту; L – відстань між місцем знаходження розлитої нафти і місцем розташування відкритого отвору.

Коефіцієнт фільтрації ґрунту

$$k_{\phi} = \frac{v}{i}, \quad (7)$$

де v – швидкість фільтрації.

$$v = \frac{Q}{S_n}, \quad (8)$$

де Q – витрата рідини через аварійний отвір; S_n – площа розлитої нафти (визначається з моделі рельєфу); i – гідравлічний нахил пласта (знаходиться з моделі рельєфу).

Поправочний коефіцієнт на вологість ґрунту знаходимо за методикою, наведеною в [6]. Площа перерізу змоченого нафтою ґрунту та відстань L (знаходиться з моделі рельєфу).

Коефіцієнт витрати, визначений за залежністю (2.11) $\mu=0,89$, а з урахуванням фільтраційних особливостей ґрунту $\mu_{\phi}=0,853$.

Отже кількість нафти, яка вилілася з аварійного отвору за час τ , буде

$$V = \mu_{\phi} S \sqrt{2gH} \cdot \tau. \quad (9)$$

Приймаємо середньостатистичний час витікання $\tau = 2,5$ години (з моменту розгерметизації трубопроводу до моменту ідентифікації аварійної ситуації і відключення насосної станції) [3].

Прогнозування розвитку аварії ведемо за тисками в плановому режимі експлуатації (розглядаємо “найгірший” випадок, оскільки тоді об’єми аварійних витікань будуть максимальними).

Об’єм нафти, яка може потенційно витекти з дефекту за аварійної ситуації, складається з об’ємів забруднення при розливі на поверхні ґрунту, випаровування в атмосферу, насичення та фільтрації нафти в масиві ґрунту.

Підземні води зони аерації, захищені від техногенного забруднення шаром ґрунтів різного літологічного складу та різної товщини, який відіграє роль екрану і служить основою (фундаментом) для нафтопроводу. Наприклад, нафтопровід “Одеса-Броди” прокладений у різних ґрунтах: пісках, супісках, суглинках та глинах. Вони мають різні фільтраційні властивості і при аварійних викидах нафтопроводів захисна роль їх буде різною.

Масштаби забруднення зони аерації у районі розташування нафтопроводів при їх відмові в основному залежать від об’єму витіку нафти, проникності ґрунтів, їх потужності, рельєфу місцевості, глибини залягання ґрунтових вод, їх живлення та розвантаження.

За даними роботи [1] процес забруднення зони аерації при витіках нафти на земній поверхні можна розділити на три стадії.

Перша стадія характеризується утворенням поверхневого ареалу внаслідок заповнення нафтою заглибин на поверхні землі. На другій стадії проходить, головним чином, вертикальна інфільтрація нафти. Третя стадія характеризується боковою міграцією нафти у ґрунтах, при цьому у більш проникних ґрунтах цей процес проявляється значною мірою.

Однією з задач досліджень є визначення площі забрудненої території і її конфігурації для прогнозування екологічного ризику.

Наявність сучасних засобів геоінформаційного моделювання дозволяє розв’язати задачі прогнозування можливих наслідків аварій на трубопроводі в результаті розгерметизації.

Отже, загальна кількість нафти, яка може витекти з аварійного дефекту, з врахуванням фільтраційних властивостей ґрунту становить

$$Q = q_0 + q_e + q_{cm}, \quad (10)$$

де q_0 – витрата нафти, яка просочується з поверхні землі (інфільтрація); q_e – витрата нафти, яка випаровується; q_{cm} – кількість нафти, яка стікає по рельєфу місцевості.

Визначимо, яка кількість нафти просочується з поверхні землі в ґрунт q_0 , використавши методику, запропоновану в [3].

При розливі 100 м^3 нафти кількість нафти, яка просочилася, рівна $M_0=27200 \text{ кг}$.

Кількість нафти, яка випарувалася, становить $M_g=1200 \text{ кг}$.

Загальна кількість нафти, яка витекла з трубопроводу – $M=85000 \text{ кг}$, отже кількість нафти, яка стікає по рельєфу – $M_{cm}=56600 \text{ кг}$.

Нафта, яка витекла з трубопроводу, негативно впливає на всі компоненти навколишнього середовища, а, основне, на людину, на стан її здоров'я.

Розглянемо, як впливають на людину пари нафти.

Нафта – це складна суміш вуглеводнів та неуглеводневих сполук. До нафти входять у різному співвідношенні насичені вуглеводні (парафіни), нафтени й ароматичні вуглеводні. До неуглеводневих (гетероатомних) належать органічні сполуки сірки, кисню, азоту, а також сполуки металів та деяких інших хімічних елементів. Нафта містить також високомолекулярні смолисто-асфальтенові сполуки.

При експлуатації нафтопроводів, а, особливо, при виникненні аварійних ситуацій, в атмосферу надходить значна кількість різних хімічних сполук – як відомих у природі, так і синтезованих людиною. Але всі вони належать до локальних і безпосередньо пов'язані зі специфікою галузі.

Уже накопичено багато фактів про можливий несприятливий вплив атмосферних забруднень на населення. Саме вони стали причиною посилення уваги до санітарної охорони атмосферного повітря і дозволили виділити медичний аспект як визначальний у цій складній та багатогранній проблемі.

Найдетальніші дані про вплив на здоров'я населення є нині стосовно таких поширених забруднювачів, як завислі речовини та діоксид сірки [4].

Першими сигналами можливої негативної дії атмосферних забруднень на здоров'я населення були так звані токсичні тумани – випадки гострого впливу атмосферних забруднень, концентрація яких зростала за несприятливих метеорологічних умов.

Друга група чинників, які спонукали підвищити увагу до проблеми забруднення атмосферного повітря, пов'язана з хронічними неспецифічними захворюваннями.

Одним із основних напрямів зменшення викидів і забезпечення високої якості атмосферного повітря є встановлення та контроль за додержанням нормативів гранично-допустимих викидів (ГДВ) та виконання заходів щодо їх досягнення.

Визначимо розподіл концентрації поллютантів в турбулентному потоці по вертикалі за залежністю [7]

$$c = c_0 e^{\left| -\left(\frac{3g}{u^2}\right)h \right|}, \quad (11)$$

де c_0 – концентрація над поверхнею землі; u – швидкість вітру.

Приймаємо $u=4,5 \text{ м/с}$.

Концентрація над поверхнею Землі при швидкості вітру $u=4,5$ м/с складає 12мг/м^3 .

Будуємо графік розподілу концентрації поллютантів по висоті (рис.2), використавши залежність (5.1).

Із графіка (рис.2) випливає, що концентрація поллютантів на рівні дихання менша, ніж гранично допустима концентрація нафтопродукту в атмосфері робочої зони (10мг/м^3) і складає $1,36\text{мг/м}^3$.

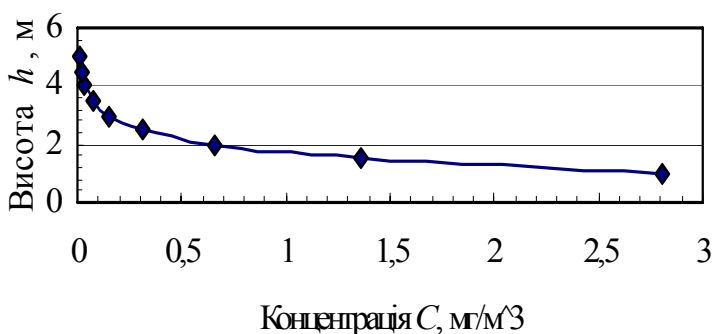


Рис.2. Розподіл концентрації поллютантів по висоті

Побудуємо діаграму розподілу кількості розлитої нафти (рис.3).

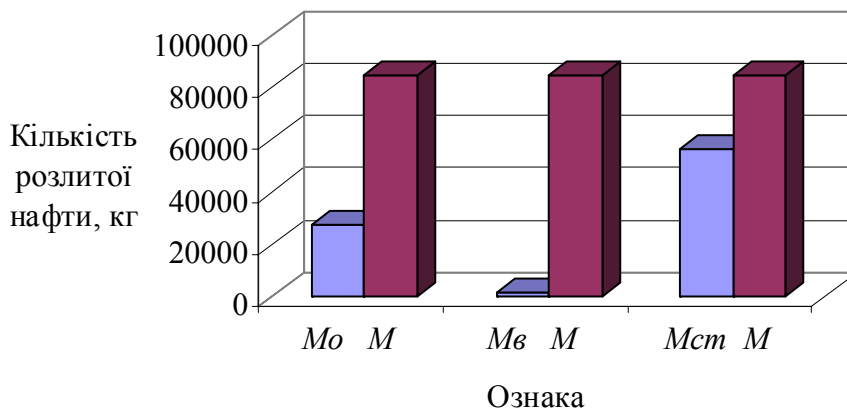


Рис.3. Розподіл кількості виленої нафти

Із діаграми випливає, що при різко пересіченому профілі траси при аварійних витіканнях основна маса нафти стікає по схилах, а за наявності в зоні розтікання водних об'єктів – забруднює їх.

Література

1. Кривенко Г.М. Вплив чинників на технічний ризик у ході експлуатації нафтопроводів / Г.М.Кривенко, Я.М.Семчук, М.П.Возняк, Л.В.Возняк // Розвідка та розробка нафтових і газових родовищ. – 2008. – 4(29) – С.108-111.
2. Кривенко Г.М. Комп'ютерне моделювання розтікання нафти та зони забруднення / Г.М.Кривенко // Науковий вісник Івано-Франківського

- національного технічного університету нафти і газу. – 2005. – 2(11) – С. 82-85.
3. Енергоекологічна безпека нафтогазових об'єктів / [Р.М.Говдяк, Я.М.Семчук, Л.Б.Чабанович та ін.]. – Івано-Франківськ: Лілея-НВ, 2007. – 556 с.
 4. Методика визначення ризиків та їх прийнятних рівнів для декларування безпеки об'єктів підвищеної небезпеки. Міністерство праці і соціальної політики. № 637 від 4.12.2002 р. – 29 с.
 5. Кривенко Г.М. Дослідження процесу витікання рідини при виникненні аварійної ситуації / Г.М.Кривенко, Я.М.Семчук, М.П.Возняк // Розвідка і розробка нафтових і газових родовищ.-Івано-Франківськ. – 2001. – Т.5. – №38. – С. 120-123.
 6. Тугунов П.И. Нестационарные режимы перекачки нефтей и нефтепродуктов / П.И.Тугунов. – М.: Недра, 1984. – 224 с.
 7. Медников Е.П. Турбулентный перенос и осаждение аэрозолей / Е.П.Медников. – М.: Наука, 1980. – 176 с.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 30.03.2011 р.
Рекомендовано до друку д.т.н., професором Середюк М.Д.*

FORECAST OF VOLUMES OF LOSSES OF OIL IN CASE OF ORIGIN OF EMERGENCY SITUATION

M. P. Vozniak, G. M . Kryvenko, L. V. Vozniak

Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;

76019, Ivano-Frankivs'k, Carpats'ka st., 15;

ph. +380 (03422) 4-00-98; e-mail: gidro@nung.edu.ua

Main oil pipelines are the objects of increased hazard. The system of main oil pipelines entered in the period of refuses that result in accidents. Forecast of volumes of possible discharges through the orifices in the body of pipe is given. Computers model the flow of oil through the forecast orifices gives the direction and covered of oil area.

Key words: *oil pipeline, rate, emergency situation.*

УДК 519.652

ІНТЕРПОЛЯЦІЇ ПРОСТОРОВИХ ДАНИХ НА ОСНОВІ ПОВЕРХОНЬ ДЛЯ ПРОГРАМНИХ ЗАСОБІВ ГЕОІНФОРМАЦІЙНИХ СИСТЕМ (ГІС)

Р. Й. Ріпецький, В. М. Сеничак

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua*

Описано математичний характер розподілу просторової ознаки по території за даними точкових спостережень з метою розроблення методів інтерполяції. Для цього використано TIN-поверхні та grid-поверхні. На основі міжшарового аналізу отримано рівняння для лінійної інтерполяції просторових даних в програмних засобах ГІС. Отримані методи перевірені для побудови картограми забруднення території.

Ключові слова: *математична модель, інтерполяція, геоінформаційна система.*

Геостатистичні методи інтерполяції набувають дедалі більшого поширення в дослідженнях природних процесів, пов'язаних з вивченням властивостей просторових даних, зокрема рельєфу, вмісту рухомих форм елементів та шкідливих речовин в ґрунті, підземних водах, інтенсивність освітлення територій як природними так і штучними джерелами світла, а також при просторових змінах властивостей та структури [2]. Математичне моделювання та чисельний аналіз цих процесів неможливий без попередньої побудови адекватної математичної моделі, яка б давала змогу отримувати апроксимовані значення просторових характеристик у довільній точці місцевості.

Розвиток програмних засобів ГІС відкриває нові можливості в методах дослідження просторових даних на основі математичної інтерполяції [3].

ГІС – це комп'ютерна технологія, що забезпечує обробку просторових даних на визначеній території і забезпечує побудову картограм [1].

Аналіз розподілу просторових показників здійснюється засобами ГІС шляхом створення цифрових картограм. Як правило, картограми будуються на основі експериментальних даних шляхом отримання прямих замірів. Причому заміри проводяться не на всій території, а лише в її характерних точках. Це дає змогу економити ресурси під час збору експериментальних даних. Значення показників у сусідніх точках, де заміри не проводилися, отримують методами інтерполяції.

Найбільш поширений метод побудови картограм в ГІС – використання grid-поверхонь на основі регулярних сіток. Кожна комірка сітки

містить тільки значення показника, що виступає як атрибутивна ознака, за даними якої будується картограма.

Таким чином, задача просторової інтерполяції полягає в отриманні функції поверхні просторової ознаки на території дослідження за даними спостережень, що обрані у довільних пробних точках. Важливими фактором, який необхідно враховувати, вважають локалізацію пробних точок. Розташування точок відбору надзвичайно важливе як для отриманні поверхні відгуку, так і для подальших досліджень.

Просторові методи інтерполяції використовують інформацію безпосередньо з найближчих точкових даних. Згідно такого підходу інтерполяція передбачає:

1. визначення території пошуку або сусідньої території навколо точки, значення якої необхідно передбачити;
2. характер розміщення точкових даних у межах даної території;
3. вибір математичної функції для відображення функції відгуку при обмеженій кількості точок;
4. вид інтерполяції.

Виконання вказаних пунктів повинно забезпечити побудову картограми розміщення просторової ознаки. В ідеалі для створення картограм розміщення точок повинно рівномірно охоплювати територію.

У випадку, коли даних достатньо, більшість методів інтерполяції дають аналогічні результати. Якщо дані неузгоджені, вибір відповідного методу інтерполяції є надзвичайно важливим. Геостатистичні методи, що забезпечують інтерполяції на основі розподілу просторового варіювання, дають можливість визначити тренд показника у будь-якому напрямку.

Grid-поверхня – це набір квадратних комірок визначеного користувачем розміру, який покриває прямокутну область зі сторонами, паралельними до осей координат. Кожній комірці ставиться у відповідність якесь числове значення. Цими значеннями можуть бути висота рельєфу, концентрація забруднень шкідливими речовинами, інтенсивність освітлення. В такому випадку відповідно отримується grid-поверхні рельєфу, забруднень, інтенсивності освітлення. Аналогічно можна досліджувати інші явища, що пов'язані з вивченням властивостей просторових даних.

Створення grid-поверхонь відбувається шляхом просторової інтерполяції на основі вихідних даних у вигляді набору точок із заданими числовими даними.

Досліджувану територію многокутної форми розбивають на рівномірну сітку.

Кожна комірка сітки містить тільки одне значення показника, яке виступає як атрибутивна ознака, за даними якої будується картограма. Практично викладена вище методика реалізується в програмах ГІС.

Полігон, який є територією дослідження, розбивають на відповідні ділянки.

Потім виділяють ті з них, що складають якусь розрахункову область, і конвертують у grid-поверхню, яку використовують як маску

(тобто ту частину карти, на якій провадитимуть усі подальші обчислення методами просторової інтерполяції. Наступним кроком є, власне, формування TIN-поверхні, яку використовують для інтерполяції даних grid-поверхні опису показника.

Для створення картограм призначені програмні засоби MapInfo, ArcView та інші. В процесі створення потрібно, щоб всі комірки регулярної сітки мали заповнені значення атрибутивних ознак. Метод точкових спостережень надає значення лише в окремих точках (рис. 1а). Інші комірки сітки повинні бути заповнені розрахунковими значеннями шляхом інтерполяції. Інтерполяція в ГІС виступає як основний метод, який залучається до обробки просторових даних.

Можна уявити собі, що значення розподіленої ознаки виступають у вигляді поверхні, загальний вигляд якої невідомий. Відомими є лише значення показника в кількох характерних точках. Тоді поверхня може бути апроксимована трикутниками, що дозволить складати рівняння площини кожного трикутника у просторі. Вершини трикутників отримують значення відомого показника за даними в точках спостереження. Такі поверхні отримали назву TIN-поверхонь. TIN-поверхня володіє особливими аналітичними можливостями, а також дозволяють виконувати цікаві види аналізу. Проекція TIN-поверхні на площину може мати вигляд (рис.1б).

Математичний опис TIN-поверхні буде у вигляді з кількох рівнянь, що описують у просторі положення трикутників. Їх вершини мають координати просторового розміщення X_i , Y_i та значення показника Z_i , яке взято за результатами замірів.

Рівняння площини одного з трикутників у просторі, за відомими координатами вершин записується за допомогою визначника третього порядку.

Наприклад, для $\triangle ABE$ (рис.1б) позначимо координати вершин $A(X_1, Y_1)$, $B(X_2, Y_2)$, $E(X_3, Y_3)$. В точках A, B, E відомі значення показника, які позначимо як Z_1, Z_2, Z_3 .

$$\begin{vmatrix} X - X_1 & Y - Y_1 & Z - Z_1 \\ X_2 - X_1 & Y_2 - Y_1 & Z_2 - Z_1 \\ X_3 - X_1 & Y_3 - Y_1 & Z_3 - Z_1 \end{vmatrix} = 0. \quad (1)$$

Якщо у визначнику замість координат $X_1, Y_1, X_2, Y_2, X_3, Y_3$ поставити їх числові значення, а також отримані заміром значення показника замість Z_1, Z_2, Z_3 , то перейдемо до рівняння виду

$$Z = aX + bY + c, \quad (2)$$

де a, b, c – постійні величини для даного трикутника.

За допомогою складеного рівняння площини у просторі можна знайти значення показника Z для будь-якої точки з координатами X, Y що належать даному трикутнику. Іншими словами, для будь-якої пари координат, для яких справедлива умова

$$(X, Y) \in \triangle ABE, \quad (3)$$

за допомогою рівняння (2) можна отримати розрахункове значення показника. Таким чином, в межах простору трикутника можна здійснювати лінійну інтерполяцію за рівнянням (2) при виконанні умови (3).

Особливістю ГІС є здатність до просторового аналізу, в ході якого визначається взаємне розміщення об'єктів. Сучасні ГІС-технології дозволяють автоматизувати процеси розрахунків за умовою (3), використовуючи методи просторових відношень, якими наділені програмні пакети [4].

Зведення задач до формування умови (3), безумовно, потребує автоматизованих методів її розв'язку.

Так, в процесі інтерполяції до умови (3) можна віднести задачу по відборі клітинок grid-поверхні, центроїди яких знаходяться в межах проекції заданого трикутника TIN-поверхні.

Це дозволить для вибраних клітинок за відповідною формулою (4) розрахувати значення Z за координатами центроїду цих клітинок.

В програмних засобах ГІС окремо формуються два тематичні шари: у вигляді поверхні grid (рис.1а) та у вигляді трикутників TIN-поверхні (рис. 1б).

Автоматизований метод інтерполяції відбувається за наступним алгоритмом з використання операторів просторого відношення. Для аналізу умови (3) вводимо два об'єкта: об'єкт А як TIN-поверхня та об'єкт В як grid-поверхня. Далі проводиться відбір тих клітинок grid-поверхні, центри тяжіння яких виконується умова (3).

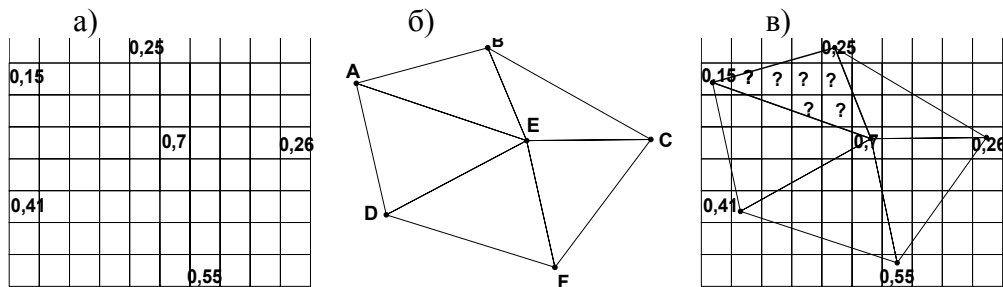


Рис.1. Інтерполяції просторових даних на основі поверхонь:

- а) тематичний шар grid-поверхні; б) тематичний шар TIN-поверхні;
- в) міжшаровий аналіз інтерполяції даних

Отже, grid-поверхня та TIN-поверхня розміщують у різних тематичних шарах. Інтерполяція даних базується на можливостях міжшарового аналізу, а саме визначати в середину якого трикутника TIN-поверхні потрапили поточні координати X та Y . Тобто в програмних засобах може бути реалізована можливість перевірки умови (3). Якщо за координати X та Y прийняти центроїди клітинок grid-моделі, розрахункове значення Z буде виступати як атрибутивна ознака. А в межах $\triangle ABE$ буде проведена лінійна інтерполяція даних за допомогою рівняння (2). Центроїди клітинок регулярної сітки grid-поверхні, які потрапили до простору $\triangle ABE$, і для яких шляхом інтерполяції визначаються розрахункові значення, показані знаком «?» (рис.1в).

Таким чином, кількість рівнянь виду (2) відповідає кількості трикутників, що утворюють TIN-поверхню. Якщо поверхня розбита на n трикутників, то остаточне рівняння прийме вигляд:

$$Z = \begin{cases} a_1 \cdot X + b_1 \cdot Y + c_1, & \text{якщо } (X, Y) \in \Delta 1; \\ a_2 \cdot X + b_2 \cdot Y + c_2, & \text{якщо } (X, Y) \in \Delta 2; \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ a_n \cdot X + b_n \cdot Y + c_n, & \text{якщо } (X, Y) \in \Delta n. \end{cases} \quad (4)$$

Для визначення крутизни TIN-поверхні можна використати частинні похідні.

Тоді градієнт можна визначити через частинні похідні першого порядку функції z :

$$\frac{\partial z}{\partial x} \approx \frac{Z_W - Z_E}{2}; \quad \frac{\partial z}{\partial y} \approx \frac{Z_N - Z_S}{2}.$$

Оцінка середнього ухилу комірки визначаємо за формулою:

$$\text{tg } \alpha = \sqrt{\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2};$$

Тоді

$$|\vec{g}| = \sqrt{\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2},$$

або

$$|\vec{g}| \approx \sqrt{\left(\frac{Z_W - Z_E}{2}\right)^2 + \left(\frac{Z_N - Z_S}{2}\right)^2}.$$

Розрахунок ухилу схилу в якому відбувається найбільша зміна позначок поверхні, проводиться за формулою:

$$\text{tg } \alpha = -\frac{\frac{\partial z}{\partial y}}{\frac{\partial z}{\partial x}}.$$

За необхідності можна перейти від градієнтів до ухилів, поданих у градусах

$$S = \frac{180}{\pi} \arctg|\vec{g}|.$$

Розвинутий аналітичний апарат в програмі MapInfo дозволяє здійснити перевірку на виконання умови відбору клітинок за критерієм (3) з використанням операторів просторового відношення Contains або Within (табл.1) [2].

Рівняння (4) було реалізовано в пакеті MapInfo використовуючи просторові запити з відбором текучих координат X та Y і формул (4) для розрахунку.

Таблиця 1. Оператори просторового відношення

Оператор	Дія	Запис умови
Contains	Об'єкт А містить об'єкт В	object A Contains object B
Within	Об'єкт В знаходиться в середині об'єкту А	object B Within object A

Запропонований метод інтерполяції на основі поверхонь може використовуватися в ГІС при географічному аналізі як швидкий метод поєднання точкових даних з їх просторовим розміщенням.

На основі наведеного методу інтерполяції отримана картограма забруднень території. промисловими підприємствами про концентрацію у ґрунті шкідливих речовин.

На основі наведеного методу інтерполяції була отримана картограма забруднень території промислового підприємства про концентрацію у ґрунті шкідливих речовин. В нашому випадку досліджувана територія промислового підприємства складала площу 10000 м² і була розбита на 14 трикутників.

На основі експериментальних даних була утворена TIN поверхня забруднення території, що складалася з 14 трикутників. Якість побудови тематичної картограми забруднень оцінювалася від розмірів клітинки grid-поверхні. В якості атрибутивної ознаки виступала концентрація шкідливих речовин. Спочатку в клітинки сітки, в яких знаходилися вершини трикутників, були внесені відомі експериментальні значення концентрації забруднень з точок спостереження. Заповнення рівномірної сітки здійснено методом просторової інтерполяції на основі TIN поверхні з використанням в ГІС для заповнення рівномірної сітки з точкових даних.

Згідно методики, експериментальні значення забруднень отримували ті комірки сітки, в яких знаходяться вершини трикутників.

Побудова картограми забруднень оцінювалася в залежності від розміру клітинок сітки.

Рівняння (4) були розв'язані в програмі Mapinfo, з урахуванням умови (3) шляхом створення просторових запитів.

Література

1. Географічні інформаційні системи / За ред. Ван Мервіна М., Кохан С.С. – К.: НАУ. – 2003. – 206 с.
2. The within field variability of mineral nitrogen in grassland / N.Bogart, A.Vermoesen, J.Salomez, G.Hofman, O.Van Cleemput, M.Van Meirvenne. 2000. *Biol. Fert. Soils*. 32: 186-193.
3. Geostatistical tools for modeling and interpreting ecological spatial dependence / R.E.Rossi, D.J.Mulla, E.H.Journal, E.H.Franz. 1992.. *Ecol. Mon.* 6(2): 277-314.
4. Апроксимація рельєфу Львівщини у картографічній системі ARCVIEW. О. Левченко, Львівський національний університет імені

Івана Франка. Вул. Університетська, 1, м. Львів, 79000, e-mail: kis@franko.lviv.ua.

*Стаття надійшла до редакційної колегії 13.10.2011 р.
Рекомендовано до друку д.т.н., професором **Мойсишиним В.М.***

INTERPOLATIONS OF SPATIAL DATA ON THE BASIS OF SURFACES FOR THE PROGRAMMATIC TOOLS OF THE GEOINFORMATICAL SYSTEMS (GIS)

R. Y. Ripetskyy, V. M. Senychak

*Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;
76019, Ivano-Frankivs'k, Carpathians st., 15;
ph. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua*

Formulated task to describe mathematically the character of distributing of spatial sign on territory from data of point supervisions. The decision of task is related to development of methods of interpolation. TIN-surfaces and grid-surfaces are used. On the basis of the interstratified analysis the equalization is got for linear interpolation of spatial data in programmatic tools GIS. The got methods are tested for construction of map of contamination of territory.

Key words: *mathematical model, interpolation, geoinformatical system.*

СИСТЕМНІ ПІДХОДИ ТА ШЛЯХИ ОПТИМАЛЬНОГО ВПРОВАДЖЕННЯ СИСТЕМ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ У ВИЩУ ОСВІТУ УКРАЇНИ

Л. О. Сав'юк

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (03422) 4-80-00; e-mail.: lorasavuk@rambler.ru*

Розглянуто сучасний стан розвитку, подальші шляхи та перспективи впровадження методів та систем дистанційного навчання у навчальний процес Вищих навчальних закладів України. Запропоновано системний підхід у проектуванні систем даного призначення.

Ключові слова: *інформаційно-комунікаційні технології, дистанційне навчання, дистанційна освіта, дистанційний курс, програмне забезпечення.*

Сучасний етап розвитку вищої освіти України неможливо уявити без широкого інтегрування у процес підготовки майбутніх спеціалістів, особливо технічного спрямування, сучасних інформаційно-комунікаційних технологій (ІКТ) та методів дистанційного навчання (ДН). На жаль, серед викладацького складу Вищих навчальних закладів (ВНЗ) нашої країни не сформована загальна думка щодо доцільності впровадження інструменту та алгоритмів дистанційного навчання у навчальний процес. Пояснити ситуацію, що склалася, можна наступними причинами:

1. Відсутність або недосконалість державних законодавчих актів та інших сертифікаційних документів в області ДН.
2. Недостатня інформованість про сучасні програмні інструментальні засоби для розробки систем ДН та моніторингу навчального процесу, особливо безкоштовних з відкритим програмним кодом (Free Open Source).
3. Відсутність відповідного технічного забезпечення та швидкісних комунікаційних мереж.
4. Відсутність достатньої мотивації в оволодінні методами ДН та завантаженість професорсько-викладацького складу.
5. Недостатній рівень знань працівників ВНЗ для створення високоякісних мультимедійних та інтерактивних електронних ресурсів.
6. Легковажне та поверхневе ставлення до питань проектування і впровадження систем ДН.

В результаті, спостерігається зростання недовіри і розчарування в ефективності використання методів ДН, особливо в системі вищої технічної освіти.

В березні 2011 року був оприлюднений результат аналізу безпосередніх небезпек для молоді України, і освіти у цілому, з боку проекту Закону “Про вищу освіту ” Міністерства освіти і науки, молоді та спорту

(МОНМС) [1]. Аналіз був проведений заступником Голови ВМГО “Фундації Регіональних Ініціатив” (ФРІ) Антоном Делікатним та Головою Ради Старійшин ФРІ Михайло Лебедем. Серед інших зауважень щодо даного законодавчого акту оберемо редакцію статті 41 проекту МОНМС, яка визначає “Форми навчання у вищих навчальних закладах” і пропонує виключити норму існуючого Закону щодо можливості поєднання форм навчання (денної, заочної, вечірньої, екстернатної). В новій редакції “Навчання у вищих навчальних закладах здійснюється за такими формами: денна; вечірня; заочна (дистанційна); екстернат”. Як бачимо, жодної межі між заочною та дистанційною формою навчання не проводиться. Однак ДН – це система яка має свої особливі ознаки та передумови виникнення та розвитку.

Спеціалістами Проблемної лабораторії дистанційного навчання при Національному технічному університеті “Харківський політехнічний інститут” дистанційне навчання визначається як сукупність педагогічних технологій (форма навчання), що базуються на принципах відкритого і комп’ютерного навчання та активних методах навчання у спілкуванні в інформаційному освітньому просторі, для організації освіти користувачів, розподілених у просторі та часі [2].

Таким чином, ДН – самостійна пізнавальна діяльність суб’єктів навчання, що відрізняється відкритим доступом до освітніх джерел і забезпечується інформаційними технологіями і засобами комунікацій.

Процес ДН відбувається у структурі розроблених систем дистанційного навчання (СДН), які є складними, багатокомпонентними системами і мають тенденцію до безперервного та динамічного розвитку. Ефективна робота такої системи не може спиратися на емпіричний досвід, інтуїцію і досліди розробників. Необхідно враховувати системний підхід до впровадження СДН, сформувані взаємозалежності її окремих елементів, компонентів і підсистем.

Сучасні СДН повинні відповідати таким вимогам [3]:

1. Система повинна бути не лише індексованим репозиторієм (банком) якісних електронних ресурсів, але і розвинутим педагогічним середовищем, що дозволяє запровадити індивідуальний підхід в навчанні, максимально наблизити студента до глибинного змісту предметної області.

2. Система повинна сприяти оптимальному поєднанню теоретичних знань з їх практичною цінністю.

3. СДН повинна дозволяти неупереджено проводити діагностування поточного і кінцевого рівня знань на основі сучасних теорій педагогічних вимірювань

4. Система повинна заохочувати студентів до соціальної творчості в колі однодумців під керівництвом викладача, який є модератором курсу.

5. Система повинна відповідати всім вимогам адаптивних систем управління.

В практиці вітчизняних ВНЗ намітилися три напрямки розвитку СДН: впровадження та інтегрування у навчальний процес корпоративних систем управління навчальним процесом (Learning Management Systems – LMS) та

електронним контентом (Content Management Systems - CMS), розробка власних програмних засобів (ПЗ) подібного призначення та використання ПЗ з відкритим програмним кодом (Free Open Source). Аналіз переваг і недоліки кожного з названих підходів наведені у [4].

1. Корпоративні СДН неможливо оптимально та ефективно адаптувати до потреб кожного ВНЗ. Системи даного класу ставлять педагогів у жорсткі рамки задокументованих алгоритмів і методів при створенні дистанційних курсів (ДК) спеціалізованих дисциплін, не дозволяють повною мірою проявити свої творчі здібності і інтелект. Керівництву ВНЗ необхідно постійно підтримувати зв'язок з розробниками ПЗ, що вимагає додаткових матеріальних і часових витрат. До переваг таких систем можна віднести лише високий професіональний рівень розробки.

2. Проектування та впровадження власних СДН не є ефективним і оптимальним шляхом активного впровадження методів ДН у вищу освіту України в наслідок того, що даний процес потребує великої кількості часових та інтелектуальних витрат, а СДН потрібні ВНЗ у найбільш стислі терміни. Такі системи повинні володіти багатьма ознаками якісного ПЗ, такими, як гнучкість та захищеність програмного коду, крос-платформеність, зручність та багатофункціональність інтерфейсу. Вказані задачі не можуть бути вирішені викладачами та вузьким колом спеціалістів, які не мають достатньої підготовки і практичних навичок в області програмування та WEB-дизайну.

3. СДН з відкритим програмним кодом поєднали у собі всі переваги корпоративних LMS та систем, розроблених власними силами, водночас, СДН подібного класу володіють великим арсеналом унікальних властивостей.

На сьогоднішній день найбільшого розповсюдження та впровадження серед ПЗ рівня Free Open Source для організації навчального процесу отримало всесвітньо відоме модульне динамічне об'єктно-орієнтоване середовище для організації ДН в мережі Internet Modular Object-Oriented Dynamic Learning Environment (MOODLE) особливими професійними якостями якої є [5]:

1. Модульна структура та можливість створення концептуальної моделі ДК.

2. Велика кількість додаткових плагінів, фільтрів і модулів, що забезпечують розширені можливості системи, такі як опитування, розгалужені практичні заняття, інтерактивні лекції.

3. Постійна підтримка розвитку системи зусиллями світового співтовариства ентузіастів (програмістів, дизайнерів, педагогів, психологів).

4. Створення платформи LMS MOODLE на основі сучасної теорії педагогічних вимірювань та філософії соціального конструктивізму в області педагогіки та організації освіти.

5. Підтримка IMS/SCORM специфікації ДН, програмної платформи на основі мови програмування PHP та MySQL, універсальна загальнодоступна ліцензія GNU General Public License (GPL), україномовна підтримка.

6. Запровадження та успішне використання системи у навчальному процесі відомих закордонних та вітчизняних ВНЗ, серед яких слід вказати на відомий Відкритий Університет (Open University) Великобританії, що є признаний світовим лідером у області ДН і щорічно зараховує на навчання приблизно 200 тисяч студентів, Національний університет “Києво-Могилянська академія”, Національний технічний університет “Харківський політехнічний інститут”.

Згідно положень кібернетики, які стосуються структури та функціонування адаптивних систем автоматичного управління, може бути запропонована функціонально-структурна схема СДН інтелектуального рівня, що зображена на рис. 1.

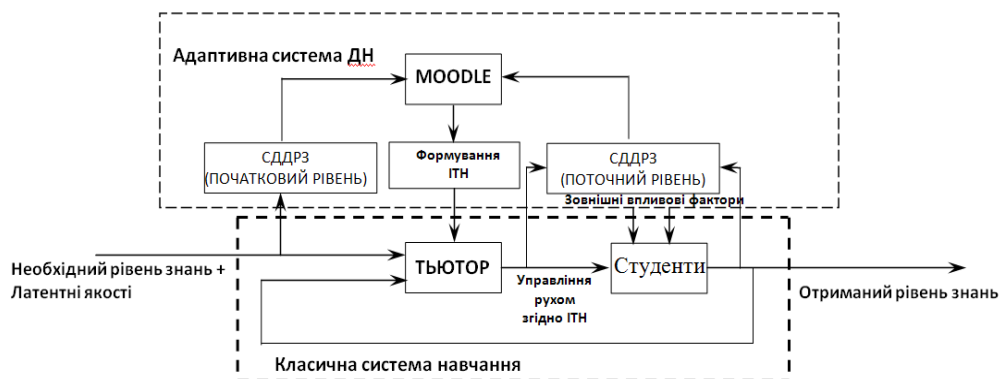


Рис.1. Функціонально-структурна схема адаптивної СДН: СДДРЗ – система дистанційного діагностування рівня знань; ІТН – індивідуальна траєкторія навчання

Як можна побачити з рис.1, окрім прийнятої класичної методики навчання система включає ланцюг адаптації, який дозволяє визначати початковий і поточний рівень студентів у рамках певної предметної області та формувати через середовище LMS MOODLE індивідуальні траєкторії навчання студентів, не дивлячись на зовнішні впливові фактори та скриті (латентні) якості кожного з них.

Наприкінці можна зробити наступні висновки:

1. ДН слід розуміти як тривалий процес впровадження інноваційних методів в освіту на основі сучасних ІКТ і педагогічних теорій.

2. Комерціалізації ДО повинні передувати експериментальні дослідження на обмеженому контингенті мотивованих суб'єктів навчання, при цьому перспективними слід рахувати адаптивні СДН, розробка яких спирається на теоретичні положення проектування кібернетичних систем.

3. Якісні ДК повинні бути сертифікованими і авторизованими, що передбачає матеріальну і моральну підтримку розробників.

4. Випускники ДК повинні мати гарантію суспільного визнання отриманих знань і навичок.

5. Найближчою реальною перспективою розвитку ДН (його інструментарієм) слід рахувати безкоштовне ПЗ з відкритим програмним кодом.

6. Колектив розробників ДК повинен бути ретельно сформованим і адаптованим до рішення поставлених завдань.

Література

1. Антон Делікатний, Михайло Лебець. Небезпеки останнього варіанту проекту Закону “Про вищу освіту” МОНМС [Електронний ресурс] / Режим доступу к ресурсу: <http://fri.com.ua>.
2. Кухаренко В.М. Дистанційне навчання. Умови застосування / В.М.Кухаренко, О.В.Рибалко, Н.Г.Сиротенко // Посібник. – Харків, 2001. – 282 с.
3. Савюк Л.А. Проектирование адаптивных интерактивных информационных обучающих комплексов систем дистанционного обучения / Л.А.Савюк // Сборник научных трудов 13-й Международной конференции “Образование и виртуальность” Украинской ассоциации дистанционного образования. – Харьков-Ялта. – 2009. – С. 213-221
4. Заміховський Л.М. Вибір інструментальних засобів проектування систем дистанційного навчання вищих навчальних закладів / Л.М.Заміховський, Л.А.Сав’юк // Сучасні освітні технології у вищій школі: Матеріали міжнар. науково-мет. конференції: Тези доповідей: У 2 ч. – Ч 1. – Київ. Нац. торг. екон. ун-т. – 2007. – С. 24-26
5. Савюк Л.А. Создание дистанционных курсов в системе управления учебным процессом MOODLE / Л.А.Савюк // Образование и виртуальность. – Сборник научных трудов 11-й Международной конференции “Образование и виртуальность” Украинской ассоциации дистанционного образования. – Харьков-Ялта. – 2007. – С. 305-314

Стаття надійшла до редакційної колегії 13.10.2011 р.

Рекомендовано до друку д.т.н., професором Заміховським Л.М.

SYSTEM APPROACHES AND WAYS OF OPTIMAL IMPLEMENTATION OF DISTANCE LEARNING SYSTEMS TO HIGHER EDUCATION OF UKRAINE

L. O. Sav'yuk

Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;

76019, Ivano-Frankivsk, Karpatska str., 15;

ph. +380 (3422) 4-80-00; e-mail: lorasavuk@rambler.ru

The current status of development, further ways and prospects of methods and systems of distance learning in the educational process of higher education in Ukraine. The proposed systematic approach in designing systems of this appointment.

Keywords: *informatics communication technologies, controlled from distance study, controlled from distance education, controlled from distance course, software.*

УДК 378.091.212.2

ДОСЛІДЖЕННЯ ЗВ'ЯЗКУ МІЖ АКАДЕМІЧНОЮ УСПІШНІСТЮ СТУДЕНТІВ ІФНТУНГ ТА РЕЗУЛЬТАТАМИ ВСТУПНОЇ КАМПАНІЇ 2010 РОКУ

І. М. Гураль¹, М. М. Осипчук², Л. Р. Смоловик¹

¹ Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу;
76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15;
тел. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua

² Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника;
76025, м. Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57;
e-mail: myosyp@ukr.net

Проаналізовано статистичний зв'язок між результатами зовнішнього незалежного оцінювання, середнього балу документа про повну загальну середню освіту та показниками академічної успішності студентів в ІФНТУНГ.

Ключові слова: зовнішнє незалежне оцінювання, успішність, кореляція, кластерний аналіз, дискримінантний аналіз.

В 2010 році в Україні відбір абітурієнтів до вищих навчальних закладів (ВНЗ) здійснювався за критерієм, в якому використовувалось сумування з рівними вагами балів сертифікатів зовнішнього незалежного оцінювання (ЗНО) з предметів, які є профільними для навчання в відповідному ВНЗ, і середнього балу із документа про повну загальну середню освіту, приведеного до системи виставлення оцінок ЗНО. Процедура відбору повинна була забезпечити якість майбутнього студента, і її ефективність можна оцінити за можливістю оптимального прогнозування успішності студента. Різні предмети тестують різні здібності і знання абітурієнтів, середній бал документа про середню освіту до деякої міри залежить від навчального закладу. При неоптимальному виборі предметів і, можливо, середнього балу документа про середню освіту, а також шкал оцінок, відбувається несприятливий відбір абітурієнтів. Формування оптимального критерію для конкретного ВНЗ може спиратися на статистичний аналіз зв'язків між результатами ЗНО, середнього балу документа про середню освіту та показниками успішності в ВНЗ.

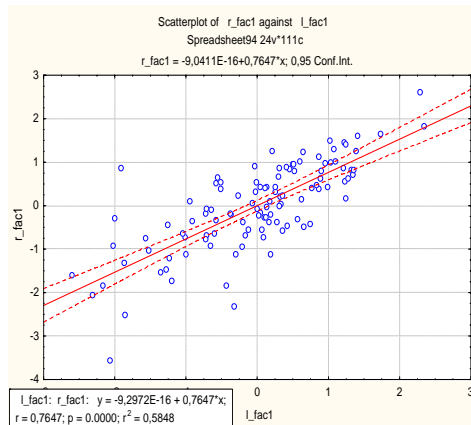
Для порівняння результатів навчання студентів першого курсу з результатами ЗНО їхніх навчальних досягнень та середнього бала атестата про середню освіту, проаналізовано результати зарахованих в 2010 році студентів (громадян України) двох факультетів Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу (ІФНТУНГ): газонафтопромислового факультету (ГНПФ), факультету управління галузевим регіональним економічним розвитком (ФУГРЕР). Для вступу абітурієнти цих факультетів подавали: середній бал документа про повну загальну середню освіту, сертифікат з української мови та

літератури, сертифікат з математики і сертифікат з третього предмету на вибір абітурієнта (фізика, хімія, іноземна мова – для ГНПФ ; географія, історія України, іноземна мова – для ФУГРЕР).

Всі статистичні дослідження проводились з використанням пакету статистичного аналізу STATISTICA.

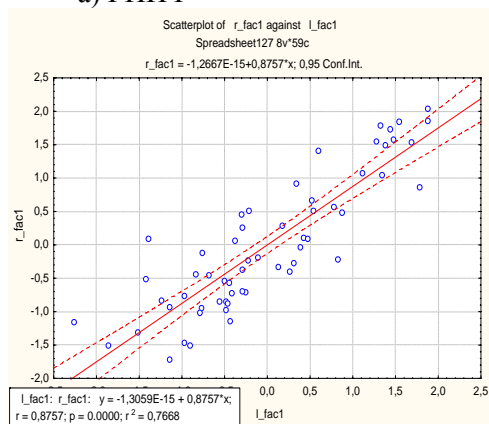
Нехай x_0 – середній бал документа про повну загальну освіту, приведений до системи виставлення оцінок ЗНО (максимальний бал 200), x_1 – результат ЗНО з української мови та літератури, x_2 – результат ЗНО з математики, x_3 – результат ЗНО з предмету на вибір абітурієнта в залежності від факультету, y_i – результати першої задачі іспитів двох екзаменаційних сесій. Крім того, розглядаємо деякі узагальнені результати: x – сума балів документа про повну загальну освіту та результатів ЗНО; y – середній бал результатів іспитів двох екзаменаційних сесій.

Canonical Analysis Summary (GNPF1)		
Canonical R: ,76470		
Chi?(36)=134,88 p=0,0000		
Left Set	Right Set	
N=111		
No. of variables	4	9
Variance extracted	100,000%	65,6648%
Total redundancy	41,8829%	24,6776%
Variables:		
1	Atest	Matem 1
2	UM	Himiya
3	Mat	Narysna
4	Predmet	Istoriya
5		Matem 2
6		Fizyka
7		NafSpravz
8		UkrMova
9		Inozemna



а) ГНПФ

Canonical Analysis Summary (FUGRE)		
Canonical R: ,87567		
Chi?(36)=95,153 p=0,0000		
Left Set	Right Set	
N=59		
No. of variables	4	9
Variance extracted	100,000%	74,3014%
Total redundancy	55,8670%	50,5395%
Variables:		
1	ATES	mat
2	UM	reg_ekon
3	MAT	osn_pid_diyaln
4	PRED	ist_U
5		ist_k
6		ukr_m
7		mat1
8		inf_sys
9		pidpr_d



б) ФУГРЕР

Рис. 1. Результати канонічного аналізу та діаграми розсіювання головних канонічних коренів двох розглянутих множин характеристик

В результаті проведення канонічного аналізу результатів спостережень встановлено тісний зв'язок (канонічні коефіцієнти кореляції

0,7647 для ГНПФ та 0,87567 для ФУГРЕР) між результатами x_1, x_2, x_3, x_4 та $y_1 - y_9$. На рис.1 зображено результати канонічного аналізу та діаграму розсіювання головних канонічних коренів двох розглянутих множин характеристик.

Зауважимо, що коефіцієнти кореляції між узагальненими результатами, а саме сумою вступних іспитів x , за якою проводиться конкурс абітурієнтів, та середнім балом здачі іспитів y дорівнюють відповідно 0,6219 для ГНПФ і 0,8135 для ФУГРЕР. Узагальнені результати дещо менше корелюють між собою, проте обчислені коефіцієнти кореляції вказують на наявність тісного зв'язку між x та y .

Цікаво визначити ступінь зв'язку між окремими вступними результатами та результатами навчання. Встановлено наступні кореляції окремих результатів вступу з узагальненими результатами навчання (рис.2).

Correlations (GNPF)				
Marked correlations are significant at $p < ,05000$				
N=111 (Casewise deletion of missing data)				
Variable	Atest	UM	Mat	Predmet
SerBal	,4952	,5064	,5320	,4745
	$p=,000$	$p=,000$	$p=,000$	$p=,000$

а)ГНПФ

Correlations (FUGRE)				
Marked correlations are significant at $p < ,05000$				
N=56 (Casewise deletion of missing data)				
Variable	ATES	UM	MAT	PRED
SerBal	,6617	,7139	,7484	,5854
	$p=,000$	$p=,000$	$p=,000$	$p=,000$

б)ФУГРЕР

Рис.2. Кореляції окремих результатів вступу з узагальненими результатами навчання студентів ГНПФ – а; ФУГРЕР – б

З таблиць видно, що як для ГНПФ так і для ФУГРЕР коефіцієнти кореляції мають найбільше значення для математики і найменше значення для третього предмету на вибір абітурієнта.

З допомогою кластерного аналізу поділимо студентів кожного факультету на дві групи (кластери): 1 група – студенти, які вчаться краще і 2 група – студенти, які вчаться гірше. На рис.3 зображено середні значення результатів першої здачі іспитів двох екзаменаційних сесій (за 100-бальною шкалою) студентів 1-ої та 2-ої груп для факультетів ГНПФ та ФУГРЕР. Верхня лінія в кожному випадку стосується 1-ої групи студентів, нижня – 2-ої групи.

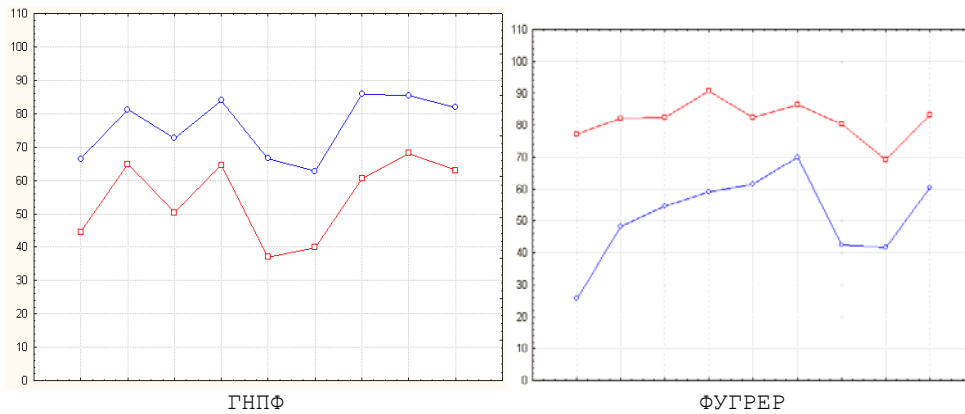


Рис.3. Середні значення результатів першої здачі іспитів двох екзаменаційних сесій (за 100-бальною шкалою) студентів 1-ої та 2-ої груп для факультетів ГНПФ та ФУГРЕР

Побудуємо дискримінантні функції та спрогнозуємо академічну успішність студентів за результатами ЗНО і підсумком навчання в середній школі. На рисунку 4 зображено результати дискримінантного аналізу.

Classification Functions; grouping: CLUSTER Include condition: v6='GNPF'			
Variable	G_1:1 p=,50000	G_2:2 p=,50000	NewVar =v1-v2
ATES	1,025	1,011	0,014104
UM	0,266	0,230	0,03548
MAT	0,233	0,183	0,04991
PRED	0,486	0,467	0,018993
Constant	-172,158	-152,910	-19,2474

Classification Matrix (FUGRE_GNPF) Rows: Observed classifications Columns: Predicted classifications Include condition: v6='GNPF'			
Group	Percent Correct	G_1:1 p=,50000	G_2:2 p=,50000
G_1:1	79,71014	55	14
G_2:2	75,00000	11	33
Total	77,87611	66	47

а) ГНПФ

Classification Functions; grouping: CLUSTER Include condition: v6='FUGRE'			
Variable	G_1:1 p=,50000	G_2:2 p=,50000	NewVar =v1-v2
ATES	0,936	0,886	0,049854
UM	0,219	0,172	0,046566
MAT	0,492	0,417	0,075227
PRED	0,186	0,182	0,004239
Constant	-163,882	-134,605	-29,2777

Classification Matrix (FUGRE_GNPF) Rows: Observed classifications Columns: Predicted classifications Include condition: v6='FUGRE'			
Group	Percent Correct	G_1:1 p=,50000	G_2:2 p=,50000
G_1:1	76,92308	20	6
G_2:2	86,66666	4	26
Total	82,14286	24	32

б) ФУГРЕР

Рис.4. Результати дискримінантного аналізу

В результаті аналізу одержано такі дискримінантні функції та відокремлюючі константи для факультетів:

- ГНПФ: $f = 0,014104x_0 + 0,03548x_1 + 0,04991x_2 + 0,018993x_3$;
 $c = 19,2474$;
- ФУГРЕР: $f = 0,049854x_0 + 0,046566x_1 + 0,075227x_2 + 0,004239x_3$;
 $c = 29,2777$.

Аналізуючи класифікаційні матриці, бачимо, що в приблизно 77,88% випадків (ГНПФ) та 82,14% випадків (ФУГРЕР) маємо правильні прогнози результатів навчання студентів за їх результатами ЗНО і навчання в середній школі. Крім того, для найкращого прогнозу потрібно враховувати ці результати з різними ваговими коефіцієнтами. Так, для ГНПФ ці коефіцієнти становлять: атестат – 11,9%, українська мова – 30%, математика – 42,1%, предмет на вибір – 16%; а для ФУГРЕР: атестат – 28,3%, українська мова – 26,5%, математика – 42,8%, предмет на вибір – 2,4%.

Література

1. Факторный, дискриминантный и кластерный анализ / Дж.-О.Ким, Ч.У.Мьюллер, У.Р.Клекка и др. – М.: Финансы и статистика, 1989. – 215 с.
2. Мамчич Т.І. Статистичний аналіз даних з пакетом STATISTICA. Навчально-методичний посібник / Т.І.Мамчич, Ф.Я.Оленко, М.М.Осипчук, В.Т.Шпортюк. – Дрогобич: Відродження, 2006.– 208 с., з іл.

Стаття надійшла до редакційної колегії 13.10.2011 р.

*Рекомендовано до друку д.т.н., професором **Мойсишиним В.М.***

RESEARCH OF COMMUNICATION BETWEEN ACADEMIC PROGRESS OF STUDENTS IFNTOUNG AND RESULTS OF INTRODUCTORY CAMPAIGN OF 2010

I. M. Gural¹, M. M. Osypchouc², L. R. Smolovyc¹

*¹Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas;
76019, Ivano-Frankivs'k, Carpathians st.15;
ph. +380 (3422) 4-21-23; e-mail: math@nung.edu.ua*

*²PreCarpathians National University by Vasyl Stefanyk;
76000, Ivano-Frankivs'k, Shevchenko, 15; e-mail: mysyp@ukr.net*

The statistical analysis of communications is conducted between the results of external independent evaluation middle to the mark of document about complete universal secondary education and indexes of academic progress of students in Ivano-Frankivs'k National Technical University of Oil and Gas.

Key words: *external independent evaluation, progress, correlation, cluster analysis, discriminate analysis.*

ВІДОМОСТІ ПРО АВТОРІВ

Бандура Андрій Іванович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Білий Орест Левкович – старший науковий співробітник відділу фізичних основ руйнування та міцності матеріалів Фізико-механічного інституту імені Г.В. Карпенка Національної академії наук України (м. Львів).

Бойко Василь Степанович – доктор технічних наук, професор кафедри розробки та експлуатації нафтових і газових родовищ Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Веклин Тарас Сергійович – студент групи ВНГ-07-1 Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Возняк Лідія Володимирівна – кандидат технічних наук, доцент кафедри нафтогазової гідромеханіки Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Возняк Мирослав Петрович – кандидат технічних наук, доцент кафедри транспортування та зберігання нафти і газу Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Галушак Мар'ян Олексійович – доктор фізико-математичних наук, професор, проректор з науково-педагогічної роботи та завідувач кафедри загальної та прикладної фізики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Гураль Інеса Михайлівна – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Гургула Галина Ярославівна – кандидат хімічних наук, асистент кафедри фізики і хімії твердого тіла Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Гургула Степан Іванович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Дмитрах Ігор Миколайович – доктор технічних наук, професор, завідувач відділу фізичних основ руйнування та міцності матеріалів Фізико-механічного інституту імені Г.В. Карпенка Національної академії наук України (м. Львів), член-кореспондент НАН України.

Ісарюк І. М. – здобувач кафедри диференціальних рівнянь Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

Колодій Богдан – працівник Фізико-механічного інституту імені Г.В. Карпенка Національної академії наук України (м. Львів).

Краснодембський Адам Михайлович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Кривенко Галина Мирославівна – кандидат технічних наук, доцент кафедри безпеки життєдіяльності Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Криницький Олександр Степанович – аспірант кафедри загальної та прикладної фізики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Криштопа Людмила Іванівна – кандидат технічних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Криштопа Святослав Ігорович – кандидат технічних наук, доцент кафедри нафтогазового технологічного транспорту і теплотехніки Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Лещак Ростислав Любомирович – молодший науковий співробітник відділу фізичних основ руйнування та міцності матеріалів Фізико-механічного інституту імені Г.В. Карпенка Національної академії наук України (м. Львів).

Лисюк Юрій Володимирович – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Лоп'янюк Михайло Антонович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики і хімії твердого тіла Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Лучко Володимир Миколайович – кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри диференціальних рівнянь Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

Матвієнко Роман Михайлович – асистент кафедри комп'ютерних технологій в системах управління та автоматики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Матійчук Михайло Іванович – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри диференціальних рівнянь Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

Мельник Петро Іванович – доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри будівництва Івано-Франківського університету права імені Короля Данила Галицького.

Міщук Богдан Михайлович – аспірант кафедри розробки та експлуатації нафтових і газових родовищ Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Мойсишин Василь Михайлович – доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Осипчук Михайло Михайлович – кандидат фізико-математичних наук, доцент, завідувач кафедри статистики і вищої математики Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Парашук Т. О. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Пукальський Іван Дмитрович – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри диференціальних рівнянь Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

Ріпецький Роман Йосипович – кандидат технічних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Савчук Ярослав Іванович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Сав'юк Лариса Олександрівна – кандидат технічних наук, доцент, директор центру дистанційного навчання Галицької академії (м. Івано-Франківськ).

Сеничак Василь Михайлович – кандидат технічних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Сєрова Марія Михайлівна – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри вищої математики Полтавського національного технічного університету імені Юрія Кондратюка.

Серов Микола Іванович – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри вищої математики Полтавського національного технічного університету імені Юрія Кондратюка.

Смоловик Ліана Романівна – кандидат технічних наук, доцент кафедри вищої математики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Собкович Роман Іванович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри алгебри та геометрії Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Соколов Олександр Леонідович – провідний фахівець Навчально-дослідного центру напівпровідникового матеріалознавства Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Ткачук Андрій Іванович – аспірант кафедри загальної та прикладної фізики Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Туровська Лілія Володимирівна – аспірант фізики і хімії твердого тіла Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Федак Іван Васильович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри математичного і функціонального аналізу Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Фреїк Дмитро Михайлович – доктор хімічних наук, професор, директор фізико-хімічного інституту, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Фреїк Наталія Дмитрівна – студентка інституту природничих наук Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Чобанюк Володимир Михайлович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики і хімії твердого тіла, проректор з навчальної роботи Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Юрчишин Ігор Констянтинович – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

ВИМОГИ ДО ОФОРМЛЕННЯ СТАТЕЙ

При підготовці рукописів статей, які подаються в редакцію “Прикарпатського вісника НТШ” слід дотримуватись таких правил:

1. Стаття повинна містити короткий вступ, формулювання завдань (проблем) та виклад отриманих автором (співавторами) нових результатів. Не допускається переказ відомих фактів, наведення посилань на неопубліковані роботи.

2. В редакцію подаються:

- два примірники рукопису статті (включаючи ілюстрації і таблиці), надруковані на білому папері формату А4;
- рецензію на статтю;
- електронний варіант статті, підготовлений на комп’ютері, у вигляді не архівованого або не архівованого (ZIP, RAR) файлу – CDR/RW.

3. Мова статті повинна бути українською або англійською. Обсяг не повинен перевищувати 20 сторінок.

4. Статтю слід оформити так: УДК, назва роботи; прізвище та ініціали автора (співавторів), місце праці (назва організації, повна поштова адреса, контактний телефон, електронна пошта), текст анотації, ключові слова, текст статті, список літератури.

Якщо мова статті українська (англійська), то після статті усі перераховані елементи від назви роботи до ключових слів включно подаються англійською (українською) мовою.

5. Формули, які нумеруються, обов’язково слід подавати окремим рядком. Нумерувати тільки ті формули, на які є посилання.

6. Використана література подається загальним списком (за алфавітом або у порядку посилань на джерела в тексті статті) та оформляється згідно з вимогами ВАК України (бюлетень №3, 2008 р.). Іноземна література пишеться мовою оригіналу. Посилання на відповідні джерела подаються в тексті у квадратних дужках, наприклад [4]. Зразки бібліографічного опису книги, статті, тез доповідей конференцій:

1. Боголюбов Н.Н. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний / Н.Н.Боголюбов, Ю.А.Митропольский. – М.: Наука, 1974. – 504 с.
2. Кондрат Р.М. Підвищення газонафтоконденсатовіддачі родовищ / Р.М.Кондрат // Нафтова і газова промисловість. – 1992. – №2. – С. 35-38.
3. Бойко В.С. Проводка горизонтальних і похилих свердловин як метод ефективного освоєння і розробки покладу / В.С.Бойко, Р.В.Бойко // Стан, проблеми і перспективи розвитку нафтогазового комплексу Західного регіону України: Тези доповідей і повідомлень наук.-практ. конф. (Львів, 28-30 березня 1995 р.). – Львів, 1995. – С. 150.

7. Рукопис підписується автором (співавторами).

8. На окремому аркуші слід вказати прізвище, ім’я та по-батькові автора (співавторів), науковий ступінь, вчене звання, займану посаду (у кінці кожного випуску журналу формуємо відомості про авторів).

**Електронний варіант статті
повинен задовольняти таким вимогам:**

1. Стаття набирається у редакторі Microsoft WORD 95/7.0-97 на аркуші формату B5 182x257 мм, поля (мм): верхнє – 20, нижнє – 10, внутрішнє – 30, зовнішнє – 20.
2. **Основний текст** набирається таким чином:
 - 2.1. Стил "обычный", гарнітура Times New Roman (Cyr), кегль 12, абзацний відступ – 0,75 мм, міжстроковий інтервал – "одинарний".
 - 2.2. Порядок набору:

УДК (Times New Roman (Cyr), кегль 12, без абзацного відступу, вирівнювання – зліва).

Назва **статті** (Times New Roman (Cyr), кегль 12, bold, прописом, без абзацного відступу, вирівнювання – по центру, відбивки зверху і знизу – 9 пт).

Ініціали, прізвище автора (співавторів) (Arial (Cyr), кегль 12, bold, без абзацного відступу, вирівнювання – по центру).

Назва організації, її повна поштова адреса, адреса електронної пошти (Times New Roman (Cyr), кегль 12, italic, без абзацного відступу, вирівнювання – по центру, відбивка знизу – 9 пт).
 - 2.3. Відбивки по тексту не використовуються за винятком підрозділів статті (підрозділи, підпункти і т. п. відділяються відбивками "перед" – 9, "після" – 6).
3. Для набирання **формул** використовується вбудований у Microsoft Office редактор формул Equation v. 3.0. **Стили:** **Text** - Times New Roman (Cyr), **Function** – Times New Roman (Cyr), italic, **Variable** – Times New Roman (Cyr), italic, **L.C.Greek** – Symbol, italic, **Symbol** – Symbol, italic, **Matrix/Vector** – Times New Roman (Cyr), **Number** – Times New Roman (Cyr). **Розміри:** **Full** – **12**, **Subscript/Superscript** – **9**, **Sub-Subscript/Superscript** – **5**, **Symbol** – **14**, **Sub-Symbol** – **9**.

Для наочності рекомендується формули відділяти відбивками зверху і знизу – 6 пт.
4. **Таблиці** повинні бути складені лаконічно, зрозуміло і містити мінімальні відомості, необхідні для ілюстрування тексту статті
Назва таблиці: Times New Roman (Cyr), кегль 12, bold, без абзацного відступу, вирівнювання – по центру, відбивка зверху – 6 пт.
5. **Ілюстрації** до статей (схеми, графіки, діаграми) повинні бути виконані у растровому (векторному) форматах (BMP, TIF, PCX, JPG, GIF; CDR) і додаватися окремим файлом. Забороняється використовувати **графічний редактор MS WORD!!!** Ілюстрації типу фотографій повинні бути відскановані з роздільною здатністю не менше 400 dpi і/або додаватися в оригіналі.
Ілюстрації, перескановані з періодики, не приймаються!
Підписи до ілюстрацій: Times New Roman (Cyr), кегль 11-12, bold, без абзацного відступу, вирівнювання – по центру.
Написи на ілюстраціях виконуються гарнітурою Arial.