

ЗАБИВАНИЕ СВАИ В СУХОЙ ГРУНТ

Ватулина Е.А. – студент

Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Иногда при постройке дома или моста в грунт для создания будущего фундамента во многих местах предварительно забивают многометровые бетонные столбы (сваи) при этом они испытывают продольные затухающие колебания, и на каждый участок единичной массы действуют силы сухого трения μ .

Рассмотрим колебания сваи на примере продольных колебаний упругого стержня со свободными концами, получившего в начальный момент времени продольный импульс I в один из концов. На каждый участок стержня единичной массы действуют силы сухого трения, равные μ .

Решение краевой задачи для стержня со свободными концами, испытывающего воздействие сил сухого трения

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = \mu + a^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0;$$
$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad \frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = \psi(x), \quad 0 \leq x \leq l;$$

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial u(l, t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0,$$

получим методом Фурье. Здесь μ – сила трения-скольжения, действующая на каждый участок стержня единичной массы. Отметим, что эта сила направлена в сторону, противоположную скорости движения рассматриваемого участка стержня, когда силы трения-скольжения не превосходят силу упругости стержня; в противном случае эта сила равна силе трения-покоя.

Выполним замену:

$$v(x, t) = u(x, t) - \mu \frac{t^2}{2}.$$

Тогда исходная краевая задача может быть сформулирована в форме:

$$\frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0;$$
$$v(x, 0) = \varphi(x), \quad \frac{\partial v(x, 0)}{\partial t} = \psi(x), \quad 0 \leq x \leq l;$$
$$\frac{\partial v(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial v(l, t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0.$$

Частные решения этой задачи, не равные тождественно нулю, будем искать в виде произведения $v(x, t) = X(x)T(t)$. Подставим это представление в исходное волновое уравнение. Получим

$$X(x)T''(t) = a^2 X''(x)T(t),$$

Или

$$\frac{1}{a^2} \frac{T''(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda$$

Отсюда нетривиальное решение первого уравнения

$$X''(x) + \lambda X(x) = 0, \text{ удовлетворяющее граничным условиям}$$

$$X'(0) = X'(l) = 0, \text{ можно представить в виде:}$$

$$X(x) \equiv X_k(x) = \cos(\sqrt{\lambda}x)$$

При

$$\lambda \equiv \lambda_k = \left(\frac{k\pi}{l}\right)^2, \quad k = 0, 1, 2, \dots.$$

Общее решение второго уравнения $Y''(t) + \lambda a^2 Y(t) = 0$ при $\lambda \equiv \lambda_k$ имеет вид

$$Y(t) = a_k \cos\left(\frac{k\pi at}{l}\right) + b_k \sin\left(\frac{k\pi at}{l}\right),$$

где a_k и b_k – произвольные постоянные. Таким образом, решение исходной задачи представляет собой сходящийся ряд

$$u(x,t) = \frac{\mu t^2}{2} + \frac{1}{l} \int_0^l (\varphi(x) + t\psi(x)) dx + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos\left(\frac{k\pi at}{l}\right) + b_k \sin\left(\frac{k\pi at}{l}\right) - \mu \left(\frac{l}{k\pi a}\right)^2 \right) \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right)$$

Коэффициенты разложения

$$a_k = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right) dx, \quad k = 1, 2, \dots$$

$$b_k = \frac{2}{k\pi a} \int_0^l \psi(x) \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right) dx, \quad k = 1, 2, \dots$$

определяются начальными условиями, которые запишем в виде

$$\varphi(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq l;$$

$$\psi(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq l - \delta; \quad \psi(x) = -\frac{I}{\rho\delta}, \quad l - \delta \leq x \leq l.$$

Здесь, из определения импульса стержня единичной длины $p = \rho \frac{\partial u}{\partial t}$ имеем $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{p}{\rho}$.

В начальный момент времени $t=0$ импульсом I обладал участок стержня $l-\delta < x \leq l$ длиной $\delta \rightarrow 0$

$$\frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = \psi(x) = -\frac{I}{\rho\delta}, \quad l - \delta < x \leq l,$$

где знак минус указывает на направление распространения импульса, противоположное направлению оси x , в начальный момент времени.

После преобразований у нас получается

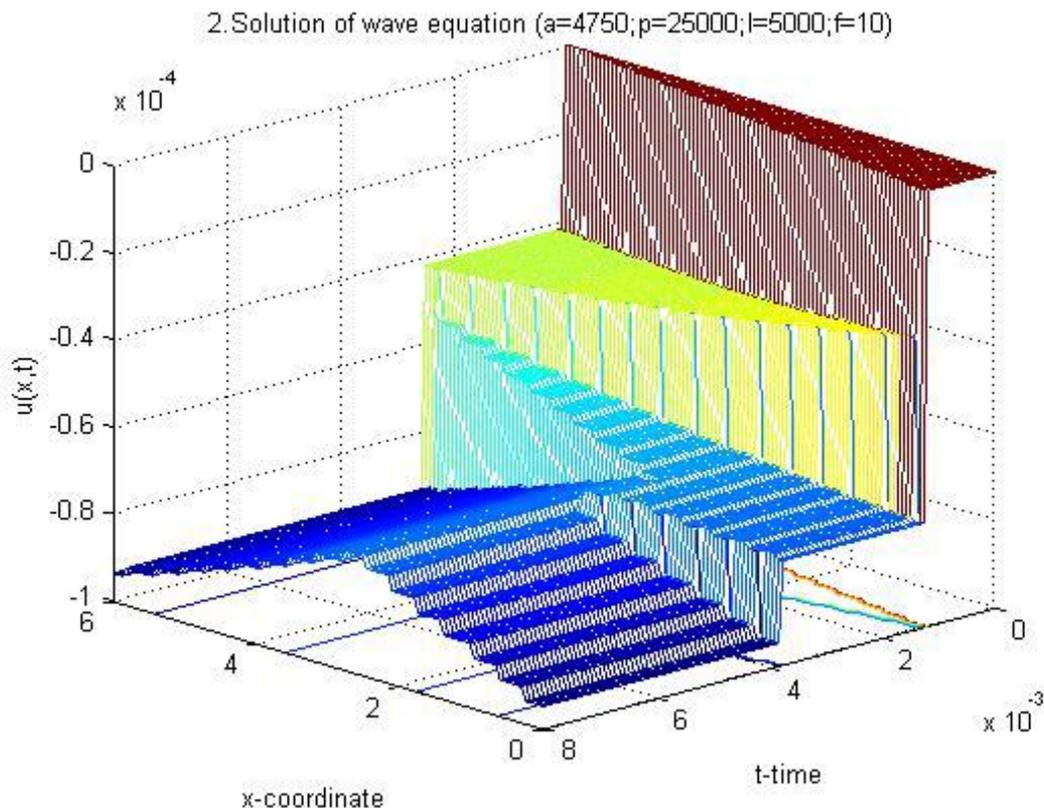
$$u(x,t) = \frac{\mu t^2}{2} - \frac{It}{\rho l} + \frac{I}{2a\rho} ((at - x - li) + (at + x - lj)).$$

Здесь $(at - x - li)$ – результат приведения выражения $(at-x)$ к виду, при котором выполняется условие $|at-x| \geq l$, путем вычитания из этого выражения значения l – длины стержня i раз; $(at + x - lj)$ – результат приведения выражения $(at+x)$ к виду, при котором выполняется условие $|at+x| \geq l$, путем вычитания из этого выражения значения l – длины стержня j раз. Таким образом, $|at - x - li| < l$, $|at + x - lj| < l$. Поскольку стержень может продвигаться при скоростях смещений, по направлению совпадающих с направлением импульса I (но никак не в противоположном направлении, что означало бы движение под действием силы трения), то записанное выше решение имеет смысл при условии:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \leq 0$$

В противном случае $u(x,t)$ сохраняет свое значение.

Рассмотрим график этой функции выполненной в системе MATLAB:



Форма свободных колебаний стержня зависит от того, какие из его собственных колебаний войдут в спектр, что определяется способом возбуждения. Под действием синусоидальной вынуждающей силы с частотой, совпадающей с одной из собственных частот стержня, наблюдается резонанс.

Практическое значение колебаний стержня разнообразно. Всякую балку в строительной конструкции можно рассматривать как стержень, от собственных частот которого зависит прочность сооружения, так же и сваи от них тоже зависит прочность зданий. Опасные колебания по длине, возникающие в кораблях из-за неуравновешенности двигателей, рассчитываются как колебания стержней. Стержень применяются в некоторых музыкальных инструментах, например ксилофонах; изогнутым стержень с двумя свободными концами является камертон.

СВЕТОДИОДЫ

Зюзина Ю.И. – студент

Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Конец 20-го века для светотехников ознаменовался очень крупным событием: впервые за 130 лет появился совершенно новый тип источников света - светоизлучающие диоды или просто светодиоды.

До этого времени существовало два принципиально различающихся типа источников света: тепловые, в которых свет получается за счёт нагрева излучающего тела до очень высокой температуры, и разрядные, в которых свет образуется при электрическом разряде в каком-либо газе или парах металлов. К первому типу относятся все лампы накаливания, в том числе и галогенные. Ко второму типу - люминесцентные, металлогалогенные, натриевые и многие другие лампы. Приблизительно за один век человечество прошло путь от лучинки до светодиодных ламп.

Необходимо отметить, что лампы накаливания, которые сыграли огромную роль в развитии человечества, но сегодня являются недопустимо устаревшим источником света. Их КПД очень низок и составляет порядка 6-10%.

С каждым годом все больше увеличиваются потребности человечества в электроэнергии. В результате анализа перспектив развития технологий освещения, наиболее прогрессивным направлением эксперты признали замену устаревших ламп накаливания энергосберегающими лампами. Причиной этого специалисты считают значительное превосходство последнего поколения энергосберегающих ламп над «жаркими» лампами.

Энергосберегающими лампами принято называть люминесцентные лампы, которые входят в обширную категорию газоразрядных источников света. Газоразрядные лампы в отличие от ламп накаливания излучают свет благодаря электрическому разряду, проходящему через газ, заполняющий пространство лампы: ультрафиолетовое свечение газового разряда преобразуется в видимый нам свет.

Но на смену газоразрядным лампам приходят совершенно новые источники – светодиоды.

Светодиод или светоизлучающий диод (СД, СИД, LED англ. Light-emitting diode) — полупроводниковый прибор, излучающий некогерентный свет при пропускании через него электрического тока.

Излучаемый свет лежит в узком диапазоне спектра, его цветовые характеристики зависят от химического состава, использованного в нем полупроводника.

Как и в любом полупроводниковом диоде, в светодиоде имеется p-n переход. При пропускании электрического тока в прямом направлении, носители заряда — электроны и дырки — рекомбинируют с излучением фотонов (из-за перехода электронов с одного энергетического уровня на другой).

Не всякие полупроводниковые материалы эффективно испускают свет при рекомбинации. Лучшие излучатели относятся к прямозонным полупроводникам (то есть таким, в которых разрешены прямые оптические переходы зона-зона), типа A^{III}B^V (например, GaAs или InP) и A^{II}B^{VI} (например, ZnSe или CdTe).

Варьируя состав полупроводников, можно создавать светодиоды для всевозможных длин волн ультрафиолета (GaN) до среднего инфракрасного диапазона (PbS). Диоды, сделанные из непрямозонных полупроводников (например, кремния, германия или карбида кремния), свет практически не излучают.

В последнее время большие надежды связываются с технологией квантовых точек и фотонных кристаллов.

Преимущества, которыми обладает светоизлучающий диод (СИД) по сравнению с традиционными лампами, позволяют с уверенностью утверждать, что появление новых типов осветительных приборов на основе СИД станет революционным технологическим прорывом в светотехнике.

В настоящее время в мире кристаллы светодиодов поставлены на массовое производство, и ежегодно общемировой прирост объемов их выпуска увеличивается на 30–40.

В настоящее время разработана целая серия осветительных приборов, в т.ч. идентичных по цоколю лампам накаливания мощностью от 40 до 100 Вт, с энергопотреблением 4–10 Вт. Значительно расширены сферы, в которых могут быть использованы приборы. Фактически речь идет о возможной замене существующих ламп накаливания и люминесцентных ламп светильниками на СИД.

Можно отметить основные преимущества ламп на светодиодах:

- низкое энергопотребление – в 10 раз ниже, чем у обычной лампы накаливания, и на 20–25% ниже, чем у энергосберегающей люминесцентной лампы;
- лампы на светодиодах не требуют особой системы утилизации, т.к. они, в отличие от люминесцентных ламп, экологически безвредны. Светодиод не представляет вреда для экологии, его размеры относительно малы;
- пожаро- и взрывобезопасность;
- полная цветовая гамма излучения;

- высокий КПД. Современные светодиоды немного уступают по этому параметру только натриевым газоразрядным лампам. Однако натриевые лампы непригодны для освещения жилых помещений из-за низкого качества света;

- высокая механическая прочность, вибростойкость (отсутствие нити накаливания и иных чувствительных составляющих);

- сверхдолгий срок работы – до 100 тыс. ч. Но и он не бесконечен — при длительной работе и/или плохом охлаждении происходит «отравление» кристалла и постепенное падение яркости;

- спектр современных люминофорных диодов аналогичен спектру люминесцентных ламп, которые давно используются в быту. Схожесть спектра обусловлена тем, что в этих светодиодах также используется люминофор, преобразующий ультрафиолетовое или синее излучение в видимое с хорошим спектром;

- малая инерционность;

- малый угол излучения — также может быть как достоинством, так и недостатком;

- безопасность — не требуются высокие напряжения;

- нечувствительность к низким и очень низким температурам. Однако, высокие температуры противопоказаны светодиоду, как и любым полупроводникам.

Недостатки ламп на светодиодах:

- основной недостаток — высокая цена. Отношение цена/люмен у сверхъярких светодиодов в 50 — 100 раз больше, чем у обычной лампы накаливания;

- низкая предельная температура. Мощные осветительные светодиоды требуют внешнего радиатора для охлаждения, потому что имеют неблагоприятное соотношение своих размеров к выделяемой тепловой мощности (они слишком мелкие) и не могут рассеять столько тепла, сколько выделяют (несмотря даже на более высокий КПД, чем у ламп накаливания);

- для питания светодиода от питающей сети необходим низковольтный источник питания постоянного тока, тоже с радиатором, что дополнительно увеличивает объём светильника, а его наличие дополнительно снижает общую надёжность и требует дополнительной защиты;

- высокий коэффициент пульсаций светового потока при питании напрямую от сети промышленной частоты без сглаживающего конденсатора, при его наличии пульсации малы;

- дешёвые массовые LED имеют светоотдачу 60-100 лм/Вт;

- спектр отличается от солнечного.

Инновационная светодиодная лампа - наиболее актуальный на сегодняшний день продукт новейших технологий, воплощенных в высококачественных, надежных электротехнических изделиях, которые прослужат долго. Использование светодиодных ламп позволит значительно сократить расходы на освещение, при этом не ухудшая его видимое качество и безопасность для здоровья человека и окружающей среды, а напротив – улучшая.

1. Сайт «Инженерные сети. ЖКХ», ссылка: [«http://www.promvest.info»](http://www.promvest.info)

2. Сайт «lightingnews», ссылка: [«http://lightingnews.info»](http://lightingnews.info)

3. Сайт «wikipedia», ссылка: [«http://ru.wikipedia.org»](http://ru.wikipedia.org)

4. Сайт «РадиоКот», ссылка: [«http://www.radiokot.ru»](http://www.radiokot.ru)

5. Сайт «Игра света», ссылка: [«http://www.igrasveta.ru»](http://www.igrasveta.ru)

6. Сайт «Караван», ссылка: [«http://caravan.hobby.ru»](http://caravan.hobby.ru)

ЗАБИВАНИЕ СВАИ В СЫРОЙ ГРУНТ

Зюзина Ю.И. – студент

Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

На практике при строительстве зданий, мостов и других конструкций применяются сваи. Сваи забивают в грунт, и зачастую, грунт бывает сырым, в силу различных погодных условий. Для расчета сил и нахождения колебаний при забивании сваи мы можем использовать упрощенную модель – колебания однородного стержня с незакрепленными концами.

Найти продольные колебания упругого стержня со свободными концами, получившего в начальный момент времени продольный импульс I в один из концов. На каждый участок стержня единичной массы действуют силы мокрого трения, равные μ .

Решение данной задачи можно свести к решению краевой задачи методом Фурье.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} &= \mu + a^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0; \\ u(x, 0) &= \varphi(x), \quad \frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = \psi(x), \quad 0 \leq x \leq l; \\ \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} &= \frac{\partial u(l, t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0, \end{aligned}$$

Здесь μ – сила трения-скольжения, действующая на каждый участок стержня единичной массы. Отметим, что эта сила направлена в сторону, противоположную скорости движения рассматриваемого участка стержня, когда силы трения-скольжения не превосходят силу упругости стержня; в противном случае эта сила равна силе трения-покоя.

Полученное решение требует провести анализ, связанный с тем, что сила трения-скольжения направлена в сторону, противоположную скорости движения рассматриваемого участка стержня, когда эта сила не превосходит силы упругости стержня; в противном случае она равна силе трения-покоя. Для этого заметим, что ряд Фурье может быть просуммирован, если воспользоваться соотношениями:

$$\begin{aligned} 2 \sin\left(\frac{k\pi at}{l}\right) \cos\left(\frac{k\pi x}{l}\right) &= \sin\left(\frac{k\pi}{l}(at - x)\right) + \sin\left(\frac{k\pi}{l}(at + x)\right); \\ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \sin(ky) &= -\frac{y}{2}, \quad -\pi < y < \pi. \end{aligned}$$

С учетом этих соотношений запишем

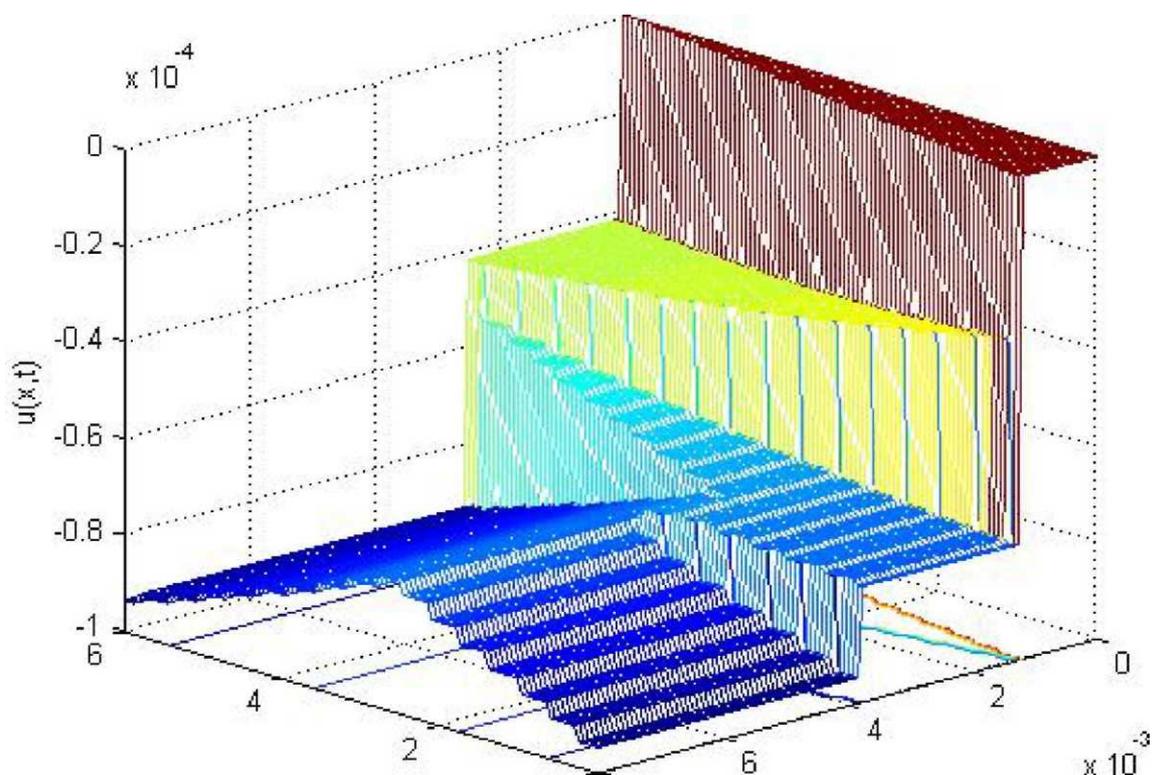
$$u(x, t) = \frac{\mu t^2}{2} - \frac{It}{\rho l} + \frac{I}{2a\rho} [(at - x - li) + (at + x - lj)].$$

Поскольку стержень может продвигаться при скоростях смещений, по направлению совпадающих с направлением импульса I (но никак не в противоположном направлении, что означало бы движение под действием силы трения), то записанное выше решение имеет смысл при условии:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \leq 0.$$

В противном случае $u(x, t)$ сохраняет свое значение.

Для наглядности, построим график этой функции. Вычисления выполним в системе MATLAB.



ПОЗИЦИЯ СОВРЕМЕННОЙ ФИЗИКИ ОТНОСИТЕЛЬНО «ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ВОДЫ»

Красников И.А. – студент

Алтайский государственный технический университет (г.Барнаул)

В последние годы стал проявляться огромный интерес к свойствам воды. Это вызвано многочисленными публикациями и фильмами о эффекте «памяти воды». Целью данной работы является анализ литературы о свойствах воды, научное обоснование и определения позиции современной физики относительно данного вопроса.

Благодаря своим уникальным свойствам, вода имеет фундаментальное значение для жизни и играет важную роль во многих биологических и химических процессах. [3]

Интенсивное изучение свойств воды привело исследователей к необходимости разработки модели воды на молекулярном уровне. Межмолекулярные взаимодействия имеют фундаментальное значение для понимания того, как атомы и молекулы организованы в жидкостях и твердых телах.

Большое число теоретических работ посвящено построению потенциалов взаимодействия между молекулами воды и расчету структур водных ассоциатов. Необходимость понимания структурных особенностей воды на молекулярном уровне очевидна в настоящее время, однако сложность межмолекулярного потенциала, достаточного для описания топологии сетки водородных связей, является причиной непрекращающихся попыток создания все новых и новых моделей воды. К настоящему времени предложено большое количество модельных потенциалов. Для моделирования молекулярных систем наиболее широко применяются парные потенциалы взаимодействия типа потенциала Леннарда-Джонса. Эти потенциалы позволяют правильно описывать большинство физических явлений. [2]

Появление компьютерного моделирования позволило изучать движение частиц в модельной системе на молекулярном уровне и оценивать вклады от различных взаимодействий в термодинамические и кинетические характеристики системы. Таким образом, появилась возможность рассчитывать структурные и динамические параметры, с помощью которых могут быть объяснены результаты прямого эксперимента. В связи с этим

компьютерное моделирование оказывается важным для корректной интерпретации экспериментальных результатов, проверки адекватности существующих межмолекулярных и внутримолекулярных потенциалов взаимодействия, получения информации о процессах, происходящих в воде на микроструктурном уровне.

Однако, вопрос о динамике и устойчивости тех или иных структурных изомеров кластеров воды остается открытым.

Проблема структурированного состояния воды, к которой не удавалось подступиться многие годы, получила серьёзное развитие в виде доказательства существования водных агрегатов. [6] Благодаря наличию водородных связей каждая молекула воды образует водородную связь с 4-мя соседними молекулами, образуя ажурный сетчатый каркас в молекуле льда. Однако, в жидком состоянии вода – неупорядоченная жидкость; эти водородные связи - спонтанные, короткоживущие, быстро рвутся и образуются вновь. Всё это приводит к неоднородности в структуре воды. Уменьшение плотности в процессе кристаллизации говорит о наличии внутри воды пустот. [4]

В ходе исследований удалось показать, что вода состоит из большого числа структурных элементов. Под действием водородных связей молекулы воды способны объединяться в особые структуры называемые кластерами. Существование кластеров позволило выдвинуть гипотезу о существовании эффекта «памяти» у воды. Это сразу же получило развитие в нетрадиционной медицине - гомеопатии, которая делает основной упор на особое структурированное состояние воды, способное хранить некоторую информацию. Согласно этим взглядам принимаемая вода, способна изменить структуру водной среды, находящейся в теле человека.

Однако, до сих пор не кому не удалось экспериментально подтвердить существование «памяти» водной среды. В связи с этим стал вопрос о целесообразности данных высказываний.

Современная физика смогла доказать существование водных ассоциатов. Модель воды давно стала предметом углубленного исследования. На протяжении многих лет выдвигались различные гипотезы, которые сначала подтверждались, а затем опровергались. Для того, чтобы более детально изучить структуру воды во второй половине XX века возникли две группы моделей.

Согласно первой модели, вода представляла в виде кластеров из молекул, связанных водородными связями, которые плавали в море молекул, в таких связях не участвующих.

Вторая модель рассматривала воду как непрерывную сетку водородных связей, которая содержит пустоты. Данная модель позволяла объяснять все свойства воды, в том числе и те, которые можно отнести к аномальным.

В результате долгих исследований был сделан вывод о том, что кластерная и клатратная модели дополняют друг друга. [5]

Было показано, что в жидкой воде присутствуют квази-полимерные структуры. Таким образом, все исследуемые модели постулировали о том, что молекулы воды способны объединяться с образованием квази-полимеров. Но полимер – это молекула, все атомы которой объединены ковалентными связями, а не водородными. Однако было экспериментально установлено, что водородная связь между молекулами воды во льду имеет частично ковалентный характер. Следовательно, даже частично ковалентный характер водородной связи способствует объединению в ассоциаты. По мнению сторонников «памяти» воды именно в этих ассоциатах и хранится информация, запечатлеваемая водой.

Основная проблема в развитии модели структурированной воды заключается в ничтожно малом времени жизни водородных связей. Структура и динамические свойства воды определяются, главным образом, водородными связями. С помощью компьютерного моделирования в работе [1] было показано, что среднее время существования водородных связей между определёнными молекулами составляет порядка 1 пс.

Это свидетельствует о том, что «информация», которая могла бы храниться в кластерах, может существовать в течение незначительного времени, порядка пикосекунд.

Подводя итог, можно сделать вывод о том, что применение часто используемого в последнее время в ненаучных кругах термина «эффекта памяти воды» нецелесообразно и не имеет научного обоснования. На сегодняшний день, экспериментальным путём не было продемонстрировано существование эффекта «памяти» воды.

Список использованных источников

Ведь О.В. Среднее время жизни водородных связей в воде и метаноле по результатам компьютерного моделирования./ О.В. Ведь, Н.А. Абакумова, 2008.

Бызов А.П. Потенциалы взаимодействия частиц с вращательными степенями свободы./ А.П. Бызов, Е.А. Иванова, 2007.

Карговский А. В. Ангармонические колебательные резонансы в малых водных ассоциатах./ А. В. Карговский, 2009.

4. Структура воды [Электронный ресурс].- Электрон. текст. дан.- Режим доступа: http://www.o8ode.ru/article/water/ctrukтура_vody.htm -Загл. с экрана.

5. Современная модель воды [Электронный ресурс].- Электрон. текст. дан.- Режим доступа: www.o8ode.ru/article/water/ -Загл. с экрана.

6. Зенин С.В. структурированное состояние воды как основа управления поведением и безопасностью живых систем./ С.В. Зенин, 1999.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ АТОМА ВОДОРОДА В КРИСТАЛЛАХ ГЦК МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Н.А. Кулабухова - аспирантка, Г.М. Полетаев – д.ф.-м.н., профессор
Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Методом молекулярной динамики рассчитаны характеристики надбарьерной диффузии (энергия активации и предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса) водорода в ГЦК металлах Pd, Ag, Al. Показано, что ведущий механизм надбарьерной диффузии водорода в ГЦК металлах заключается в последовательном пересечении октаэдрических и тетраэдрических пор.

В настоящее время водородная тематика вызывает большой интерес, поскольку имеется много технических задач, для решения которых необходимо всестороннее изучение свойств систем металл-водород. Например, к актуальным задачам относят проблему водородной коррозии металлических конструкций оборудования газонефтяного комплекса [1]. Не менее важной задачей является защита от водородного охрупчивания охлаждающих элементов и тепловыделяющих сборок ядерных реакторов, а также емкостей для хранения ядерного топлива [1]. Данные о свойствах систем металл-водород и способы неразрушающего контроля позволят оценить время безопасной эксплуатации и провести раннюю диагностику опасной стадии разрушения металлических конструкций. Количество водорода, скорость его миграции, диффузионные характеристики водорода могут оказаться определяющими факторами в изменении физико-механических свойств металлических конструкций.

Известно, что отличительными особенностями диффузии водорода в металлах, по сравнению с другими более тяжелыми атомами внедрения, являются исключительно малая энергия активации и квантовый характер диффузии при низких температурах, проявляющийся в чистых кристаллах вплоть до комнатной температуры [2, 3]. С ростом температуры и несовершенства кристаллической решетки металла вклад подбарьерной диффузии резко уменьшается, и в основном реализуются классические надбарьерные механизмы. Этот факт позволяет исследовать диффузию легких внедренных атомов классическим методом молекулярной динамики при достаточно высоких температурах.

Настоящая работа посвящена расчету диффузионных характеристик (энергии активации, предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса) надбарьерной диффузии атома

водорода в ГЦК металлах Pd, Ag, Al и исследованию механизма диффузии водорода методом молекулярной динамики.

В качестве метода моделирования использовался метод молекулярной динамики. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери-Розато [5]. Потенциальная энергия i -го атома в этом случае находится с помощью выражения

$$U_i = \sum_j A \exp\left(-p\left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1\right)\right) - \sqrt{\sum_j \xi^2 \exp\left(-2q\left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1\right)\right)}. \quad (1)$$

Здесь A , p , q , ξ , r_0 – параметры потенциала; r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами. Параметры потенциалов Клери-Розато были взяты из работы [5].

Для описания взаимодействия атомов водорода друг с другом и с атомами металла использовались парные потенциалы Морза:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2). \quad (2)$$

Параметры потенциалов α , β , D для взаимодействий в системах Pd-H и Ag-H были взяты из работы [4], а для системы Al-H – рассчитаны с использованием данных, приведенных в работе [6].

Энергию активации миграции точечного дефекта в молекулярно-динамической модели можно найти двумя методами: статическим и динамическим [7]. Динамический метод позволяет также определить и предэкспоненциальный множитель в соответствующем уравнении Аррениуса. При этом он пропорционален концентрации дефектов.

На рис.1 изображены возможные пути миграции атома водорода из одной октаэдрической поры в другую. При переходе между октаэдрическими порами по прямой траектории (траектория 1), имеется относительно высокий энергетический барьер – в точке на траектории между двумя атомами металла вдоль направления типа $\langle 110 \rangle$. Меньший энергетический барьер, характерен для траектории 2 – миграции атома водорода через центр треугольника, но тогда длина траектории выше, чем в первом случае.

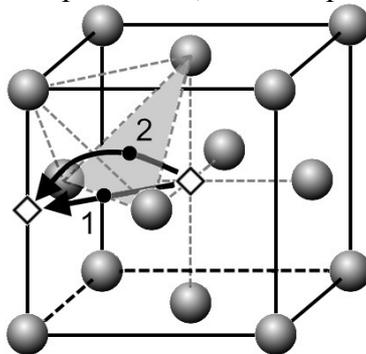


Рис.1. Две возможные траектории миграции атома водорода из одной октаэдрической поры в соседнюю: 1 – по прямой вдоль направления $\langle 110 \rangle$, 2 – через тетраэдрическую пору. Положение октаэдрических пор показано ромбами. Точки на траекториях – позиции атома водорода, в которых он имеет максимальную потенциальную энергию в процессе миграции.

Для траекторий 1 и 2 статическим методом были рассчитаны энергии миграции. Энергия активации миграции рассчитывалась как разность энергий расчетного блока кристалла, содержащего атом водорода в первоначальном положении (в той или иной поре) и в позиции «перевальной» точки (между атомами вдоль направления $\langle 110 \rangle$ или в центре треугольника в плоскости (111)).

Таблица 1. Энергия миграции водорода в Pd, Ag, Al по различным траекториям, рассчитанная статическим методом, эВ.

Металл	окт. → окт.	окт. → тет.	тет. → окт.
Pd	0,29	0,18	0,01
Ag	0,09	0,05	0
Al	0,16	0,12	0,02

Из таблицы видно, что переход из тетраэдрической поры в октаэдрическую почти не требует энергетических затрат. Можно предположить, что водород преимущественно диффундирует в рассматриваемых металлах по 2 пути.

Таблица 2. Энергия миграции и предэкспоненциальный множитель для диффузии водорода в Pd, Ag, Al, найденные с помощью динамического метода.

Металлы	E_H^m , эВ	$D_0 \cdot 10^{-7}$, м ² /с
Pd	0,19	4,6
Ag	0,06	4,1
Al	0,08	8,1

Концентрация водорода в металле, естественно, может быть разной, но чтобы имелась возможность сравнить полученные данные с данными экспериментальных работ, при расчете предэкспоненциального множителя концентрация водорода бралась как в работах [11-13]: для Pd – 0,5% [9-12], для Ag – 0,07% [12], для Al – 0,6% [10, 12, 13].

Больше всего в литературе сведений о системе Pd-H. Энергия активации диффузии водорода в Pd при концентрации порядка 0,5%, согласно экспериментальным работам [9-12], лежит в диапазоне 0,22–0,39 эВ; предэкспоненциальный множитель – в диапазоне $2 \cdot 10^{-7}$ – $8 \cdot 10^{-7}$ м²/с. Полученные в настоящей работе значения хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Для Al, согласно [13], предэкспоненциальный множитель лежит в диапазоне $6 \cdot 10^{-7}$ – $12 \cdot 10^{-7}$ м²/с. Найденное в настоящей работе значение $8,1 \cdot 10^{-7}$ м²/с лежит в этом диапазоне. В работе [10] для температуры 300 К приведен коэффициент диффузии водорода в алюминии – $D=1,1 \cdot 10^{-15}$ м²/с. Это значение хорошо сходится с полученным в настоящей работе $D=1,4 \cdot 10^{-15}$ м²/с.

Для выяснения ведущего механизма диффузии водорода в рассматриваемых металлах использовался визуализатор траектории миграции. Наиболее информативными являются проекции траектории атома водорода на плоскости (110) и (100): в этом случае позиции водорода в октаэдрической и тетраэдрической порах легко различимы (рис.3. Pd (а,б) и Ag (в,г)).

Pd и Ag сильно отличаются растворимостью водорода: Это отличие хорошо заметно на приведенных траекториях миграции водорода: в Pd водород часто задерживался в октаэдрических порах – на рис.3 (а,б) это заметно по характерным «клубкам» на траекториях. Основным механизмом диффузии водорода в Pd являлся механизм, заключающийся в последовательном пересечении октаэдрических и тетраэдрических пор (т.е. траектория 2 на рис.1), причем в тетраэдрических порах водород, как правило, не задерживался. С ростом температуры задержки в октаэдрических порах происходили реже, все больше наблюдались прямолинейные участки траекторий.

В Ag энергия абсорбции существенно выше, чем в Pd, причем разность энергий абсорбции в октаэдрической и тетраэдрической порах невелика – 0,06 эВ, когда как в Pd эта разность составляет 0,16 эВ. В связи с этим траектории водорода в Ag (рис.3 в,г) имеют существенно меньше задержек водорода в октаэдрических порах и имеют участки, свидетельствующие о миграции водорода только по тетраэдрическим порам без пересечения октаэдрических.

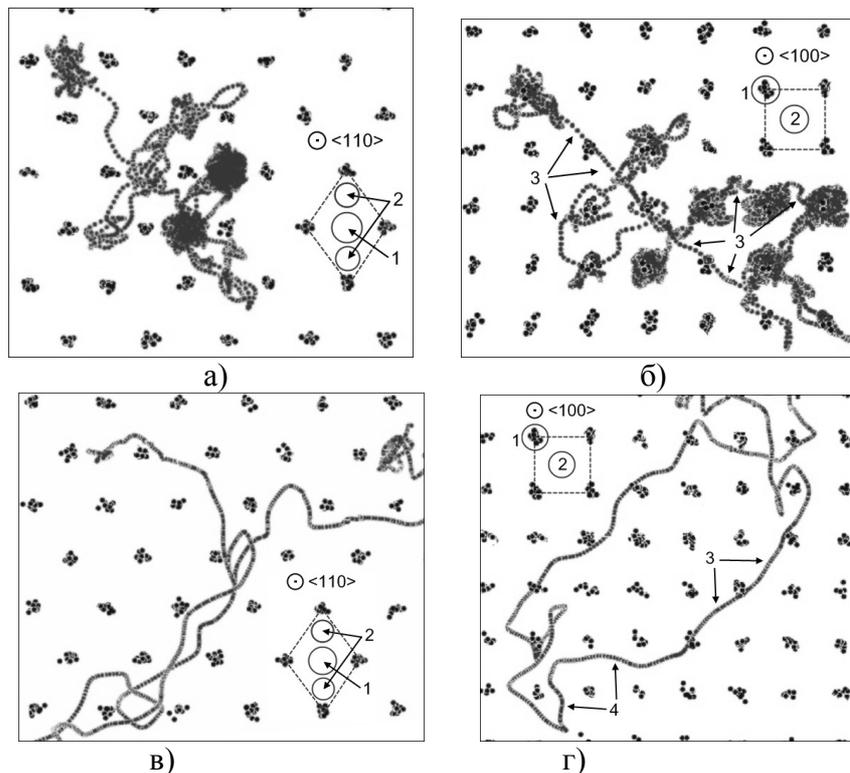


Рис.3. Траектории миграции атома водорода в Pd (а,б) и Ag (в,г) в проекциях на плоскость (110) (а,в) и (100) (б,г). 1 – позиция октаэдрической поры, 2 – позиция тетраэдрической поры, 3 – миграция водорода с попеременным пересечением октаэдрических и тетраэдрических пор, 4 – миграция водорода только через тетраэдрические поры. Траектории получены при температуре 350 К.

Таким образом, ведущий механизм надбарьерной диффузии водорода в ГЦК металлах, согласно результатам, полученным методом молекулярной динамики, заключается в последовательном пересечении октаэдрических и тетраэдрических пор. При этом, чем выше температура, тем реже атом водорода в процессе миграции задерживается в октаэдрических порах. В тетраэдрических порах он не задерживается почти никогда. В металлах, для которых энергии водорода в октаэдрической и тетраэдрической порах отличаются не сильно (например, Ag), помимо указанного механизма, миграция водорода может осуществляться по тетраэдрическим порам без пересечения октаэдрических: энергия активации такого механизма ниже, чем при последовательном пересечении пор обоих типов.

С помощью молекулярной динамики в настоящей работе получены значения энергии активации и предэкспоненциального множителя надбарьерной диффузии водорода в металлах Pd, Ag, Al. Полученные данные хорошо согласуются с данными экспериментальных работ.

Список литературы:

1. Чернов И.П., Черданцев Ю.П., Никитенков Н.Н., Лидер А.М., Мартыненко Ю.В., Сурков А.С., Крёнинг М. Влияние водорода и гелия на свойства конструкционного материала реакторов // Известия РАН. Серия физическая. 2008. Т. 72. № 7. С. 1018-1020.
2. Взаимодействие водорода с металлами / Под. ред. Захарова А.П. М.: Наука, 1987. - 296 с.
3. Гапонцев А.В., Кондратьев В.В. Диффузия водорода в неупорядоченных металлах и сплавах // Успехи физических наук. 2003. Т.173, №10. С.1107-1129.
4. Kurokawa H., Nakayama T., Kobayashi Y., Suzuki K., Takahashi M., Takami S., Kubo M., Itoh N., Selvama P., Miyamoto A. Monte Carlo simulation of hydrogen absorption in palladium and palladium-silver alloys // Catalysis Today. 2003. V.82. P.233–240.

5. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. 1993. V.48, №1. P.22-33.
6. Zhou G., Zhou F., Zhao X., Zhang W., Chen N., Wan F., Chu W. Molecular dynamics simulation of hydrogen enhancing dislocation emission // *Science in China. Series E*. 1998. V.41, №2. P.176-181.
7. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Вклады различных механизмов самодиффузии в ГЦК-металлах в условиях равновесия // *Физика твердого тела*. 2010. Т.52, №6. С. 1075-1082.
8. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Определение энергии образования и миграции бивакансии в ГЦК металлах методом молекулярной динамики // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2010. Т.7, №4. С.104-107.
9. Kamakoti P., Sholl D.S. Density Functional Theory Studies of Hydrogen Diffusion in CuPd Alloys // *Fuel Chemistry Division Preprints*. 2002. V.47, №2. P.818-819.
10. Спивак Л.В., Скрябина Н.Е., Кац М.Я. Водород и механическое последствие в металлах и сплавах. Пермь: Изд-во ПГУ, 1993. - 344 с.
11. Flanagan T., Kishimoto S. *Electronic Structure and Properties of Hydrogen in Metals*. eds. P. Jena and C. Satterthwaite, Plenum Press, New York, 1983. 623 p.
12. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. Киев: Наукова думка, 1987. - 511 с.
13. А.М. Полянский, В.А. Полянский, Д.Б. Попов-Дюмин Применение метода высокотемпературной вакуум-экстракции водорода из металлических образцов для определения плотности дефектов структуры и энергии связи водорода в металлах / *International Scientific Journal for Alternative Energy and Ecology* №1(21) – 2005. – стр. 42-46.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АУДИТОРИЙ РАЗНЫХ ФОРМ ПО АКУСТИЧЕСКИМ ХАРАКТЕРИСТИКАМ

Штрошенко А.В. – студент

Алтайский государственный технический университет (г. Барнаул)

Все знают, насколько важно акустическое планирование помещения. Распространение звука в помещении значительно отличается от распространения в свободном пространстве. Это необходимо учитывать при строении помещений, которые предназначаются для выступлений людей. Мне стало интересно сравнить аудитории нашего университета с точки зрения именно акустики. В ходе выполнения работы, из всех типов аудиторий были выделены четыре, три из которых представлены в нашем университете.

Цель моей работы – изучить распространение звука в закрытом помещении и сравнить аудитории разных форм по оптимальности показателей, связанных с ним.

Звук – это энергия, переносимая звуковой волной.

Звуковые волны в закрытых помещениях, многократно отражаясь от поверхностей, образуют сложное поле колебательного движения частиц воздуха. Законы распределения колебательной скорости частиц воздуха, уровня звукового давления, направлений распространения акустической энергии в закрытых помещениях определяются не только характеристиками источника звука, но также и геометрическими размерами, формой помещения, способностью стен, пола и потолка поглощать акустическую энергию.

В данной работе я сравниваю несколько аудиторий (рис.1) по уровню звукового давления и времени реверберации.

Уровень звукового давления на расстоянии r от источника звука равен:

$$L_p = L_w + 10 \cdot \log \left(\frac{1}{4\pi r^2} + 4 \frac{1 - \alpha}{\alpha \cdot S} \right),$$

где L_w - уровень звуковой мощности точечного источника звука, дБ;

α - коэффициент звукопоглощения;

S – площадь поверхности, m^2 .

Первое слагаемое под знаком логарифма описывает уровень звукового давления в поле прямого звука, второе – уровень звукового давления в реверберирующем поле.

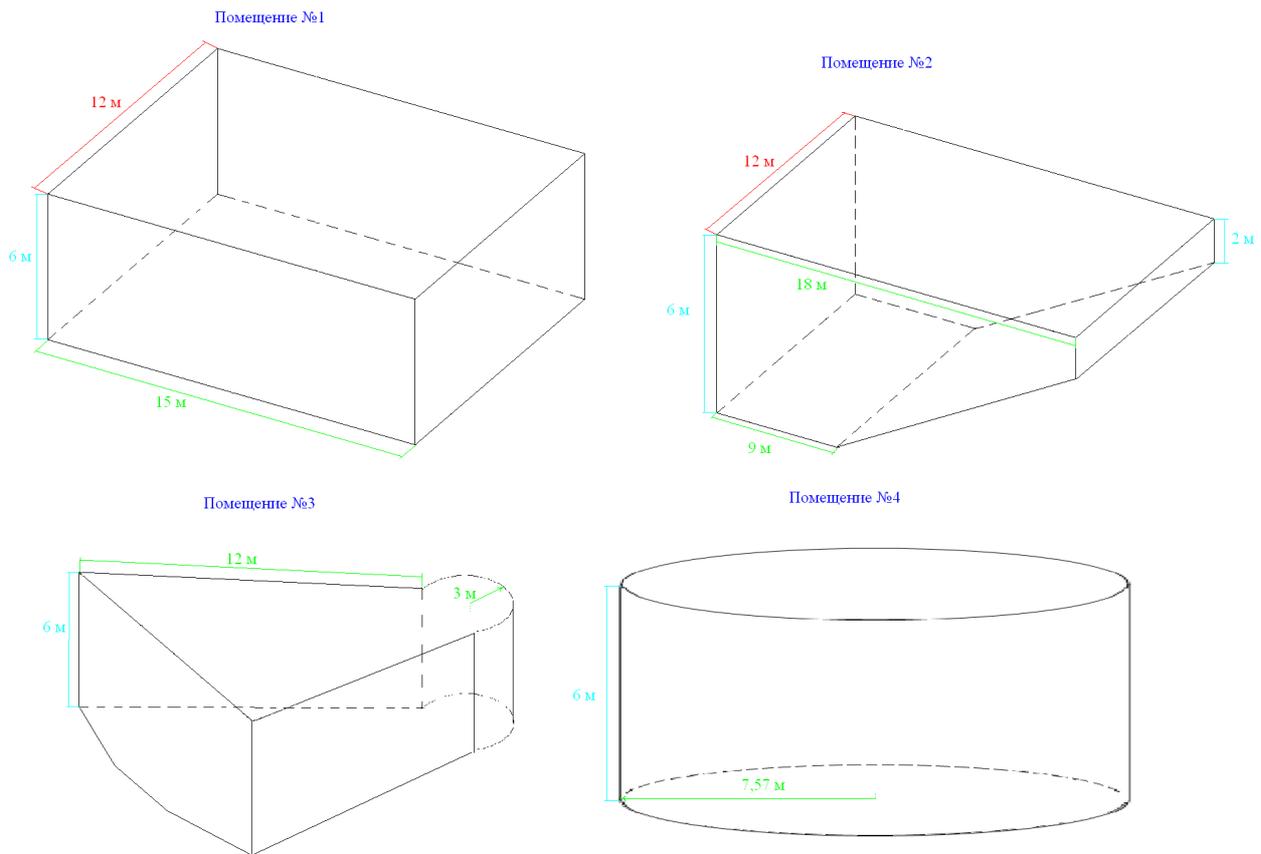


Рис.1. Формы помещений, рассматриваемые в работе.

Универсальной и удобной энергетической характеристикой звукового поля в закрытом помещении является плотность звуковой энергии ε . Она зависит не только от акустической мощности источника звука, но и от акустических свойств помещения. Именно эта величина используется для сравнения помещений при построении студий звукового и телевизионного вещания.

Если выразить интенсивность звука через плотность звуковой энергии, предполагая, что поле в помещении диффузное (т.е. звуковое поле изотропно и однородно), то мы получим среднюю интенсивность в помещении, которая будет равна:

$$I = \varepsilon(t) * c_{зв}, I = \frac{4 * P_i}{\alpha * S} \left(1 - \exp\left(-\frac{c_{зв} * \alpha * S}{4 * V}\right) \right),$$

где $c_{зв}$ - скорость распространения звука в воздухе,

P_i - интенсивность источника, Вт.

Для удобства, переведем полученное значение интенсивности в дБ.

Для этого воспользуемся формулой: $I_d = 10 \cdot \log\left(\frac{I}{I_0}\right)$,

где $I_0 = 10^{-12} \text{ Вт/м}^2$.

Время реверберации находим по формуле:

$$T = \frac{0.164 \cdot V}{\alpha \cdot S}$$

Для сравнения были проведены две серии опытов: сравнение по объему и по вместимости помещений.

При расчетах использовались следующие данные:

$$\alpha = 0,05, P_i = 10^{-6} \text{ Вт}, L_w = 70 \text{ дБ}, c_{зв} = 340 \frac{\text{м}}{\text{с}}.$$

В первой серии опытов объем помещения, равный $V=1080 \text{ м}^3$, является величиной постоянной.

Во второй серии опытов постоянно количество человек, которое вмещается в помещении $N=100$.

Для выполнения расчетов использовалась самостоятельно написанная программа.

Сравнивая помещения при одинаковом объеме, получили следующие результаты (таблица №1):

Таблица №1					
<i>№ помещения</i>		1	2	3	4
<i>Средняя интенсивность звука в помещении</i>		60,3756	60,2043	60,5852	60,5773
<i>Время реверберации</i>		5,17895	4,9337	5,50397	5,49116
<i>Интенсивность звука на расстоянии r от источника</i>		L=15	L=18	L=15	L=6
	r1=0,2L	60,7903	60,4919	61,0357	62,383
	r2=0,4L	60,5432	60,3095	60,8025	61,1936
	r3=0,6L	60,4958	60,2748	60,7579	60,9326
	r4=0,8L	60,4791	60,2626	60,7422	60,8374
	r5=L	60,4714	60,257	60,7349	60,7926

Таким образом, по интенсивности звука лучший показатель у помещения №3, по времени реверберации – у помещения №2.

Так как отличия по интенсивности звука у помещения №2 и №3 небольшие, а время реверберации оказывает наибольшее влияние на разборчивость речи и отличается значительно у этих помещений, то лучшим помещением я считаю помещение №2.

Сравнивая помещения при условии, что в них должно помещаться одинаковое число людей (100 человек), получили следующие результаты (таблица №2):

Таблица №2					
<i>№ помещения</i>		1	2	3	4
<i>Объем помещения</i>		1080	852	940	301,6
<i>Средняя интенсивность звука в помещении</i>		60,3756	60,7694	60,8386	64,901
<i>Время реверберации</i>		5,17895	4,34613	4,9776	3,93621

По интенсивности и времени реверберации, бесспорно, лидирует помещение №4. При этом оно имеет наименьший объем.

Следовательно, лучшим по акустическим свойствам я считаю помещение №4. Но из-за сложности его построения целесообразнее выбрать помещение №2, так как у него наименьшее из оставшихся время реверберации, что положительно сказывается на разборчивости речи в таком помещении.

Список использованной литературы:

Давыдов, В.В. Акустика помещений/ В.В. Давыдов.-1995.-95с.

Кнудсен, В.О. Архитектурная акустика/ В.О. Кнудсен.-2010.-520 с.

Беляев, С.В. Акустика помещений/С.В. Беляев.-2008.-82 с.

Акустика студий звукового и телевизионного вещания [Электронный ресурс].- Электрон. текст. дан.- М., 2009.- Режим доступа: http://www.audiostop.ru/articles/art_14.html - Загл. с экрана.