

МЕХАНИКА И ЭНЕРГЕТИКА

В Институте теоретической и прикладной механики проведено моделирование сворачивания InGaAs/GaAs нанотрубок на атомном уровне с помощью метода молекулярной динамики. Показано, что радиус нанотрубок при молекулярно-динамическом моделировании оказывается меньше, чем предсказывает континуальная теория упругости. Расхождение превышает 30 % для гетероструктур толщиной несколько монослоев. При увеличении толщины гетероструктуры различие между результатами молекулярной динамики и континуальной теории упругости исчезает. Основная причина данного расхождения заключается в том, что для тонких гетероструктур большая часть атомов находится на поверхности, т. е. энергия поверхностных атомов сравнима по величине с энергией атомов в объеме, что противоречит идее континуальных моделей. Предложен способ учета поверхностной энергии в модели континуальной теории упругости, который состоит в добавлении к плотности потенциальной энергии слагаемых, пропорциональных степени деформации свободных поверхностей. Показано, что расчет геометрических параметров нанотрубок, образующихся в результате сворачивания напряженных эпитаксиальных гетероструктур, может с достаточно высокой точностью выполняться в рамках теории упругости при условии учета поверхностной энергии (рис. 1).

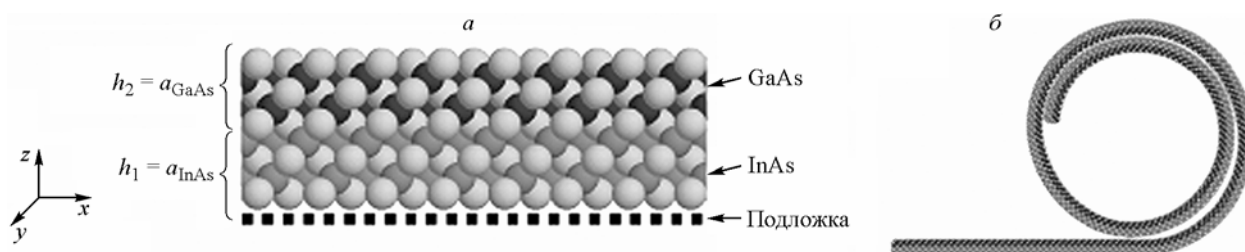


Рис. 1. Постановка задачи молекулярно-динамического моделирования (а) и конфигурация, возникающая в результате сворачивания напряженной гетероструктуры 2ML InAs + 2ML GaAs (б).

Молодыми сотрудниками Института теоретической и прикладной механики и Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева на основе математического моделирования и экспериментальных исследований изучены условия образования «холодного» слоя на границе порошок—монокристалл при осесимметричном взрывном нагружении с использованием различных материалов центрального стержня. Подтверждено, что решающую роль в образовании «холодного» пограничного слоя (ХПС) играет пластическое возмущение в виде бугра деформации, движущееся по монокристаллической преграде перед фронтом падающей ударной волны. В случае регулярного режима взаимодействия падающей ударной волны в порошке с границей центрального тела возникновения ХПС не происходит. Показано, что ширина фронта ударной волны в порошке влияет на структуру пограничной зоны только тогда, когда толщина последней сравнима с характерным размером частиц порошка.

Взрывные компакты, полученные в режиме нерегулярного отражения по осесимметричной схеме без центрального стержня, могут иметь однородную структуру. Однородный по структуре компакт можно получить, если скорость детонации заряда ВВ при взрывном компактировании порошкового материала не превышает D_{melt} , где D_{melt} — скорость плоской ударной волны, при которой за фронтом материал нагревается до температуры плавления (рис. 2).

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева в результате аналитического исследования найдены новые точные решения различных задач гидро- и газодинамики со свободными границами. Приведены точные решения задач о движении газа в полосе, растекании жидкого «хребта», пространственном течении идеальной жидкости в каналах сложной конфигурации, движении жидкости со свободной границей, порожденном системой источников и стоков. Дано полное описание безвихревых барохронных движений газа. Найдены условия обобщенной гиперболичности и получены скорости распространения возмущений для задач о течении газа в тонком слое, движениях двухслойной стратифицированной жидкости со свободной границей, завихренной жидкости в канале. Проанализирована задача о распаде произвольного разрыва для уравнений, описывающих в приближении длинных волн сдвиговые плоскопараллельные движения идеальной несжимаемой жидкости в канале на основе современного аппарата группового анализа дифференциальных уравнений, нелинейного функционального анализа, теории гиперболичности для систем интегрированных дифференциальных уравнений.

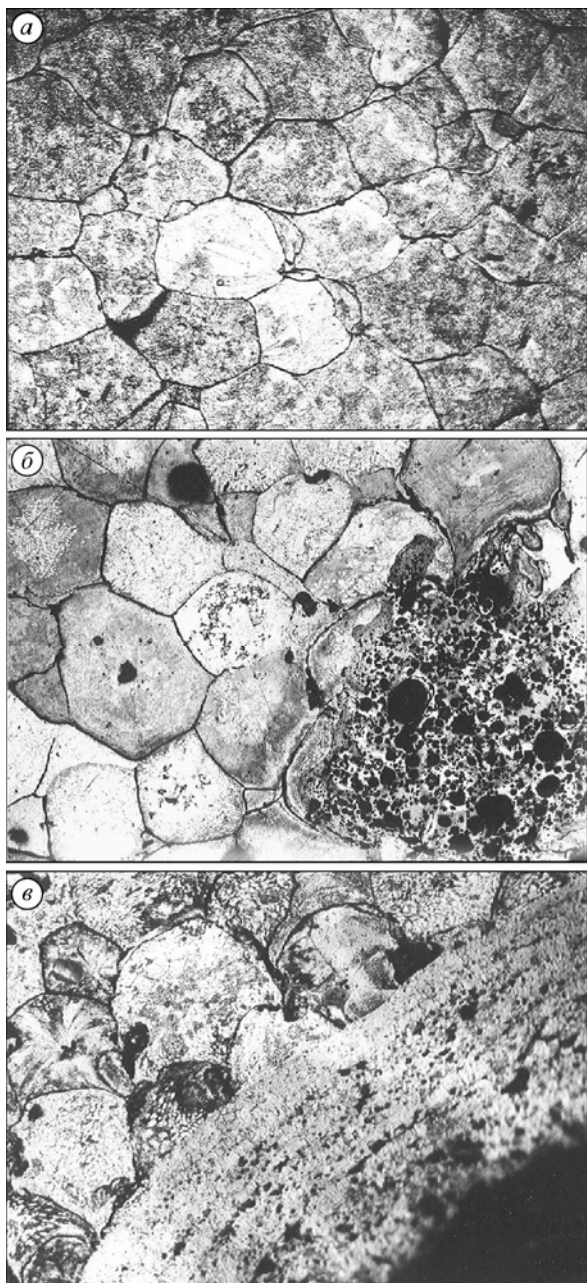


Рис. 2. Структуры поперечных сечений компактов вблизи оси ампулы при скорости детонации D , км/с: a — 2,75, b — 3,95, v — 5,26.

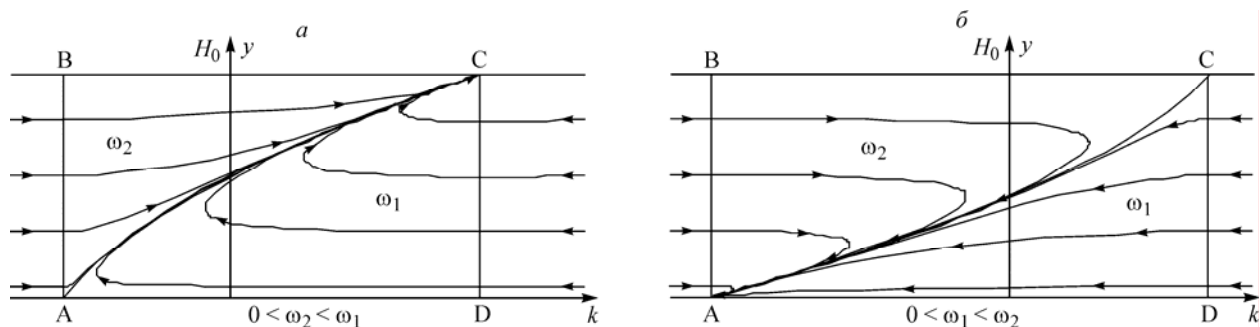


Рис. 3. Траектории движения частиц в автомодельной простой волне взаимодействия сдвиговых потоков.
 ω_1, ω_2 — постоянные завихренности потоков; H_0 — глубина канала; $k = x/t$ — автомодельная переменная.

На рис. 3 изображены линии тока (в автомодельных переменных) на точном решении в задаче о взаимодействии двух завихренных потоков жидкости в канале. По линиям АВ и CD, являющимся характеристиками, происходит непрерывное примыкание простой волны к заданным сдвиговым потокам. В области простой волны ABCD движение жидкости имеет существенно двумерный характер, что выражается в формировании струйного движения вдоль линии раздела потоков AC, направленного в зависимости от отношения завихренностей к верхней (рис. 3, *a*) или нижней (рис. 3, *б*) границе канала.

В Институте теплофизики в результате решения автомодельной задачи в подслое линейного касательного напряжения получены обобщенные пристеночные функции для турбулентных потоков с сильными положительными градиентами давлений, в которых помимо динамической скорости входит пристенный градиент сдвиговых напряжений Рейнольдса. Описана модифицированная k — ε -модель, где в уравнении переноса диссипации в областях с положительным пристенным градиентом турбулентной энергии появляются пропорциональные ему добавка к турбулентной вязкости и дополнительный источник. Расчет турбулентных пограничных слоев с положительным градиентом давления показал преимущества предложенной модели по сравнению со стандартной.

Предложены модифицированная модель переноса рейнольдсовых напряжений и обобщенные пристеночные функции, пригодные для расчета турбулентных потоков с сильными положительными градиентами давлений. Сравнение расчетов турбулентного пограничного слоя с сильным положительным градиентом давления по предложенной модели с расчетами по «базовой» модели переноса рейнольдсовых напряжений и модифицированной k — ε -модели показало более близкие к экспериментально наблюдаемым профили рейнольдсовых напряжений (рис. 4). Это позволяет надеяться на более адекватное описание процессов теплопереноса в сложных турбулентных течениях на основе предложенной модели.

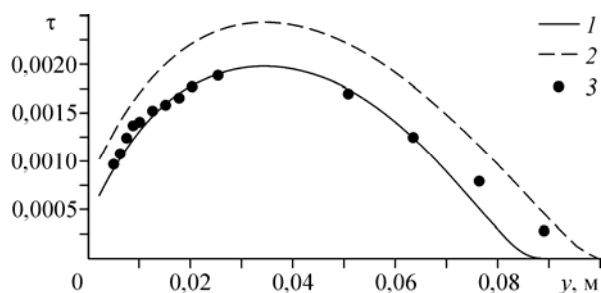


Рис. 4. Распределения касательного напряжения трения τ на стенке в пограничном слое с сильным положительным градиентом давления.

1 — расчет по модифицированной k - ε -модели; 2 — по стандартной; 3 — экспериментальные данные (Samuel, Joubert, 1974), сечение $x = 3,4$ м.

В том же институте получены новые экспериментальные данные по калорическим свойствам соединений GdF_3 , ErF_3 , LuF_3 в интервале температур 400—1650 К твердого и жидкого состояний. Уточнены изменения энтальпии и теплоемкости фторидов редкоземельных элементов (ФРЭ) при фазовых превращениях. Показано, что ангармоническая составляющая колебательной теплоемкости трифторидов редкоземельных элементов изменяется пропорционально кубу температуры, а изменение теплоемкости при плавлении ФРЭ, имеющих структуру типа LaF_3 , не превышает 10%. Установлены корреляции изменения энтальпии расплава, энтропии плавления от радиуса катиона. Предложено двухпараметрическое уравнение (параметры — радиус катиона и температура плавления), описывающее экспериментальные данные по энтальпии расплавов ФРЭ (рис. 5).

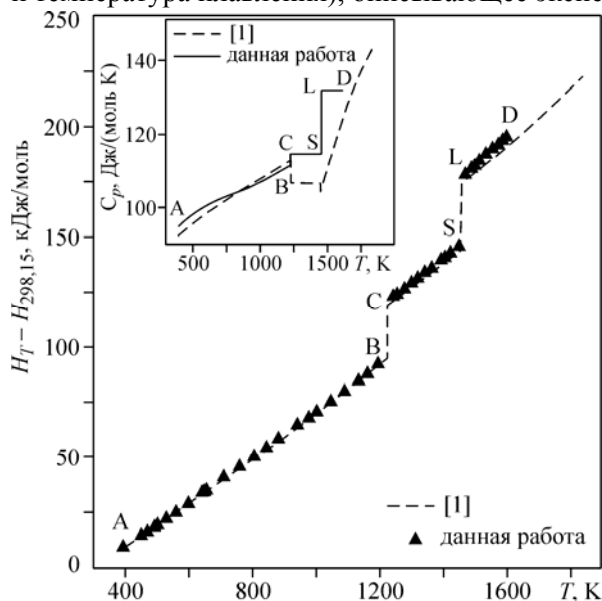


Рис. 5. Энтальпия и теплоемкость (на врезке) LuF_3 в твердом и жидком состояниях. АВ — структура типа $\beta-YF_3$, CS — структура типа $\alpha-YF_3$, LD — расплав. [1] — (Spedding F. H., Beaudry B. J., Henderson D. C., Moorman J.// J. Chem. Phys. 1974. V. 60, N 4. P. 1578).

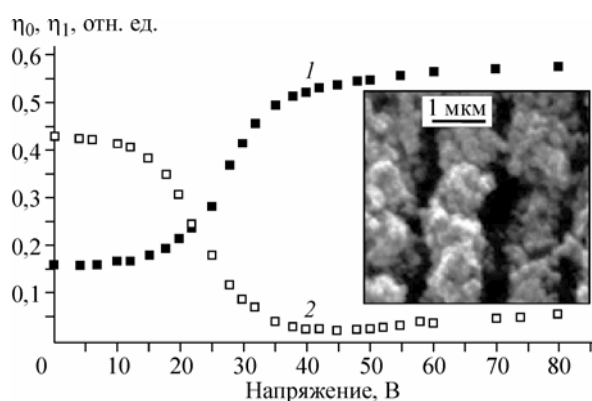


Рис. 6. Типичные полевые зависимости дифракционной эффективности для нулевого (1) и первого (2) порядков для жидкого кристалла композита, сформированного методом неоднородной фотополимеризации. На вставке показан фрагмент периодической структуры полимерной матрицы после удаления жидкого кристалла из исходного композита.

Коллективом молодых сотрудников Института теоретической и прикладной механики и СКТБ «Наука» КНЦ экспериментально исследованы особенности эффектов переориентации директора нематического жидкого кристалла (НЖК), локализованного в микрообъемах полимерных матриц, отличающихся пространственной структурой, под действием внешнего электрического поля. Процесс переориентации директора НЖК в микрообъемах сопровождается изменением оптических свойств композитного материала вследствие оптической анизотропии НЖК, а следовательно, изменением светорассеивающих характеристик тестируемой электрооптической ячейки, содержащей тонкий (10 мкм) слой материала. Проведен теоретический анализ особенностей прохождения светового излучения через одномерный фотонный кристалл, представляющий собой многослойную структуру с двумя дефектными НЖК-слоями.

Полученные экспериментальные и теоретические данные позволяют выявить закономерность: с повышением пространственной структурной упорядоченности композитных материалов от хаотичных капельных дисперсий до композитов с периодической структурой обнаруживаются усиление интерференционных эффектов и проявление дифракционных свойств (рис. 6), что позволяет расширить область применения этих оптических сред.

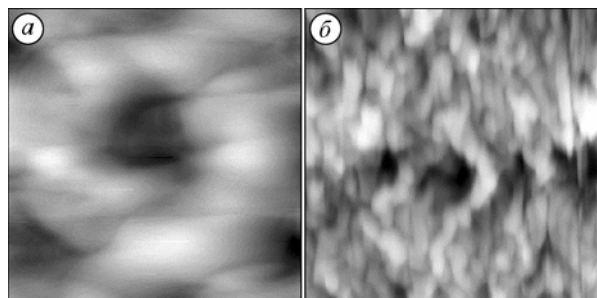


Рис. 7. Увеличенное изображение поверхности пленок Ti, нанесенных на полипропиленовую подложку (атомно-силовой микроскоп), растяжение $\varepsilon = 5\%$ при $T = 293$ К. Увеличение: *a* — 45 000, *б* — 11 000.

Коллективом сотрудников Института физики прочности и материаловедения, Института сильноточной электроники, Института неорганической химии исследованы тонкие пленки меди, полученные методом МОСVD на основе комплекса гексафторацетилацетоната меди с 1,5-циклооктадиеном в качестве предшественника. Установлена зависимость морфологии поверхности и структуры пленок Cu от температуры источника и подложки, а также от длительности процесса осаждения. Обоснована возможность комбинированного использования среднеквадратичной шероховатости и фрактальной размерности, анализа Фурье и вейвлет-спектров для количественного описания рельефа поверхности тонких пленок Cu.

В рамках многоуровневой модели деформируемого твердого тела вскрыты механизмы деградации тонких металлических нанокристаллических пленок при различных внешних воздействиях. Деформационный рельеф, возникающий в процессе термического отжига, одноосного растяжения или пропускания электрического тока высокой плотности, позволяет выявить периодическое распределение растягивающих и сжимающих напряжений на границе раздела пленка—подложка (рис. 7).

В Институте систем энергетики при моделировании нелинейного динамического объекта в случае векторного входа обоснованы необходимые условия (в терминах амплитуд тестовых сигналов) существования двумерных ядер Вольтерра в классе непрерывных на квадрате несимметричных функций. Построены и протестированы интегральные модели теплообменника, исследованы подходы к уточнению моделирования отклика объекта и решена задача оптимизации амплитуд тестовых сигналов. Создана программа для решения задачи автоматического регулирования применительно к эталонной модели процесса теплообмена.

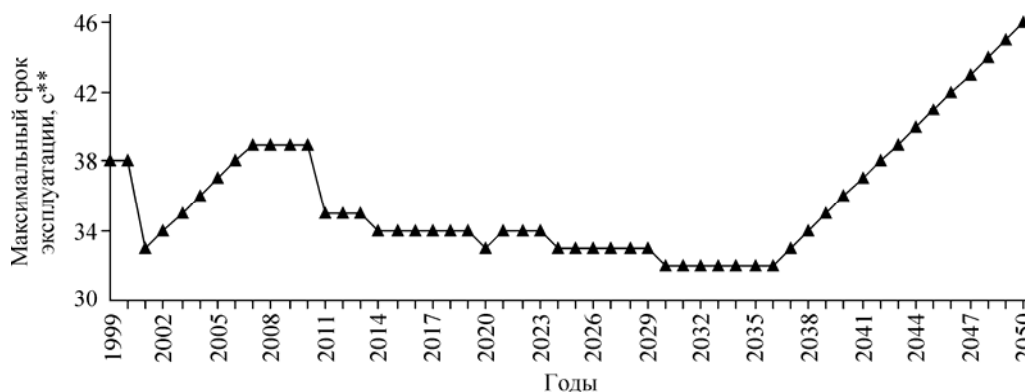


Рис. 8. Динамика оптимального срока эксплуатации оборудования.

Предложены варианты численного решения уравнения Вольтерра I рода, когда оба предела интегрирования являются функциями времени. Рассмотрена задача моделирования долгосрочных стратегий развития электроэнергетических систем, сформулированная как модель оптимального управления. Эта задача описана с помощью неклассических уравнений Вольтерра I рода, а управляющий параметр входит в нижний предел интегрирования. Предложен вариант численного решения в случае разделения генерирующего оборудования на три типа.

Рассмотрен случай, когда правая часть уравнения Вольтерра I рода в начальной точке не равна нулю. Получена явная структура решения этого уравнения, состоящая из сингулярной и регулярной частей.

