

ISSN 1680-9165

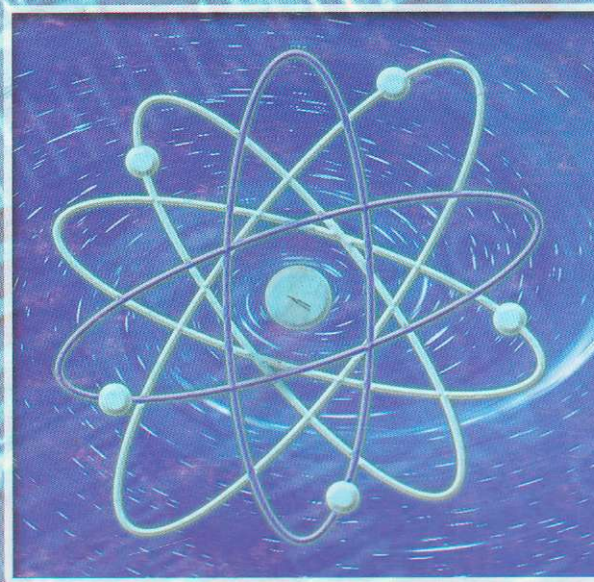
НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Павлодарский государственный университет имени С.Торайсырова



Г | О | г | г | л |
I | Z | \ | J | { | } | I

НАУКА И ТЕХНИКА КАЗАХСТАНА



КАЗАХСТАН
ҒЫЛЫМЫ МЕН ТЕХНИКАСЫ

МАЗМҰНЫ

Жаратыл ыстану ғылымдары

А.А. Муратбекова, Қ.А. Аяпберген
Дийодэтилен, дибромэтилен, 2-бутеннің цис- жәіе транс-изомерлерінің реакцияға бейімділіктерін бояжау..... 5

А.К. Жармағамбетова, Ф.М. Тоқтабаева, Ю.Л. Шелудяков, С.Г. Мухамеджанова
Палладия жәвв кобалытiң полимерметалдық кешеніндегі гексеннің тотықтырғыш ацетон ашытқышы.....10

А. Ф. Мингалеева, А. С. Мәсәлімов %
Оксифеноксилдардың протолиз механизмің квантты - химялық зертт^лгрі.....17

Г.А. Бектенова, Е.А. Бектуров
Карбоксильді катиониттегі сорбциякataloзы..... 24

Е.С. Мустафиң, Ш.Б. Қасенова, Б.К. Қасенов, И.М. Өскембеков, М.А. Ақубаева
Жерсілтілі металдармш легирилген Лантон жәж европия хромиттерін ретгеяографикалық зерттеу. 29

З.А. Мансуров, Г.К. Тажкенова, Р.М. Мансурова, Р.Ш. Еркасов
Карбомишралды сорбенттарды алу үрдiсi мш оның суды тазарту үшін қолдануының зерттелуі.....33

С.В. Ефремова, С.А. Ефремов, О.Е. Лебедева, Л. Онгарбаева, Ж.А. Тайсерекова
Қазақстан шүнғытын тәжірибешілік пайдалану мш ғалыми зерггеудің жаңа бағыттары..... 39

Ж.И. Сагинтаева, Б.К. Қасенов, М.М. Матаев, М.К. Алдаберген
SrBi₃O₇ стронция висмутитінің раігенграфикалық (рeнгшсызбалық) жәш термодинамикалық зертт^... 45

С.Н. Тусімбаев, Г.П. Полатбекова
Квантты-химиялық модельдеу көмегіман [d - орбиталі мен электронды кореляция есебінің әсері] BiHal₃ (Hal = Cl, Br, I) висмут галогенидтер құрлысының зерттелуі . 50

К.Х. Жапаргазинова, К.И. Иманбеков
Эпоксид қосылыстарының пиридин туындылары мш әрекеттесуіж протондау процесінің ықпалы..... 58

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЖГИЯ

Нухулы А., д.х.н., проф. *{главный редактор}*
Кислов А.П., к.т.н., доц. *{зам. гл. редактора}*
Члены редакционной коллегии:
Бойко Ф.К., д.т.н., проф.
Газалиев А.М., д.х.н., проф., член-корр. НАН РК
Гамарник Г.Н., д.т.н., проо.
Глазырин А.И., д.т.н., проф.
Даукеев Г.Ж., к.т.н., проф.
Ергожин Е.Е., д.х.н., проф., академик НАН РК
Ельмуратова А.Ф., к.т.н., доц.
Клецель М.Я., д.т.н., проф.
Кудерин М.К., к.т.н., доц.
Мансуров З.А., д.х.н., проф.
Мурзагулова К.Б., д.х.н., проф.
Пивень Г.Г., д.т.н., проф.
Сатинов А.С., д.т.н., проф., академик НАН РК
Утегулов Б.Б., д.т.н., проф.
Царенко Л.А. *{тех. секретарь}*

Адрес редакции:
637034, г. Павлодар,
ул. Ломова, 64,
Тел.: (3182) 45-11-43
(3182) 45-38-60
Факс: (3182) 45-11-23
E-mail: publish@psu.pvl.kz
nauka@psu.pvl.kz

" 2 C Ю 1	Техникалық ғылымдар	
	<i>Г.Г. Пивень, И.П. Падиарова</i>	
* 3	МС ИСО 9001: 2000 Сапалық менеджмент жүйесін еягізу негізінде өнімнің бәсекелестік қабілетін қамтамасыз ету.....	66
Ш X	<i>Д.К. Сүлеев</i>	
Sj	Металлдық матириалдар соғылысуының теориялық негіздері	73
Ш s	<i>А.Ф. Проскураков</i>	
Q c	Нарықтық қарым-катынас жағдайындағы мамандардың үлгі бейгесі.....	94
S i	<i>В.В. Рындин</i>	
< f	«Жылу», «Жұмыс», «Энергия», «Заттың саны» терминдердің көп мағыналылығы туралы.....	103
Н	<i>К.Ш. Арынгазин, С.Р. Гирнис</i>	
Н	Бидайды кептіруші құрылғыларды есептеу бойынша бағдарламалық реализация.....	115
+	<i>Н.М. Зайцева, Н.А. Новицкая</i>	
0	Интернет тораптары жұмысын модельд^.....	120
B	<i>Ұ.А. Шагиева</i>	
< X	Жөнделмейтін объектілердің сенімділік көрсеткіштері	127
ш >>	<i>И.А. Серов</i>	
	Жүйелік анализ әлгменті.....	132
	<i>Б.Б. Өтегулов, М.Е. Волгин</i>	
	Көмір разрездерін электрмея жабдықтау жүйе.тгрінщ параметрлерін математикалық жолман үягізу.....	139
o	<i>А.И. Алиферов, Т.В. Хацевская</i>	
	Жазық кабыршақ плазмалық тозанданған кыздырғыш элементтердің жылу режимінің ерекшеліггрі	149
	<i>А.П. Кислоев, А.В. Чердниченко</i>	
	Вакуымдық плазмотронларльщ куысты ізішізшье авария.тық жағдайлардан корғантын: < x s z	161
	жәш системалардыш мівездемесі	161
	<i>К.В. Хацевский, В.С. Чердниченко</i>	
	Коаксиалды цилиндр."Ер: оар ивдуізщяюік жьсшіу жүйедері.....	16~
	<i>Н.И. Овчаренко, Ю.А. Ленков</i>	
	Гальваномагниттік тезәрекегтік өлшелш керж- түрлендіргіштері.....	174
	<i>В. А. Бороденко</i>	
	MatLAB 5.x ортасында сызықты жүйеінің тұрақтылығын бағалау.....	180
	<i>Д.Б. Өтегулова</i>	
	Оқшауланған бейтараптама тораптарындағы бірфазаалық токтың жерге тұйықтамау жәж оқшаулану парамететрлерін анықтау әдістері.....	186
	<i>С.К. Елщратов</i>	
	Матрицалық түрлерді иілгін тегіс бетті сыртқы кабықтардың беріктігі, тұрақтылығы мен динамикасын ест^те пайдалану.....	192
	<i>Ш.К. Торпищев, М.Қ. Бейсембаев, Ф.Ш. Торпищев</i>	
	Глинозем өндірісінің қалдық шламдарын қайтадан іске жаратудың қазіргі замандағы тәжірибесі мен болжамдары.....	196
	Ақпарат	
	Біздің авторлар.....	202
	Авторларға арналған ережежр.....	205

N^SK^{SOQ1}

СОДЕРЖАНИЕ

KA AX

o m <
X Q
H H
H H
o a

21

o <
o t
o sO m
C Sε;
X
CL0
v x
x**Естественные науки***А.А. Муратбекова, К.А. Аяпберген*

Предсказание реакционной способности цис- и транс-изомеров дийодэтилша, дибромэтижна и 2-бутена 5

*А.К. Жармагамбетова, Ф.М. Токтабаева, Ю.Л.**Шелудяков, С.Г. Мухамеджанова*

Окислительное ацетоксилирование гексена на полимерметаллических комплексах палладия и кобальта.....10

А.Ф. Мингалеева, А.С. Масалимов

Квантово-химические исследования механизма протолиза замещенных оксифеноксиллов17

Г.А. Бектенова, Е.А. Бектуров

Сорбция каталазы на карбоксильных катионитах.....24

*Е.С. Мустафин, Ш.Б. Касенова, Б.К. Касенов,**И.М. Оскембеков, М.А. Акубаева*

Рентгенографическое исследование хромитов лантана и европия, легированных щелочноземельными металлами.....29

*З.А. Мансуров, Г.К. Тажкенова,**Р.М. Мансурова, Р.Ш. Еркасов*

Исследование процесса получения карбомишральных сорбентов и использования их для очистки воды..... 33

*С.В. Ефремова, С.А. Ефремов, О.Е. Лебедева,**Л. Онгарбаева, Ж.А. Тайсереква*

Новые направления в области научного исследования и практического использования казахстанского шугнита.....39

*Ж.И. Сагипаева, Б.К. Касенов,**М.М. Машаев, М.К. Алдаберген*Рентгенографическое и термодинамическое исследования висмута стронция SrBi₂O₄.....45*С.Н. Тусупбаев, Г.П. Полатбекова*Исследование структуры галогенидов висмута (III) BiHal₃ (Hal = Cl, Br, I) с помощью квантово-химического моделирования: влияние учета d-орбиталей и электронной корреляции.....50*К.Х. Жапаргазина, К.И. Иманбеков*

Влияние протонирования на взаимодействие эпоксидных соединений с пиридинпроизводными 58

Технические науки*Г.Г. Ливень, И.П. Падиарова*

Обеспечение конкурентоспособности продукции на основе внедрения систем менеджмента качества по МСИСО 9001: 2000.....66

Д.К. Сулеев

Теоретические основы соударения металлических

За достоверность материалов и рекламы ответственность несут авторы и рекламодатели.

Мнение авторов публикаций не всегда совпадает с мнением редакции.

Редакция оставляет за собой право на отклонение материалов.

Рукописи не возвращаются.

При использовании материалов журнала ссылка на «Науку и технику Казахстана» обязательна.

<p>АХ</p> <p>Корректоры: А.Ф. Зейнулина (каз.) С.К. Шаймарданова (рус.)</p> <p>Верстка А.С. Подмиогин</p> <p>ПГУ им. С. Торайгырова</p>	<p>материалов73</p> <p>А.Ф. Проскураков</p> <p>Модель специалиста в условиях рыночных отношений94</p> <p>В.В. Рындин</p> <p>О многозначности терминов «Теплота», «Работа», «Энергия», «Количество вещества».....103</p> <p>К.Ш. Арынгазин, С.Р. Гирнис</p> <p>Программная реализация задачи по расчету оборудования для сушки зерна 5</p> <p>Н.М. Зайцева, Н.А. Новицкая</p> <p>Моделирование работы узла сети Internet.....120</p> <p>Р.А. Шагиева</p> <p>Показатели надежности взрмонтир)емых объектов.. 127</p> <p>И.А. Серов</p> <p>Элементы системного анализа132</p> <p>К.Б. Утегулов, М.Е. Волгин</p> <p>Математическое моделирование параметров систем электроснабжения угольных разрезов.....139</p> <p>А.И. Алиферов, Т.В. Хаиевская</p> <p>Особенности тепловых режимов плоских пленочных плазменно напыЕШЫхзггревзтельных э."вмжгов.149,</p> <p>А.П. Кислое, А.В. Чередниченко</p> <p>Расчет тсковых характеристик Е система от аварийных режимов полых иход-ов ззхуукных плазмотронов. :_____161»</p> <p>К.В. Хацееский. КС. Череняченко</p> <p>Индукционные сгстгмк нзтрезг с в и ш э ш _____</p> <p>цвхнняраив _____ К</p> <p>Н.И. Овчаренко. Ю. А. Лашив</p> <p>Быстродействующий гальвамшзгзкный итмегнтедьЕьз преобразователь напрязсния I -т</p> <p>В. А. Бороденко</p> <p>Оценка устойчивости литейной системы по критерию Рауса в среде Matlab 5.x.....180</p> <p>Д.Б. Утегулова</p> <p>Методы определения параметров изоляции и тока однофазного замыкания на землю в сетях с изолированной нейтраль.....186</p> <p>С.К. Ельмуратов</p> <p>Применение матричной формы метода конечных разностей к расчету гибких пологих ортотропных оболочек на прочность, устойчивость и динамику.192</p> <p>Ш.К. Торпицев, М.К. Бейсембаев, Ф.Ш. Торпицев</p> <p>Современный опыт и перспективы утилизации отвальных шламов глиноземного производства..... 196</p> <p>Информация</p> <p>Наши авторы.....202</p> <p>Сведения для авторов.....205</p>
--	--

ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

УДК 541 (124.128+547)536.7

ПРЕДСКАЗАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ЦИС- И ТРАНС-ИЗОМЕРОВ ДИЙОДЭТИЛЕНА, ДИБРОМЭТИЛЕНА И 2-БУТЕНА**А.А. Муратбекова, К.А. Аяпбергенов***Карагандинский государственный университет**им. Е.А. Букетова*

Дийодэтилен, дибромэтилен және 2-бутен молекулаларының қурылымы мен олардың реакцияға бейімділіктері арасындағы байланыс қарастырылған. Осы қосылыстардың реакцияға бейімділігіне зат массасының таралу сипатының әсері есептелген.

Рассматривается связь между строением дийодэтилена, дибромэтилена и 2-бутена с их реакционной способностью. Рассчитано влияние характера распределения масс на реакционную способность этих соединений.

The connection between structure and reactionary ability of the diiodetilen, dibrometilen, 2-buten were considered. The influence of the character of distribution of the mass on reactionary ability of this compounds were calculated.

Теоретическая органическая химия призвана предсказывать реакционную способность органических соединений и разрабатывать соответствующие качественные и количественные методы. Иерархические ступени развития этой проблемы характеризовались разными теоретическими подходами к ней - от интуитивных предположений, основанных на структурных особенностях сопоставляемых соединений и

улучшаемых с учетом электронного фактора, до современных сложных методов. В основе численных прогнозов кинетического свойства реагирующих молекул лежит эмпирический подход, базирующийся на использовании корреляционных соотношений типа уравнений Бренстеда, Гаммета, Тафта, появившихся благодаря принципу линейности изменения свободных энергий, или квантомеханических характеристик,

связанных с применением индексов реакционной способности- теории граничных орбиталей, энергии локализации, метода возмущенных орбиталей и т.д.

Одна из важнейших проблем современной химии- установление связи между строением вещества и его реакционной способностью. Это можно сделать с помощью уравнения Тафта, позволяющего рассматривать изучаемую задачу в многоплановом аспекте: оно может учитывать многообразные проявления как полярного влияния, так и пространственного эффекта. Однако оно, к сожалению, не свободно от некоторых недостатков, на что обратили внимание исследователи, в частности в работах [1,2].

Для количественной оценки взаимной благоприятной ориентации взаимодействующих молекул в пространстве и взаимной пространственной доступности реакционных центров в них разработаны и рекомендованы расчетные методики. Одновременный учет двух частных факторов (эффектов) дает более полную информацию об относительной реакционной способности сопоставляемых соединений. Предсказательная возможность и точность такой методики расчета особенно велика, когда энергии активации однотипных ре-

акций, в которых участвуют сравниваемые соединения, или одинаковы (незначительно отличаются друг от друга), или равны нулю (безбарьерны). Оценка реакционной способности сопоставляемых веществ с помощью предлагаемого метода способствует установлению причины различия в их скоростях и решающего фактора, оказывающего существенное влияние на развитие реакции в данном направлении. Аналитическое выражение зависимости относительной реакционной способности от характера распределения масс молекулы дает возможность в случае реакций, идущих по одному и тому же механизму при прочих идентичных условиях, резко сократить до возможного минимума число опытов, проводимых для выяснения химической активности сопоставляемых соединений одного класса и при известных их геометрических параметрах.

Целью работы является теоретическое предсказание реакционной способности изомеров некоторых соединений при условии, когда эти процессы протекают абсолютно в одинаковых условиях.

Применяя указанный выше метод, нами были рассчитаны вероятности встречи реакционных центров молекул цис- и транс- изомеров бутена-2, дибромэтилена и дийодэтилена в реакциях радикальной полимеризации. Длины химических

связей и ковалентные радиусы атомов взяты из справочника химика.

Вероятности встречи реакционных центров определяются по формуле:

$$W=r^2/4h^2$$

где r - ковалентный радиус атома, который является реакционным центром;

h - расстояние от центра масс молекулы до реакционного центра.

Вычисляется по следующей формуле:

$$h^2=(x_{ц.м.}-x_{р.н.})^2+(y_{р.ц.}-y_{р.ц.})^2+(z_{ц.м.}-z_{р.ц.})^2$$

где $x_{ц.м.}$, $x_{р.н.}$, $y_{р.ц.}$, $y_{р.ц.}$, $z_{ц.м.}$, $z_{р.ц.}$ - координаты центра массы молекулы по осям ОХ; ОУ; ОZ;

$x_{р.ц.}$, $y_{р.ц.}$, $z_{р.ц.}$ - координаты атома, который является реакционным центром.

* Координата $z = 0$.

При определении координат центра массы для каждой молекулы, имеющей определенную конформацию, целесообразно считать в рам-

ках приближения Борна-Оппенгеймера приемлемой модель жестко связанных точечных масс, сосредоточенных в центрах соответствующих ядер(атомов).

Если все факторы, существенно влияющие на ход сравниваемых реакций, кроме фактора благоприятной (встречи) ориентации реакционного центра, проявляются в одинаковой степени, а второе исходное вещество, участвующее в этих реакциях в качестве постоянного партнера, неизменно, то скорость реакций можно представить как величину пропорциональную вероятности $V_q=kW_{qu}$ где k -коэффициент пропорциональности; q - порядковые номера веществ; u -второй партнер-молекула. Вычисления расчетного отношения скоростей проведены на основании данных, приведенных ниже:

Таблица

Координаты атомов молекулы бутена-2 и дибромэтилена

N	Атом	Масса атома	X	Y	N	Атом	Масса атома	X	Y
1		12	0,67	0	1	С	12	0,67	0
2		12	-0,67	0	2	С	12	-0,67	0
j	исС	12	1,425	1,31	3	Вг	80	1,625	-1,65
	рансС	12	1,425	-1,31	4	Н	1	1,213	0,94
4		12	-1,425	1,31	5	ТрансВг	80	-1,625	1,65
5	исН	1	1,123	-0,94		ЦисН	1	-1,213	0,94
	рансН	1	-1,123	0,94	6	ТрансН	1	-1,123	-0,94
6		1	1,123	-0,94		Цис Вг	80	-1,625	-1,65

Таблица 2

Координаты атомов молекулы дийодэтилена.

N	Атом	Масса атома	X	Y
1	C	12	-0,67	0
2	C	12	0,67	0
3	J	127	1,82	-1,99
4	H	1	1,213	0,94
5	ТрансJ	127	-1,82	1,99
	ЦисH	1	-1,123	0,94
6	ТрансH	1	-1,123	-0,94
	L W	127	-1,82	-1,99

По результатам расчетов были получены следующие отношения скоростей:

длябутена-2: $U_p/U_{цис}=4,5$; для дибромэтилена $U_{тр}/U_{цис}=10,8$; для дийодэтилена $U_{тр}/U_{цис}=16,7$. На основе проделанных расчетов можно сделать выводы о направлении реакции полимеризации дибромэтилена, дийодэтилена и бутилена-2, а также сравнить реакционную способность их цис- и транс-изомеров.

Таким образом, в реакциях радикальной полимеризации транс-изомеры этих соединений реагируют активнее, чем их транс-изомеры в 4,5; 10,8 и 16,7 раза соответственно (бутен-2, дибромэтилен и дийодэтилен).

Полярный и пространственный факторы в молекулах транс- и цис- изомеров проявляются в одинаковой степени (в обоих изомерах реакционный центр- равноправные

атомы углерода при двойной связи), так как окружение каждого из этих углеродных атомов одинаково. Следовательно, их влияние на реакционную способность полностью отсутствует. Это было отмечено в [4].

Полученные результаты можно связать с характером распределения массы молекулы и его влиянием на вероятность встречи реакционных центров, то есть особенностью пространственного расположения реакционного центра относительно других фрагментов молекулы.

Физический смысл вычисленной вероятности заключается в том, что линия, соединяющая центр массы данной молекулы с ее реакционным центром, не всегда может совпадать с направлением поступательного перемещения и тем самым обеспечивать условие, при котором суммарная энергия колебательного,

поступательного и вращательного движений может максимально расходоваться на преодоление энергетического барьера.

В цис- и транс-изомерах не всегда более активен второй изомер, что следует из вышеуказанных примеров. Их активность также зависит и от местонахождения реакционного центра в данной молекуле относительно других его фрагментов.

В работе с новых позиций рассмотрен методологический подход к решению одной из основных

проблем химии - установлению аналитической зависимости между относительной реакционной способностью и строением веществ на молекулярном уровне. Основываясь на современной физической модели молекулы, согласно которой она представляет собой жестко связанную друг с другом единую квантовомеханическую систему атомов, и учитывая местонахождение реакционного центра, можно количественно оценить (рассчитать) реакционную способность молекулы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии: Пер. с англ. - М.: Мир, 1972. 590с.
2. Ингольд К.К. Теоретические основы органической химии: Пер. с англ. - М.: Мир, 1973. 1055с.
3. Аяпбергенов К.А. Методы оценки реакционной способности органических молекул и расчета кинетических параметров. - Алма-Ата. : Гылым, 1991. 223с.
4. Гладышев Г.П. Полимеризация винильных мономеров. - Алма-Ата: Наука, 1964. 322с.

УДК 542.943

Щ •

ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ АЦЕТОКСИЛИРОВАНИЕ ГЕКСЕНА НА ПОЛИМЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСАХ ПАЛЛАДИЯ И КОБАЛЬТА

Ъ/fi
НВ**А.К. Жармагамбетова, Ф.М. Токтабаева,****Ю.Л. Шелудяков, С.Г. Мухамеджанова***Институт органического катализа и электрохимии**им. Д.В.Сокольского*

Жогсіргы байланыс қабілеті мен адсорбциондық және өршіту белсенділігін танытудағы (650-700 м²/г) жогарғы биіктікпен өрііткілердің жаңа түрін өндіру үшін Қазақстандағы дентониттер таңдалды.

Основой для разработки новых типов катализаторов были выбраны дентониты Казахстана (Tagansorbent), для которых характерны высокая удельная поверхность (650-700 м²/г), высокая связующая способность, адсорбционная и каталитическая активность.

The basis for mining new phylums of accelerators selected bentonites of Kazakhstan (Tagansorbent) were chosen, characteristics of which are high specific surface area (650-700 м²/г), high binding capacity, adsorptive and catalytic activity.

Введение

Парциальное непрямо́е окисление углеводородов является актуальной задачей, так как позволяет получать широкий ряд различных продуктов: спиртов, кислот, аминов и др. Кислород, вводимый в состав функциональной группы, при непрямом окислении может поступать от любых других химических соединений, содержащих его. Наиболее удоб-

ным является окисление в присутствии кислорода воздуха. Термодинамика этого процесса благоприятна в широком интервале температур.

Окислительное ацетоксилирование углеводородов относится к одному из способов получения спиртов, которые легко образуются при гидролизе их ацетильных производных [1,2].

В качестве катализаторов окислительного ацетоксилирования олефинов применяются соединения Pd, Au, Си, Fe, Со и другие [3]. Соли палладия занимают особое место, так как легко образуют ацетатные, а также π -комплексы с непредельными соединениями. Их недостатком является сложность отделения гомогенного катализатора от продукта. Для преодоления этого затруднения комплексы палладия наносят на функциональные полимеры и твердые подложки. В ряде случаев полимерметаллические катализаторы на носителе являются не только более стабильными и удобными, но и более активными.

Подходящими минеральными носителями для палладиевых систем

могут выступать глины. Нами были разработаны полимерметаллические комплексы на основе Pd и Со, путем закрепления нанодисперсных частиц на глинах таганского месторождения. В качестве полимерной матрицы были использованы полирамногалактуронан (ПРГУ) и полигексаметиленгуанидинхлорид (ПГМГ), растворимые в воде. Основой для разработки новых типов катализаторов были выбраны бентониты Казахстана (Тагансорбент), для которых характерны высокая удельная поверхность (650-700 м²/г), высокая связующая способность, адсорбционная и каталитическая активность. Тагансорбент - это продукт обработки природного Na-монтмориллонита (98%) из класса смектитов.

Экспериментальная часть

Монтмориллонитовая глины обрабатывались 20% серной кислотой в течение 24 часов и промывались дистиллированной водой до отрицательной реакции на ионы SO_4^{2-} . Отмытый сорбент сушили при 200°C в течение 6 часов и затем прокачивали в токе сухого воздуха при 500°C в муфеле в течение 18 часов. Обработанные таким образом сорбенты использовали в качестве носителей для приготовления катализаторов.

Методика приготовления ка-

тализатора. Тагансорбент (ТС) заливался водой, и в эту суспензию при постоянном перемешивании вводился водный раствор полимера (полирамногалактуроновая кислота (ПРГУ) или полигексаметиленгуанидин (ПГМГ)), а затем добавлялось расчетное количество соли палладия или кобальта. Осадок промывался несколько раз дистиллированной водой и сушился на воздухе.

Полученные таким образом катализаторы (5%Ргi-ПРГУ/ТС, 5%Со-ПРГУ/ТС, 5%Pd-ПГМГ/ТС)

восстанавливались 5%-ым раствором боргидрида натрия непосредственно перед проведением реакции ацетоксилирования.

Реакция ацетоксилирования гексена-1 проводилась в стеклянном реакторе при постоянном перемешивании при температуре 50-75°C, и давлении воздуха - 3 атм.

Анализ ИК-спектров продуктов ацетоксилирования позволяет сделать вывод, что в процессе реакции образуются вещества, содержащие ацетоксигруппы, о чем свидетельствует появление полосы поглощения при 1740 см⁻¹, соответствующей валентным колебаниям карбонильной группы (-C=O), а также валентные колебания в области 1780 см⁻¹, характерные для сложноэфирной группировки (R-O-CO-).

Для идентификации получен-

ных продуктов по окончании ацетоксилирования реакционная смесь охлаждалась и отделялась от катализатора. Затем была проведена фракционная перегонка продуктов реакции под вакуумом. Было выделено 4 фракции. Из анализа ИК-спектров и хроматографических данных следует, что в процессе реакции окислительного ацетоксилирования 1-гексена на наноструктурных полимерметаллических катализаторах в мягких условиях образуются соединения, содержащие ацетоксигруппы, и в катализате преимущественно обнаружены монооксиацетаты гексана (51 -72%). В таблице приведены результаты опытов по окислительному ацетоксилированию гексена-1 в кинетической установке под давлением воздуха в присутствии различных катализаторов.

Таблица

Ацетоксилирование гексена-1 при 75 °С и давлении воздуха 3 атм на 5%-ных нанесенных палладиевых катализаторах. Время реакции 5 часов.

Катализатор	Процентное соотношение продуктов реакции				
	2-ацетокси" "гексанол	"ацетокси" 2'гексанол	Неидентиф. продукт	Неидентиф. продукт	Неидентиф. продукт
Pd/C	55.3	17.1	10.4	7.1	6.3
Pd/TC	45.5	17.1	10.4	7.1	3.8
Pd-пргУ/ТС	55.1	13.6	8.7	5.3	7.0
Pd-пГМГ/ТС	40.8	10.5	25.2	3.5	3.1
Со-пргУ/ТС	45.6	3.6	4.1	5.3	2.6

Из таблицы видно, что палладиевые полимерметаллические катализаторы на носителях проявляют большую активность, чем кобальтовые. При этом тагансорбент,

использованный в качестве подложки, незначительно уступает активированному углю (вероятно, из-за меньшей удельной поверхности). Максимальной селективностью по

оксиацетатам обладают палладиевые катализаторы с полирамногалактуроновой кислотой.

Для характеристики иммобилизованных металлокомплексных катализаторов реакции ацетоксилирования было проведено электронно-микроскопическое исследование образцов в исходном и отработанном состояниях.

На рис. 1 и 2 представлены микрофотографии общего вида исходных образцов Pd/ТС и Pd-полимер/ТС катализаторов при малом (24000) увеличении. Палладий в Pd/

ТС катализаторе (рис.1) представлен крупными дендридами, состоящими из плотных частиц размером 8-15 нм. Увеличенный фрагмент дендридного скопления (увеличение 160000) частиц палладия показан на рисунке 3. При нанесении палладия на тагансорбент, обработанный полимером, (рис.2) не наблюдается образование плотных дендридов. Частицы Pd размерами 10-12 нм распределены по поверхности носителя как в виде небольших рыхлых агрегатов (рис.4), так и разрозненными скоплениями (рис.5).



Рис. 1. 5% Pd/ТС - исходный образец. Увеличение 24000

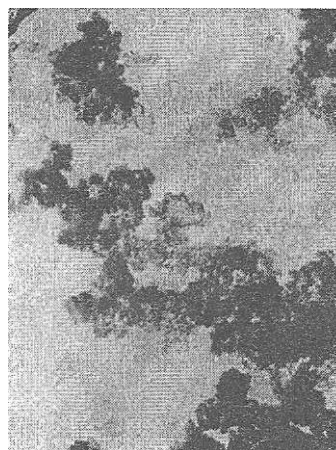


Рис.2. 5%Pd-polymer/ТС - исходный образец. Увеличение 24000

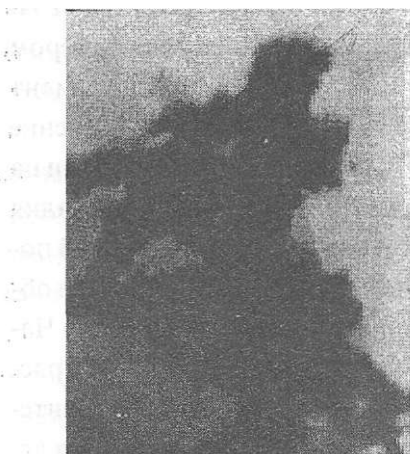


Рис.3. 5% Pd/TiC - исходный образец. Увеличение 160000



Рис.4. 5%Pd-nrMg/TiC - исходный образец. Увеличение 160000

После проведения процесса ацетоксилирования картина Pd в отработанном образце Pd/TiC катализатора морфологически не меняется. На рисунке 6 (увеличение 160000) палладий представлен в виде дендрида. Однако данная микродифракционная картина относится к PdO, так как исчезает рефлекс 3,06, появляются рефлексы 2,18, относящиеся к оксидной форме палладия.

На микрофотографии отработанного образца Pd-полимер/TiC катализатора (рис.7, увеличение 80000) наблюдается разрыхление агрегатов на отдельные частицы, и палладий остается в восстановленном виде. Катализатор после проведения реакции не теряет свою актив-

ность.

Иная картина наблюдается на микрофотографиях Co-полимерЛГС катализатора. Так, в исходном образце (рис.8, 9, увеличение 80000) кобальт представлен большими агрегатами из крупных частиц Co_2O_3 (рис.8), заполняющих обширные участки поверхности носителя. На рисунке 9 показаны отдельные кристаллы Co_2O_3 размером 50 нм и больше.

После обработки катализатора наблюдается уменьшение размеров частиц в скоплениях кобальта (рис.10). Микродифракционная картина соответствует CoO.

Данный катализатор теряет активность, по-видимому, из-за восстановления $CO(III)$ в $CO(II)$.

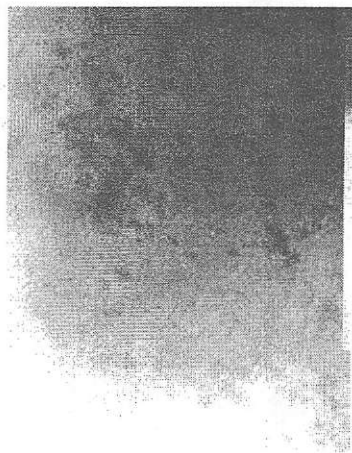


Рис.5. 5%Pt-ПГМГ/ТС
Отработанный образец.
Увеличение 160000

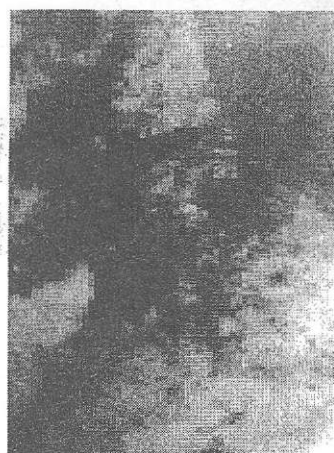


Рис.6. 5%Pt-ПГМГ/ТС
Отработанный образец.
Увеличение 160000

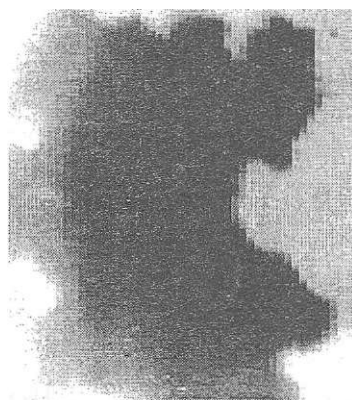


Рис.7. 5% Pd/ТС
Исходный образец.
Увеличение 160000

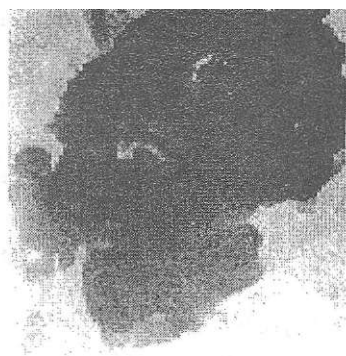


Рис.8. 5%Co-ПГМГ/ТС
Исходный образец.
Увеличение 80000

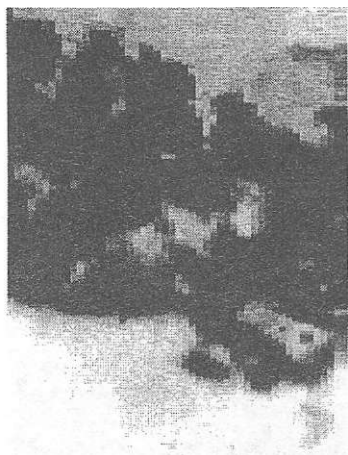


Рис.9. 5% Со/ТС
Исходный образец.
Увеличение 80000

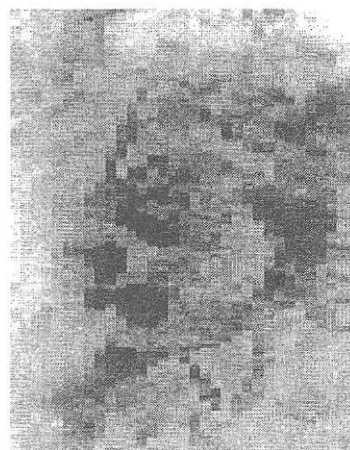


Рис.10. 5%Со-ПГМГ/ТС
Отработанный образец.
Увеличение 80000

Таким образом, испытаны в реакции окислительного ацетоксилирования гексена-1 несколько нанесенных на тагансорбент полимер-металлических комплексов палладия и кобальта. Найдено, что наиболее оптимальным катализатором этой реакции является полирамно-

галактуронановый комплекс палладия на тагансорбенте. Обработка носителя полимером не влияет на размеры частиц палладия, но способствует более равномерному их распределению по поверхности носителя и предотвращает его от окисления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Девекки А.В. Нефтепереработка и Нефтехимия, 1999, №3, с 20-27
2. Колхаун Х.М., Холтон Д.И. и др. Новые пути органического синтеза., М., Химия 1989, с 328-330
3. Ciijak L.M., Blum P.R., etc. Патент США №5550281, МПК С07С 67/05

УДК 541.515

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМА ПРОТОН ИЗ А ЗАМЕЩЕННЫХ ОКСИФЕНОКСИЛОВ

А.Ф. Мингалеева, А.С. Масалимов

Карагандинский государственный университет
им.Е.А. Букетова

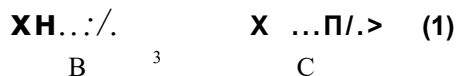
UHF AMI - әдісімен семихинондық радикалдардың қышқылдық диссоциациясы механизмінің теориялық зерттеулері жүргізілген.

Методом UHF AMI проведены теоретические исследования механизма кислотной диссоциации семихинонных радикалов.

By UHF AMI method was carried the theoretical investigations of the mechanism of acide dissotiation of the semiquinone radicals.

До настоящего времени квантово-химический расчет электронного строения таких сложных многоатомных систем, как пространственно-затрудненные семихинонные радикалы, а тем более их комплексов за счет водородных связей (КВС), представлял собой трудноразрешимую задачу. Однако с модернизацией квантово-химического пакета MORAC-7 с использованием новой версии алгоритмического языка FORTRAN-95 (пакет DYF-6 фирмы Microsoft) стали возможны не только расчеты вышеуказанных систем, но и поверхности потенциальной

энергии (ППЭ) реакций протонного переноса, осуществляющихся в них внутрикомплексным путем [1-3]. Ниже приводятся данные по AMI-исследованию протолиза 3,6-ди-трет.бутил-2-оксифеноксила (I) и 4,6-ди-трет.бутил-4-оксифеноксила (II) в их КВС с триэтиламином (ТЭА) и диэтиламином (ДЭА). Предполагалось, что протолиз осуществляется внутрикомплексно по известной схеме [4]:



На рисунке 1 представлена диаграмма зависимости полной

энергии линейного КВС I с ТЭА от длины ОН - связи в семихинонном радикале. Расчетные данные получены методом UHF AMI. Длина ОН - связи варьировалась от 0,9 до 2,1 А с шагом $S = 0,1$ А. В проведенных расчетах не осуществлялась жесткая фиксация длины водородного мостика ОН...N. Предполагалось, что протоноакцептор будет автоматически координироваться с ОН - поляризованным семихинонным радикалом. Из рис. 1. видно, что потенциальная кривая имеет энергетический барьер, максимум которого приходится на растяжении ОН - связи в 1,5 А и достигает значения 1,1 э.В, что составляет 106,172 кДж//моль.

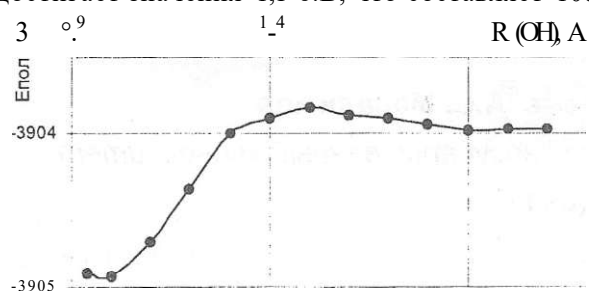


Рис. 1. Профили ППЭ переноса протона в КВС I с ТЭА

Из неглубоких энергетических ям на потенциальной кривой можно определить электронно - структурные параметры исходного и конечного продуктов реакции, а так же переходного комплекса исследуемого протолитического процесса (1). На рисунках 2-3 представлены геометрические структуры указанных частиц, полученных с помощью графического драйвера квантово - химического пакета HYPERCHEM-5.02.

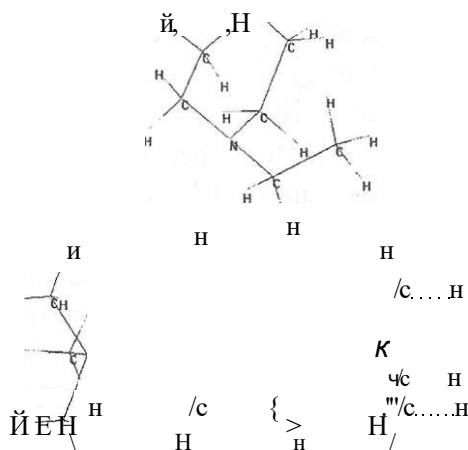


Рис.2. Структура молекулярного КВС I с ТЭА

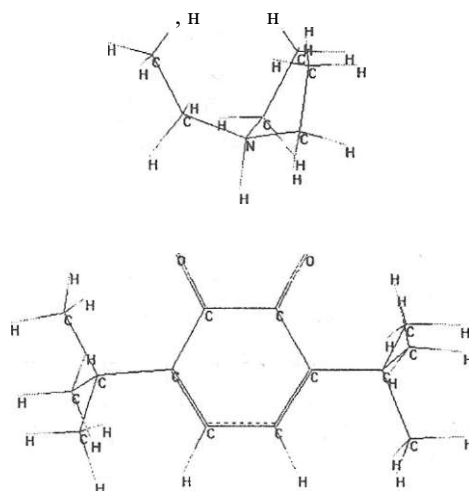


Рис.3. Структура ионного КВС продукта протолиза в системе I - ТЭА

Из рисунков 2 и 3 видно, что если исходный продукт реакции является молекулярным КВС, то продукт реакции представляет собой ионный КВС. При этом длины водородных мостиков в МКВС и в ИКВС различаются и равны соответственно 3,28 А и 2,81 А. По-видимому, уменьшению водородного мостика в ИКВС способствует электростатическое притяжение противоположно заряженных ионов в межмолекулярном комплексе. На рисунке 4 представлена пиктографическая диаграмма распределения зарядовой плотности в переходном комплексе, из которой видно, что на атоме водорода практически отсутствует электронная плотность. Данный факт согласуется с общими представлениями о переходном состоянии в теории абсолютных скоростей реакции Эйринга [5].

Аналогичные расчеты были

проведены для системы I - ДЭА. Предполагалось, что ДЭА, несмотря на то, что является NH-кислотой, подвергается обычному протонированию в межмолекулярном КВС линейного типа. На рисунке 5 приведена потенциальная кривая, построенная аналогичным образом, как и для системы I -ТЭА. Энергетический максимум на данной кривой соответствует величине $R(\text{OH})=1,6 \text{ \AA}$, что соответствует активационному барьеру, равному 107,008 кДж/моль. Длины водородных мостиков в МКВС и в ИКВС в системе I-ДЭА получились равными 3,35 А и 2,81 А соответственно. Обращает на себя внимание тот факт, что значения водородных мостиков в комплексах I с ТЭА и ДЭА практически совпадают как в МКВС, так и в ИКВС.

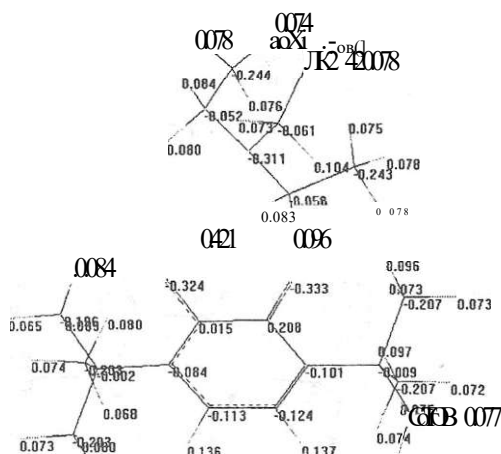


Рис.4. Диаграмма распределения зарядовой плотности в переходном

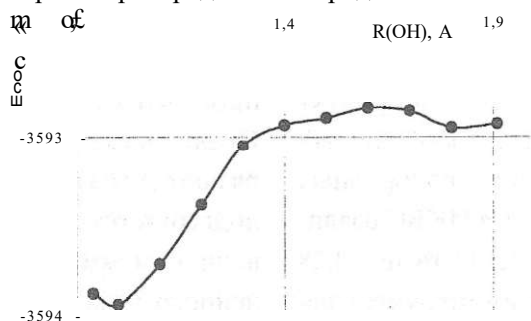


Рис.5. Профиль ППЭ протонного переноса в КВС I с ДЭА

То же самое относится и к величинам активационных барьеров, хотя величина r_K для водного раствора ДЭА на порядок превышает такую

величину для ТЭА [6]. Однако диэтиламин, в отличие от триэтиламина, являясь NH-кислотой, способен образовывать с I не только ЛКВС, но и комплексы циклического типа с двумя водородными связями (ЦКВС). Представлялась интересной оценка термодинамической предпочтительности комплексов

линейного и циклического типов, образующихся в системе I-ДЭА. На рисунке 6 приведена геометрия ЦКВС I с ДЭА, установленная методом UNF AM 1. Полная энергия данной структуры молекулярного типа получилась равной $E_{\text{total}} = -3593,66558$ эВ, тогда как полная энергия для ЛКВС составила $E_{\text{total}} = -3593,88760$ эВ.

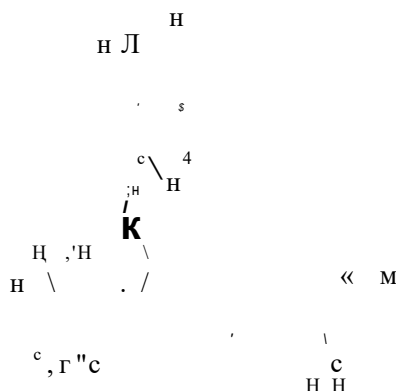


Рис.6. Структура циклического КВС продукта протолиза в системе I - ДЭА

Из этих данных видно, что молекулярный комплекс линейного типа и система I- ДЭА на величину 21,318 кДж/моль энергетически стабильнее, чем ЦКВС. Связи ОН и NH, образующие ЦКВС, не являются компланарными и лежат практически в ортогональных плоскостях. Расстояние между гетероатомами в ЦКВС составило величину $R(\text{OH}\dots\text{N})=3.47 \text{ \AA}$. Отсюда можно предположить, что стерические препятствия в системе I- ДЭА являются более сильными в случае образования ЦКВС, и, благодаря этому, образование линейных комплексов в рассматриваемой системе является энергетически наиболее предпочтительным.

К аналогичным реакциям быстрого протонного переноса и протонного обмена с триэтиламином и с диэтиламином способен также и семихинонный радикал II. В данной работе была также предпринята попытка квантово-химического анализа профилей ППЭ реакции протонного переноса от II к ТЭА, в зависимости от фиксированной длины водородного мостика в линейном КВС, образуемом между реакционными партнерами. На рисунке 7 представлены расчетные данные профилей ППЭ вышеназванной реакции, оцененные в рамках квантово-химического приближения UHF AM 1.

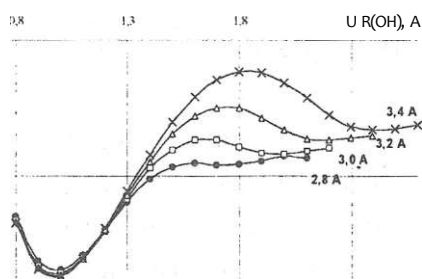


Рис.7. Профили ППЭ реакции протонного переноса от II к ТЭА

молитический перенос атома водорода оксигруппы II к молекуле ТЭА. Из диаграммы видно, что II при таком процессе диссоциации превращается в хинон, а вместо аммониевого катиона образуется радикал $\text{HN}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$. Столь существенное различие между расчетными данными и ЭПР-спектроскопическими результатами, полученными в среде

толуола, которые отчетливо демонстрируют отрыв именно протона от II, объясняется тем, что в настоящей работе рассчитываются взаимодействия между двумя изолированными молекулами, относящиеся к гипотетической газовой фазе, т.е. без учета межмолекулярных взаимодействий, присущих для жидкофазной систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кларк Т. Компьютерная химия. - М.: Мир. - 1990,- С.384.
2. Пустолайкина И.А. Автореферат к канд.дис. Электронное строение и протолитические реакции оксирадикалов. - Караганда. - 1997.- С.16-18.
3. Масалимов А.С., Пустолайкина И.А. Одноэлектронный подход к проблеме протолиза. - Сб.науч.т-р."Синтез, превращения и свойства синтетических, природных органических полимеров."- Караганда, - 1998. - С.57-63.
4. Соколов Н.Д. Водородная связь. - М,- Наука.-1981.- С.212-251.
5. Денисов Е.Т. Кинетика гомогенных химических реакций. - Москва: - Выс. школа. -1988,- С. 314-360.
6. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. - М.: - Мир,-1976,-С. 157-178.

УДК 66.08.001.5

СОРБЦИЯ КАТАЛАЗЫ НА КАРБОКСИЛЬНЫХ КАТИОНИТАХ

i

Г.А. Бектенова, Е.А. Бектуров

Институт химических наук им.А.Б.Бектурова

Жұмыстар Нбагымына *P.vitale* сорбция каталазаны? тәуелділігімен ішкі ертіңде концентрациясы және ферменттің карбоксиметил-целлюлозана (КМ-ц), және синтетикалық карбоксильді катиониттердің КБ-4П-2 оған қоса полимелі гидрогельдердегі ионогенлі карбоксильді топтардың құрандасы туралы зерттелінді.

В настоящей работе исследовалась зависимость сорбции каталазы P.vitale от времени рН и концентрации внешнего раствора и фермента на карбоксиметил-целлюлозе (КМ-ц), синтетических карбоксильных катионитах КБ-4П-2 и биосорб Т-12 (биокарб) и полимерных гидрогелях, содержащих ионогенные карбоксильные группы.

In the given work the dependence of a sorption of catalase P.vitale on time рН and concentration of choronomic solution and enzyme on carboxymethyl cellulose. (КМ - if), synthetic carboxylic kationites КБ-4П-2 and biosorps Т-12 (biocarbs) and polymer hydrogels keeping ionogenic carboxylic groups was studied.

При теоретическом рассмотрении сорбционного равновесия белка между ионитом и внешним раствором [1] было показано, что максимумы сорбции на слабокислотных и слабоосновных ионитах, в отличие от сильнокислотных и сильноосновных, находятся в области рН, где белок полностью сохраняет свою нативную конформацию. Поэтому данные иониты представляют наибольший интерес для ионообменной

очистки и иммобилизации ферментов. В связи с этим нам представлялось интересным провести сравнительное изучение сорбционного поведения белков на различных слабокислотных карбоксильных катионитах с гидрофильной матрицей. С этой целью в настоящей работе исследовалась зависимость сорбции каталазы *P.vitale* от времени, рН и концентраций внешнего раствора и фермента на карбоксиметил-целлю-

лозе (КМ-ц), синтетических карбоксильных катионитах КБ-4П-2 и биосорб Т-12 (биокарб) и полимерных гидрогелях, содержащих ионогенные карбоксильные группы [2]. Карбоксиметил-целлюлоза имеет гидрофильную полисахаридную матрицу, гидрофильность же остальных гелевых сорбентов достигается за счет частой «посадки» ионогенных карбоксильных групп. Полученные экспериментальные результаты представлены на рисунках 1-4.

Как видно из рисунка 1, максимумы сорбции каталазы на карбоксильных катионитах находятся при рН 4,0 для КМ-целлюлозы, при рН 4,5 для катионита КБ-4П-2 и при рН 4,0-5,0 для биосорбта Т-12, что согласуется с константами ионизации карбоксильных ионогенных групп. Расширение максимума сорбции и десорбции на биосорбе может быть вызвано тем, что сорбция идет более чем по одному типу участков связывания или изменением состояния ионита при изменении рН. Очень характерная в этом отношении зависимость была получена для каталазы *Asp. niger* при сорбции на катионите КБ-4П-2 (рисунок 2). Здесь имеются два максимума сорбции при рН 4,5 и 5,5. Появление второго максимума сорбции при рН 5,5, вероятно, связано с конформационным изменением матрицы ионита (цепей поли-

метакриловой кислоты) при этом рН [31], когда ионит становится более проницаемым для сорбата, и в результате экспериментально достигается уровень сорбции повышается.

Во всех случаях, представленных на рисунках 1,2, кажущееся увеличение сорбции при уменьшении рН связано с инактивацией фермента в кислой области рН (рН<4,0). С помощью контрольных опытов было показано, что при рН>4,0 инактивация фермента практически отсутствует. Следовательно, некоторое несоответствие между сорбционными и десорбционными кривыми объясняется необратимостью процесса.

Изучение зависимости сорбции каталазы от концентрации фонового буферного раствора (рисунок 3) показало, что полученные экспериментальные зависимости согласуются с теоретически предсказываемыми, из которых следует, что с увеличением концентрации буферного раствора коэффициент распределения белка между ионитом и внешним раствором должен уменьшаться. Следует отметить также, что при сорбции каталазы на биосорбе Т-12 в динамических условиях удалось достигнуть значительного концентрирования ферментного раствора: в самой активной фракции каталазная активность была в 100 раз выше исходной.

Рисунок 1.

Зависимость сорбции (1) и десорбции (2) каталазы *P.vitale* на биосорбе Т-12 (а), КБ-4П-2 (б) и КМ-целлюлозе (в) от рН 0,1 М фосфатного буфера при 25°C рН десорбции 7,00-7,50. Начальная концентрация фермента ($БСА_{исх.}$) 173 Е/мл, 150 Е/мл и 129 Е/мл соответственно.

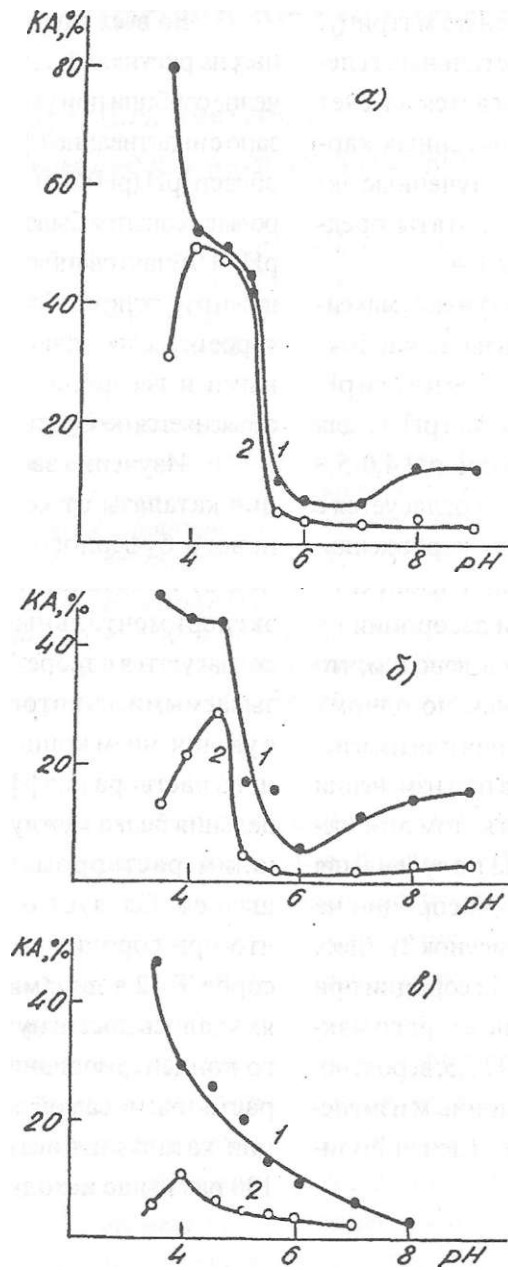
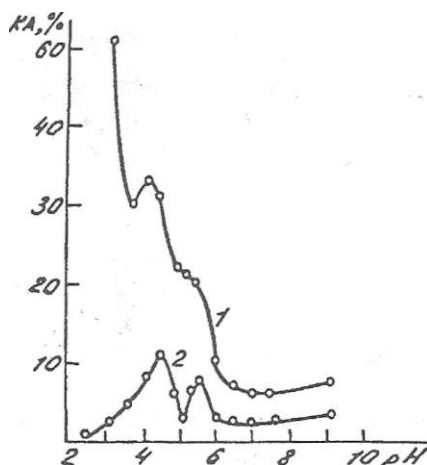


Рисунок 2.

Зависимость сорбции (1) и десорбции (2) каталазы *Asp.niger* на карбоксильном катионите КБ-4П-2 от рН 0,1 М фосфатного буфера $K = 15$ Е/мл, рН десорбции 7,40. 1 г, размер зерен 0,2-0,3 мм.



» Рисунок 3.

Зависимость сорбции (1,2,3) и десорбции (4,5,6) каталазы *P.vitale* на карбоксильных катионитах от концентрации фосфатного буферного раствора 1,4 - КМ-целлюлоза (рН сорбции 4,00; $KA_{исх} - 135$ Е/мл), 2,5 - КБ-4П-2 (рН сорбции 4,50; $KA_{исх} = 188$ Е/мл) и 3,6 - биосорб Т-12 (рН сорбции 4,50; $KA_{исх} - 172$ Е/мл). Навеска сорбента 1 г; объем раствора 50 мл; рН десорбции 7,00-7,50; температура 25°C.

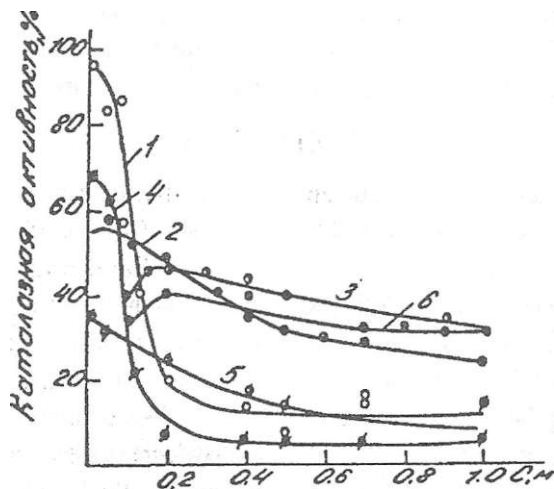
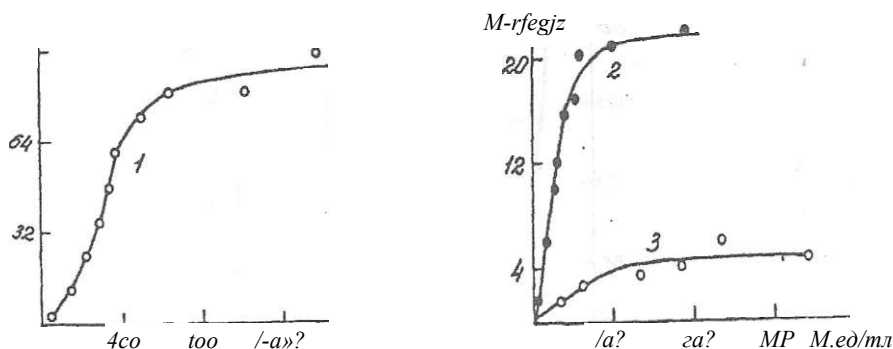


Рисунок 4.

Изотермы сорбции каталазы *P.vitale* на карбоксильных катионитах из 0,1 М фосфатного буферного раствора при 25 °С

1. биосорб Т-12; рН сорбции 4,50;
2. КБ-4П-2; рН сорбции 4,50;
3. КМ-целлюлоза; рН сорбции 4,00.



Сорбционные емкости карбоксильных катионитов, полученные из изотерм сорбции (рисунок 4), сильно различаются. Для КМ-целлюлозы количество сорбированного фермента в состоянии, близком к насыщению, составляет 5000 Е/г сорбента, для КБ-4П-2 - около 24000 Е/г, для биосорбта - около 88000 Шг, что в пересчете на вес чистого фермента равно 0,125 мг/г, 0,6 мг/г и 2,3 мг/г сорбента соответственно. Полученная ошосигельновысокая емкость сорбциинабиосорбеподтвер>кляегданные Г.В.Самсонова с сотрудниками о преиму-

ществах макропористых ионитов /4-6/.

Таким образом, полученные экспериментальные данные по зависимости сорбции каталазы *P.vitale* на карбоксильных катеонитах от времени, рН, концентрации буферного раствора и фермента показали, что лучшими сорбционными характеристиками обладает синтетический карбоксильный катионит биосорб Т-12 (биокарб), специально синтезированный для сорбции белков, который может с успехом использоваться для хроматографии белков и ферментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бектенова Г.А., Гладышев П.П., Бейуров Е.А. // Деп. В КазгосИН-ТП, 9.03.2000, № 8762-КаОО.
2. Бектенова Г.А. // Изв. МОНРК, НАЛРК. Сер. хим. -2001, № 3. -С.82-90.
3. Либинсон Г.С. Физико-химические свойства карбоксильных катионитов. -М.: Наука, 1969.-112 с.
4. Дмитренко П.В., Островский Д.И., Самсонов Г.В. // 2 Всес. симп. по термодинамике ионного обмена. - Тезисы докл.-Минск, 1975.-С.4243.
5. Самсонов Г.В., Меленевский А.Т. Сорбционные и хроматографические методы физико-химической биотехнологии. -Л.: Наука, 1986. - 230 с.
6. Samsonov G.V., Kuznetsova N.P. // In Polydectrolytes, Hydrogds, Chromatographic Materials. - Berlin-Heidelberg-New York: Springer-Verlag, 1992.-Vol.104.-P.1-49.

УДК 539.26+546.34

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ХРОМИТОВ ЛАНТАНА И ЕВРОПИЯ, ЛЕГИРОВАННЫХ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

Е.С. Мустафин, Ш.Б. Касенова, Б.К. Касенов,

И.М. Оскембеков, М.А. Акубаева

Института фитохимии МОН РК

Аталған мақалада La (III), Еу (III), Cr (III) мен оксидтерінің стехиометриялық сандарының қатты фазалық синтезінің әдістемесі мен Mg, Ca, Ba карбонаттарынан LaMgCr₂O₅, LaBaCr₂O₅ және EuCaCr₂O₅ хромиттері құралдары ұсынылады. Олардың тепе-теңдік құрамының қурылымы рентгенструктуралық анализ әдісімен расталады.

В данной статье представлен метод твердофазного синтеза из стехиометрических количеств оксидов La (III), Еу (III), Cr (III) и карбонатов Mg, Ca, Ba получены хромиты составов LaMgCr₂O₅, LaBaCr₂O₅ и EuCaCr₂O₅. Образование их равновесного состава подтверждено методом рентгеноструктурного анализа.

In the given article the method of solidphased synthesis from stoichiometric amounts of oxides of La (III), Еу (III), Cr (III) and carbonates Mg, Ca, Ba is presented the chromites of structures LaMgCr₂O₅, LaBaCr₂O₅ and EuCaCr₂O₅ are obtained. The formation of their equilibrium composition is affirmed by the method of X-ray crystallographic analysis.

В предыдущих наших работах [1-3] исследованы рентгенографические и термодинамические характеристики манганитов состава LnMeMn₂O₅, где Ln - лантаноид, Me - щелочноземельный металл. Определенный теоретический и практический интерес с точки зрения неорганического материаловедения

представляет синтез и исследование свойств соединений состава LnMeMn₂O₅, где Mn (III) заменены на Cr (III). В связи с этим целью настоящей работы является синтез и рентгенографическое исследование фаз LaMgCr₂O₅, LaBaCr₂O₅ и EuCaCr₂O₅.

Исходными реагентами для

синтеза служили Cr_2O_3 квалификации «х.ч.» карбонаты магния, кальция и бария «ч.д.а.» и оксиды лантана (III), европия (III) марки «ос.ч.». Стехиометрические количества компонентов перемешивали и отжигали при 1200°C в течение 20 часов. Низкотемпературный отжиг проводили при 400°C . Образование новых фаз подтверждено методом рентгенофазового анализа на дифрактометре

в среде индифферентной жидкости был взят толуол. Ниже в таблице приведены результаты индицирования.

ДРОН-2,0 при Si K_α -излучении. Интенсивность дифракционных максимумов оценивали по стобальной шкале относительно самой высокой интенсивности. Рентгенограммы полученных фаз индицировали методом гомологии [4]. Гомологом служил структурный тип перовскита. Пикнометрическую плотность фаз определяли по методике [5]. В каче-

Таблица

Индицирование рентгенограмм порошка $\text{LaMgCr}_2\text{O}_7$ (I), $\text{LaCaCr}_2\text{O}_7$ (II), $\text{LaBaCr}_2\text{O}_7$ (III) и $\text{EuCaCr}_2\text{O}_7$ (IV)

$\lambda/\text{Å}$	$D, \text{Å}^\circ$		hkl	I/I_0
1	2	3	4	5
I				
8	5,444	337,4	112	342,3
8	4,859	423,6	210	415
19	3,895	659,2	220	664
15	3,51	811,7	213	811,7
8	3,169	996	312	1006
6	2,945	1153	303	1144
6	2,902	1187	105	1185
1	2	3	4	5
100	2,753	1319	400	1328
17	2,510	1587	006	1587
21	2,242	1989	216	2002
9	2,175	2114	414	2116
7	2,148	2167	007	2160
9	2,084	2303	117	2326
34	1,943	2649	440	2652
9	1,937	2665	326	2666
8	1,606	3877	328	3900
32	1,584	3986	219	3997
14	1,372	5312	800	5312

II				
14	3,869	668	220	666
14	3,625	761	213	760
71	2,740	1332	400	1332
100	2,691	1381	006	1377
16	2,234	2004	423	2009
16	2,200	2066	500	2081
22	1,937	2665	440	2664
31	1,902	2764	523	2758
17	1,582	3996	1.1.10	3994
26	1,558	4120	701	4117
12	1,370	5328	800	5328
12	1,347	5511	0.0.12	5511
III				
18	3,976	633	203	612
25	3,881	664	220	664
36	3,514	810	310	830
19	3,401	865	105	860
25	2,895	1193	322	1193
100	2,747	1325	400	1328
21	2,242	1989	008	1989
30	2,171	2122	405	2105
28	2,148	2167	510	2158
36	1,943	2648	440	2656
7	1,737	3314	620	3320
14	1,708	3428	445	3433
26	1,588	3966	536	3941
9	1,565	4083	2.0.11	4092
9	1,380	5251	0.0.13	5251
18	1,372	5312	800	5312
IV				
36	5,444	337	200	342
50	3,830	682	220	684
100	3,630	759	300	769
40	3,536	800	301	801
33	3,431	850	310	855
50	2,753	1319	116	1302
26	2,586	1495	402	1494
14	2,290	1,907	325	1897
24	2,230	2011	008	2011

Как видно из данных таблицы, удовлетворительное согласие опытных и расчетных значений ρ/ρ^0 показывает достоверность результатов индирования. На основании индирования рентнограмм синтезированных хромитов установлено, что все они кристаллизуются в тетрагональной сингонии со следующими параметрами решетки: $\text{LaMgCr}_2\text{O}_{5.5}$ - $a=10,98$, $c=15,06$ д, $V^0=1814,7$ д³, $Z=16$, $V^0_{\text{яч}}=113,4$ д³, $\rho_{\text{рент.}}=5,19$, $\rho_{\text{пикн}}=5,16\pm 0,04$ г/см³; $\text{LaCaCr}_2\text{O}_{5.5}$ - $a=10,96$, $c=16,17$ д, $V^0=1941,7$ д³, $Z=16$, $V^0_{\text{суб.яч.}}=191$ л⁰ з ат $5,02\pm 0,05$ г/см³; $\text{LaBaCr}_2\text{O}_{5.5}$ - $a=10,97$, $c=17,94$ д, $V^0=2161,0$ д³, $Z=16$, $V^0_{\text{суб.яч.}}=135,1$ д³, $\rho_{\text{рент.}}=5,77$, $\rho_{\text{пикн}}=5,61\pm 0,21$ г/см³; $\text{EuCaCr}_2\text{O}_{5.5}$ - $a=10,81$, $c=17,84$ д, $V^0=2085,0$ д³, $Z=16$, $V^0_{\text{суб.яч.}}=130,3$ д³, $\rho_{\text{рент.}}=4,97$, $\rho_{\text{пикн}}=4,85\pm 0,14$ г/см³.

Удовлетворительное согласие значений рентгеновских и пикнометрических плотностей также

указывает на корректность полученных результатов. Из вышеприведенных данных видно, что в ряду $\text{Mg}(\text{O}|\text{Ca}|\text{O}|\text{Ba})$ с увеличением их ионных радиусов увеличиваются значения параметров «с» и объемы как элементарных ячеек, так и объемы суб. ячеек.

На основании рентгенографического исследования можно предположить, что исследуемые хромиты имеют пр. группу перовскита Рш 3т и согласно [6] можно полагать, что ионы La^{3+} и Eu^{3+} находятся в центре элементарной ячейки и имеет координационное число по кислороду, равное 12, а в узлах элементарных ячеек находится ион Cr^{3+} , координационное число которого по кислороду равно 6.

Таким образом, впервые синтезированы хромиты $\text{LaMgCr}_2\text{O}_{5.5}$, $\text{LaCaCr}_2\text{O}_{5.5}$, $\text{LaBaCr}_2\text{O}_{5.5}$ и $\text{EuCaCr}_2\text{O}_w$ определены типы их сингонии и параметры элементарной ячейки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мустафин В.С., Матаев М.М., Нурғалиев Б.З., Касенов Б.К. Рентгенографическое исследование $\text{GdBaMn}_2\text{O}_5$ // Неорганические материалы. - 1994. - Т. 30. - № 1. - С. 140.
2. Мустафин В.С., Оралова А.Т., Касенов Б.К. Теплоемкость и термодинамические функции $\text{GdBaMn}_2\text{O}_{5.5}$ в интервале 298,15-673К // Неорганические материалы. - 1994. - Т. 30. - № 6. - С. 1863-1864.
3. Оралова А.Т., Мустафин В.С., Касенов Б.К. Теплоемкость и термодинамические функции $\text{LaCaCr}_2\text{O}_{5.5}$ в интервале 298,15-673К. // Неорганические материалы. - 1996. - Т. 32. - № 1. - С. 124-125.
4. Ковба Л.М. Рентгенофазовый анализ. - М.: Изд-во МГУ, 1976. 256 с.
5. Кивилис С.С. Техника измерения плотностей жидкостей и твердых тел. - М.: Стандартиз. - 1956. 191с.
6. Вест А. Химия твердого тела. Ч. 1. М.: Мир, 1988. 588 с.

УДК 666.08.004.11

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КАРБОМИНЕРАЛЬНЫХ СОРБЕНТОВ И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИХ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОДЫ

З.А. Мансуров, Г.К. Тажкенова*,

Р.М. Мансурова, Р.Ш. Еркасов*

** Евразийский государственный университет
им. Л. Н. Гумилева, Институт проблем горения*

Мақалада карбонизация түзілісіндегі кинетика урдісі қарастырылып, зерттеу нәтижелері ұсынылады. Жүргізілген зерттеулер кезінде карбониздік тиімділік үлгісі сорбенттер екендігі дәлелденді.

В статье представлены результаты исследований, изучена кинетика процесса карбонизации тростника. Проведенные исследования показали, что изученные карбонизированные образцы являются наиболее эффективными сорбентами.

In the article the outcomes of studies are presented, the kinetics of the process of carbonization of cane is studied. The conducted studies have shown, that the studied carbonated samples are the most effective sorbents.

Рациональное использование водных ресурсов является одной из актуальных задач экологии, в решении которых большая роль отводится очистке сточных вод различных производств. Как известно, очистные сооружения не обеспечивают очистку сточных вод предприятий от ионов тяжелых металлов до значений их ПДК. Поэтому необходима доочистка сточных вод различными способами, сре-

ди которых большое место занимают сорбционные методы.

Глины уже сравнительно давно применяются для улучшения процесса выделения примесей тяжелых металлов из воды. Известно [1], что частички монтмориллонита, каолинита и других слоистых силикатов имеют два типа поверхностей: базальные грани, заряженные в водной среде отрицательно, и боковые грани с участ-

ками, заряженными как отрицательно ($=\text{SiO}-\text{H}^+$), так и положительно ($=\text{АГ ОН}$).

В результате поиска новых способов получения адсорбентов для очистки сточной и питьевой воды сотрудники Института проблем горения создали эффективные (по статической объемной емкости превышающие известные аналоги на основе бентонитовой, вермукилитовой глин в 2 раза) дешевые углерод-минеральные сорбенты на основе Чиликской, Нарынкольской, Сарыузекской глин. На основании результатов исследований, проведенных в лаборатории гибридных технологии, дано физико-химическое обоснование применения углеродсодержащих сорбентов - модифицированных углеродом глин для интенсификации осаждения ионов тяжелых металлов из промышленных сточных вод.

Было установлено, что в зависимости от состава минерального сырья могут быть получены углеродсодержащие сорбенты многофункционального назначения. Синтезированные дешевые углеродсодержащие композиции сочетают основные достоинства минеральных сорбентов и активных углей: высокую механическую прочность, гидрофобность, развитую систему пор и высокую удельную адсорбционную поверхность /2-5/.

Установлено, что Тонкериская глина Акмолинской области име-

ет следующий усредненный состав SiO_2 -53.1%; Al_2O_3 -18.1%; Fe_2O_3 -6.39%; CaO -1.04%; MgO -3.75%; Na_2O -1.30%; K_2O -1.39%; SO_2 -0.14%; H_2O -8.44%; п.п-7,0%.

Наличие в глине металлов переменной валентности говорит о том, что синтез каталитического углерода на поверхности глины будет протекать в мягких условиях и должен образоваться углеродсодержащий сорбент с высокими сорбционными характеристиками и хорошими физико-механическими параметрами, что доказано расчетами изобарно-изотермических потенциалов реакции зауглероживания природного минерального сырья и энергиями активации [6,7].

Формирование углерод-минеральных сорбентов на основе Тонкериской глины проводилось в режиме пиролиза пропан-бутановой смеси в зависимости от температуры, скорости подачи газа и времени контакта [8].

Кинетика зауглероживания Тонкериской глины и процесса карбонизации тростника (КТ) изучалась на проточной установке в интервале температур 600-800°C при времени контакта 5-60 мин и скорости подачи газа (пропан-бутановой смеси) $3,510^3 - 5,210^3 \text{ м}^3/\text{час}$ / 8,9/. В данной работе будет уделено внимание процессу получения карбонизованного сорбента из тростника и определению его сорбционных свойств. На рисунке 1 приведена зави-

симось потери массы от температуры процесса. Из этой зависимости видно, что основная потеря массы происходит до температуры 650°C, при 700°C потеря массы составляет 72-75%,

$\frac{f}{2} \propto$

0 200 400 600 800 1000
T, °C

Рисунок 1. Зависимость потери массы углерода от температуры карбонизации тростника

Кинетика процесса карбонизации тростника изучена ИК - спектроскопическим методом. Измерения ИК-спектров исследуемых образцов проводили на ИК-спектрометрах UR-20 и "Mattson" (USA) с преобразователем Фурье в виде таблеток, спрессованных с КВг (рис. 2.3).

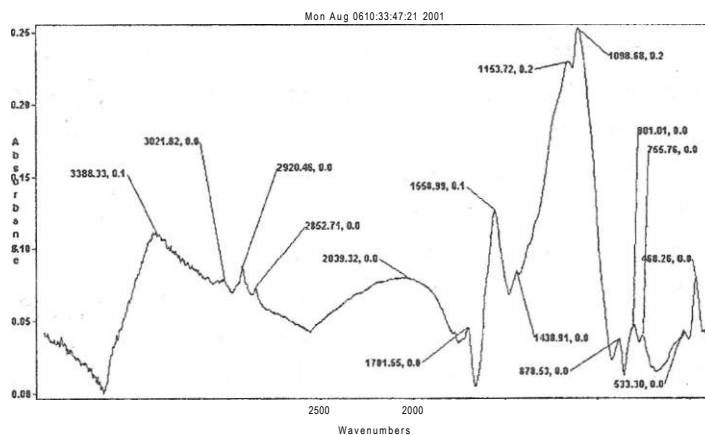
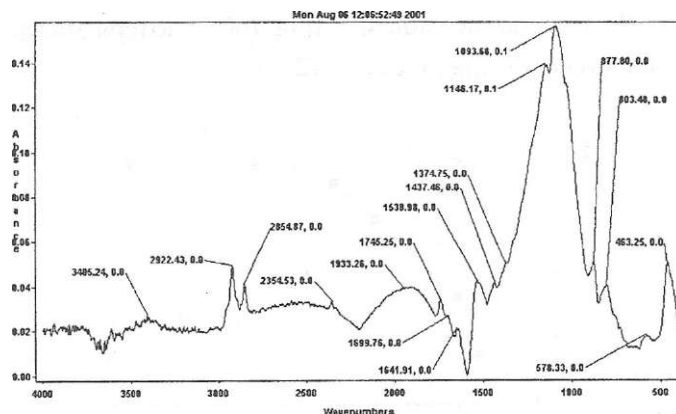


Рисунок 2. ИК спектр карбонизованного сорбента на основе тростника



В ИК- спектре карбонизованного тростника (КТ), полученного при 800°C наблюдаются интенсивные полосы поглощения при 1374 и 1437 см⁻¹, которые соответствуют характеристическим полосам поглощения валентных колебаний С-Н ароматического кольца. Таким образом, в спектре КТ имеются интенсивные характеристические полосы, отвечающие колебаниям С-Н групп ароматического кольца. При сравнении спектров КТ и ЗВК видно, что в спектрах КТ отсутствуют полосы 3438,39,01 и 3093,28,00 см⁻¹, соответствующие колебаниям NH₂, OH и CH₃(as) ароматического кольца. Исследования, проведенные на спектрометре "Mattson", показали, что в спектре КТ в области наблюдаются характеристические полосы 2922.43.0.0 см⁻¹ и 2852.45.0.0 см⁻¹, относящиеся к колебаниям симметричных и асимметричных CH₂

групп. В области 1374.75.0.0 см⁻¹ - CH₃ и 1318.69.0.2 см⁻¹ -CH₂ групп, 1243.78.0.2 см⁻¹ и 1158.72.0.2 см⁻¹ полосы поглощения COOR, в области 1093.68.0.1 и 1146.17.0.1 см⁻¹ --C-o-C-.

При карбонизации КТ при температурах 600-800 °С произошел резкий спад интенсивности характеристических полос С=O групп (в 10 раз). Произошло уменьшение интенсивности характеристических полос С-О-С групп. Таким образом, спектр карбонизованного сорбента на основе тростника отличается от спектра на основе виноградных и абрикосовых косточек. Необходимо отметить так же, что в процессе карбонизации тростника не выделяется большое количество резко пахнущих летучих жидких продуктов.

Спектры ЭПР карбонизованных образцов снимали в интервале температур зауглероживания 650-800°C. Метод ЭПР позволяет регист-

ривать парамагнитные центры, т.е. частицы, обладающие неспаренным спином (электроном). Или могут быть свободные радикалы. При увеличении температуры процесса происходит уменьшение интенсивности сигнала ЭПР (рисунок 4). При температуре 800°C амплитуда сигнала падает в 1,5 раза по сравнению с максимальной при температуре 750°C.

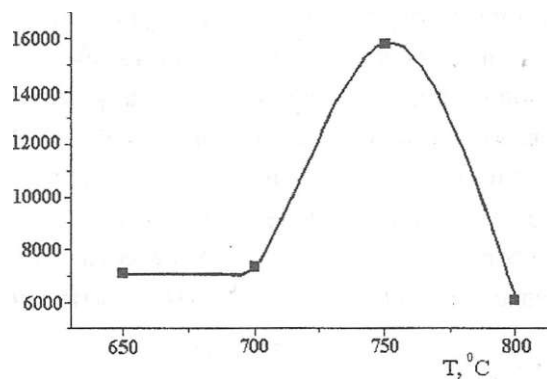
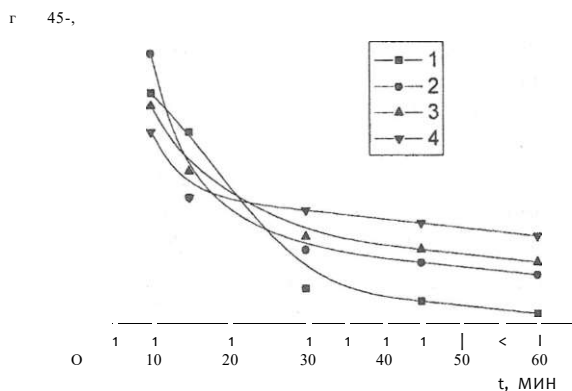


Рисунок 4. Зависимость интенсивности сигнала магнитного резонанса от температуры зауглероживания КТ

Была исследована питьевая вода города Астаны, в составе которой обнаружено большое содержание ионов кадмия, свинца, никеля, меди (мкг/мл): Co - 0,073, Ni - 0,013, Fe - 0,32, Си - 0,002, Zn - 0,035, Cd - 0,005.

Карбонизованные сорбенты использовались для поглощения ионов кобальта из водопроводной воды г. Астаны. На рисунке 5 приведены данные поглощения ионов кобальта синтезированными при различных температурах сорбентами.



1 - 650°C; 2 - 700°C; 3 - 750°C; 4 - 800°C

Рисунок 5. Кинетика сорбции ионов кобальта на КТ

Таким образом, в результате проведенных исследований изучена кинетика процесса карбонизации тростника. Установлено, что карбо-минеральные сорбенты в режиме пропан-бутановой смеси могут быть использованы для очистки промышленных сточных вод от ионов тяжелых металлов. Проведенные исследования показывают, что изученные карбонизованные образцы являются наиболее эффективными сорбентами.

Как следует из данных о кине-

тике сорбции, большая часть ионов кобальта сорбируется уже в течение первых 5-20 мин контакта с растворами.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан, грант получен по теме: «Многофункциональные сорбенты для очистки питьевой и технической воды».

Авторы выражают благодарность к.ф-м.н. Ю.А.Рябикину и А.Д.Сергазиеву за измерение ИК и ЭПР спектроскопии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мансурова Р.М. Физико - химические основы синтеза углеродсодержащих композиций. - Алматы: XXI век, 2001. - 180 с.
2. Ахметова Ж.Т. Термокаталитический синтез углеродминеральных систем, использование их в качестве сорбентов // Канд. дисс., Алматы, 1999,- 119 с.
3. Рябикин Ю.А., Мансурова Р.М., Зашквара О.В. ЭПР - спектроскопическое исследование углеродсодержащих композиций. // Вестник КазГУ, серия химическая № 3 (20) 2000г, г. Алматы. - С. 165-182.
4. Мансурова Р.М., Рябикин Ю. А., Ахметова Ж.Т., Мансуров З. А. ЭПР - спектроскопическое исследование углеродсодержащих сорбентов. / ЖФХ, № 10,2001.- С. 1748-1752.
5. Г. К. Тажкенова*, Ж.Т. Ахметова, Сыдыков А.О., Канытбек - улы Максат., Биисенбаев М.А., Р. М. Мансурова., Р. Ш. Еркасов. Углеродминеральные сорбенты для поглощения ионов Fe^{2+} , Co^{2+} , Cd^{2+} , Ni^{2+} , Pb^{2+} , Zn^{2+} // Материалы международной конференции по аналити-
- ческой химии, посвященной 100-летию со дня рождения член-корр. НАН РК О.А. Сонгиной.
6. Д.Г. Васильев, М.Х.Сыдыков, Н.К.Жылыбаева, Г.К.Тажкенова Новые углеродсодержащие сорбенты для поглощения ионов тяжелых металлов // Вестник КазГУ, Серия химическая.-№2(22).-Алматы,2001.-С.-319-320.
- 7.Н.К.Жылыбаева., Г.К.Тажкенова., Р.М.Мансурова. Карбонизованные сорбенты на основе абрикосовых косточек // Вестник КазГУ, Серия химическая.-№2(22).-Алматы,2001.-С.-109-111.
8. Р.М. Мансурова. Химия, химическая технология //Современные проблемы 2000, КазГУ, Алматы, 2001,-С. 152-176.
9. Мансурова Р.М. Жубанова А.А., Каирманова Г.К.,Уалиева П.С. Сорбция дрожжевых клеток на нативных и зауглероженных носителях на основе виноградных косточек и скорлупы грецких орехов // Ж. Биотехнология. Теория и практика - 2000, № 1-2 (13)-С. 74-78.

УДК 549.21.004.14 (574)

НОВЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ В ОБЛАСТИ НАУЧНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ И ПРАКТИЧЕСКОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КАЗАХСТАНСКОГО ШУНГИТА

**С.В. Ефремова, С.А. Ефремов, О.Е. Лебедева,
Л. Онгарбаева, Ж.А. Тайсереква**

*Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
Центр физико-химических методов анализа КазНУ
им. аль-Фараби*

Мақалада ғылыми бағдарлама өлііемінің жумыс нәтижесінде жергілікті шунгыттарды пайдалану мүмкіндіктері резиналық қосындыларды тольцтыру сапасында электротермилік өндіріс үшін кеіенді ишкізат есебінде, шунгыт сорбенттерді даярлаудан алынған алғашқы нәтижелері қарастырылады.

В статье в результате работы в рамках научных программ показана возможность использования местных шунгитов в качестве наполнителей темных резиновых смесей в как комплексного сырья для электротермических производств, получены первые результаты по приготовлению шунгитовых сорбентов.

In the article as the result of scientific programs work the possibility of using local shunghits as fillers dark rubber mixtures as complex raw material for electrothermal manufactures is shown, first results of shunghit sorbents production are presented.

До сих пор в печати продолжает появляться информация [1, 2] о том, что единственное в мире месторождение шунгита находится на территории России, а именно в Карелии. В связи с этим необходимо напомнить, что углеродный матери-

ал, похожий на карельский шунгит, был обнаружен на территории Казахстана [3]. Мы работаем с ним на протяжении нескольких лет. В ходе сравнительного изучения местного углеродного вещества (месторождение «Большевик», Восточно-Казах-

станская область) с карельскими шунгитами и рядом других известных углеродных материалов была подтверждена его принадлежность к классу шунгитов, несмотря на некоторые структурные различия между карельским и казахстанским шунгитами, и, напротив, близость структуры последнего со структурами, например, сажи и кокса [4, 5]. (Следует заметить, что сами карельские шунгиты весьма различны как по структурному состоянию, так и по надмолекулярной организации [6]).

Наши шунгиты, как и карельские, в природе залегают в виде толщ шунгитовых пород, представляющих собой уплотненную механическую смесь углеродной и минеральных компонентов разного состава. Сравнительно большая их часть находится в отвалах в виде отходов после обогащения полиметаллических руд. Содержание шунгита в пластах и отвалах варьирует от нескольких процентов до 25-30%, местами превышает 50%. Основу минеральной части составляют кварцит и различные алюмосиликаты. Ввиду этого породы характеризуются разнообразием физико-механических и химических свойств, что, наряду с метастабильностью структуры шунгитового углерода, создает предпосылки для оп-

ределения ряда направлений в области научных исследований и практического применения рассматриваемых пород.

На данном этапе выбор направлений научно-исследовательских работ во многом определяется состоянием дел в промышленности. Растущие потребности определяют обновление выпускаемых видов продукции, а постоянная необходимость снижения затрат в производстве влечет за собой обновление сырьевой базы. Все более актуальной задачей экономического развития различных стран мира становится рациональное использование природных ресурсов, создание безотходных технологий и производств. В этой связи в последнее десятилетие существенное изменение претерпело отношение к отходам. С точки зрения рационального природопользования промышленные отходы являются вторичными материалами ресурсами. Отходы, не востребованные «своей» отраслью промышленности, часто представляют ценное сырье для других отраслей. Утилизация отходов и получение вторичных материалов стала в мире видом деятельности, приносящим многомиллионные прибыли и отличающимся высокими темпами роста. [7]. Однако у нас в стране пе-

переработка отходов еще не достигла масштабов массового производства.

Нами в результате работы в рамках научной программы «Физико-химические основы анализа новых материалов из минерального сырья Казахстана» и межотраслевой научно-технической программы "Создание и опытно-промышленное освоение технологий производства остро дефицитных химических продуктов и реактивов из отходов и промпродуктов химических и металлургических производств" показана возможность использования местных шунгитов в качестве наполнителей темных резиновых смесей [4, 8], в качестве комплексного сырья (углеродминеральных брикетов) для электротермических производств [5, 9], получены первые результаты по приготовлению шунгитовых сорбентов [10]. При апробировании шунгитового сырья в различных технологических процессах мы не ставили целью комплексную переработку шунгитовых пород. Преимущественно преобладали работы по разделению пород на углеродную и минеральную, составляющие с последующей заменой дефицитных углеродных материалов шунгитовым веществом. Большая же часть минерального субстрата при этом оставалась практически

не востребованной. В связи с этим было выбрано новое направление - утилизация минеральной части казахстанских шунгитовых пород с целью изучения каталитических свойств и возможности ее использования в качестве носителей при синтезе катализаторов.

Поиск активных и стабильных катализаторов является одним из актуальных вопросов гетерогенного катализа, имеющего место почти в 90 % всех производств нефтеперерабатывающей и химической промышленности [6]. В основе большинства существующих технологий их приготовления лежат методы и приемы, следствием использования которых являются многостадийность, громоздкость оборудования, значительный расход реагентов, появление вредных стоков и т. д. Все это снижает эффективность технологий, противоречит представлениям об экологически чистых катализаторах и заставляет искать новые нетрадиционные подходы. Принимая во внимание требования, предъявляемые к современным катализаторам (высокая активность, избирательность, механическая прочность, термическая стойкость и др.), а также специфику состава и свойств шунгитовых пород и их минеральной части [4,5] можно ожидать про-

явления ими высокой каталитической активности, особенно в реакциях кислотного-основного типа.

В настоящее время наше внимание привлекло еще одно направление в области использования казахстанских шунгитов. Сегодня все чаще стали появляться сведения о целебных свойствах этого минерала. По данным российских и казахстанских врачей [2, 11], различные пасты, мази, настойки на основе шунгита обладают исцеляющим действием на организм человека и могут быть использованы при лечении большого спектра хронических и патологических заболеваний. Идея использования шунгитов в лечебных целях принадлежит школе Санкт-Петербургских медиков и берет свое начало из опыта работы курорта «Марциальные воды» - первого в России курорта, организованного Петром I еще в 1719 году, вода источников которого проходит через мощную толщу шунгита. Использование фильтров из карельского шунгита позволяет не только обеспечивать необходимую чистоту воды, но и искусственно получать минерализованную воду, как питьевую, так и сильно насыщенную косметическую, обладающую противоожоговым, заживляющим, дезинфицирующим действием [2]. Однако, оста-

ется загадкой причина уникальности и оздоровительного эффекта шунгита. Есть предположения [1,2], что лечебные свойства карельских шунгитов и паст продиктованы действием присутствующих в них фуллеренов.

В [12] приводятся сведения о присутствии фуллеренов C_{60} - C_{70} в количестве 0,0001% в карельских шунгитах. Здесь же дается гипотеза образования в них фуллеренов. Нами было опробовано извлечение молекул C_{60} и C_{70} из местных шунгитовых пород с высоким содержанием углерода (более 60 %) методом непрерывной экстракции ксилолом в аппарате Сокслета в течение 24 часов и экстракцией толуолом под действием ультразвука (считается [13], что растворимость фуллеренов в этих использованных экстрагентах довольно высока). В ходе исследования толуольных и ксилольных экстракционных вытяжек с помощью метода ИК-спектроскопии присутствия фуллеренов обнаружено не было. При проведении рентгенографического анализа на рентгенограммах всех исследуемых образцов шунгитовых пород фуллереновые рефлексы также отсутствовали, и, по заключению гл. секретаря РАН Н. А. Плате и д.х.н. Королева Ю.М., во всех природных образцах Казахстан-

ских шунгитовых пород (месторождение «Большевик») рентгенографических количеств фуллеренов C_{60} не обнаружено.

Несмотря на отсутствие фуллеренов, как отмечалось выше, местные шунгиты обладают лечебным эффектом. Вновь возникает вопрос, что является причиной уникальности шунгита, который, с одной стороны, является перспективным сырьем для ряда технологических производств, а с другой, зарекомендовал себя как лечебный минерал. Решение данной проблемы, на наш взгляд, является серьезной задачей именно для химиков. Прежде всего необходимо установить, действительно ли шунгиты являются источником здоровья. С этой целью мы заключили договор о сотрудничестве с ТОО «Лечебные минералы» (директор к.м.н. Бартновский В.И.). Подготовлена партия шунгитового концентрата - потенциального

сырья для получения минерализованной воды, паст, мазей и других лечебных препаратов. В ТОО «Лечебные минералы» на основании Государственной фармакопии (ГФ XI. Вып. 1, стр 165) проведены испытания на содержание мышьяка. Получен отрицательный результат. Направлены образцы шунгитового концентрата в Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова для проведения исследований (на токсичность, острую, хроническую; канцерогенность, противоканцерогенное действие; антимикробное, антибактериальное действие) на животных для выявления возможности проведения последующих клинических исследований в лечебных целях. Начата работа по выявлению возможности приготовления на основе шунгитовых пород минерализованной воды, обладающей лечебным действием, и ее всестороннему исследованию.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рысьев О.А. Шунгит - национальный камень России. - Спб. - 81 с.
2. Дар природы на благо человеку. - 1 городская научно-практическая конференция «Опыт применения минерала шунгит в курортологии»: Сб. докладов конференции (январь 1998 г., Санкт-Петербург).-Спб, 1999.-48 с.
3. Находка шунгита в палеозойских породах Восточного Казахстана / Марченко Л.Г., Лавриенко Л.И., Шибко В.С., Сибирякова Н.Я. // Докл. АН СССР. - М., 1979. - Т. 246, № 2. - С. 455-459.
4. Ефремова С.В. Шунгитовый углерод как заменитель технического углерода при наполнении

- композиционных материалов: Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.х.н. - Алматы, 1999.-30 с.
5. Ефремов С.А. Шунгитовый концентрат - комплексное сырье для электротермических процессов: Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.х.н. - Алматы, 2000. - 30 с.
6. Шунгиты - новое углеродистое сырье. - Петрозаводск: Карелия, 1984. - 183 с.
7. Налти П. Рециркуляция становится большим бизнесом. (Recycling becomes a big business) // «Форчун», 13 августа, 1990. - С. 41-45.
8. Ефремова С.В., Ефремов С.А., Колесников Б.Я. Шунгитовые породы Казахстана - заменитель технического углерода // Труды Межд. симп., посвященного 100-летию со дня рождения К.И. Сатпаева (7-8 апреля 1999г.)// Сб. научн. тр. -Алматы, 1999.-С. 530-533.
9. Ефремов С.А., Колесников Б.Я., Вонгай И.М. Электрическое сопротивление шунгитовых восстановителей для производства фосфора // Вестн. КазГУ. Сер. хим. - Алматы, 2000. - с. 63-67
10. Ефремов С.А., Ефремова С.В., Колесников Б.Я., Приз Е. Получение шунгитовых сорбентов // Материалы межд. конф. по анал. химии, посвящ. 100-летию со дня рожд. чл.-корр. НАН РК О. А. Сонгиной. - Алматы, 2001. - С. 52.
11. Бартновский В.И., Кривушина Л.Е. Коксуские шунгиты - первый опыт применения в классической, альтернативной медицине и защите человека от вредного воздействия аномальных (геопатогенных) зон природного и техногенного происхождения // Вестник качества для предпринимателей, бизнесменов, товаропроизводителей. - Алматы: Госстандарт РК, 1999.-№2.-С 10-12.
12. О фуллереноподобных структурах шунгитового углерода / Зайденберг А.З., Ковалевский В.В., Рожкова Н.Н., Туполев А.Г. //Журнал физической химии, 1996.-Т. 70, № 1.-С. 107-110.
13. Елецкий А.В., Смирнов Б.Н. Фуллерены и структуры углерода // Успехи физ. наук, 1995. - Т. 165, № 9. - С. 977-990.

УДК 536.63+66.021.2+546.87/42

Шу

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВИСМУТИТА СТРОНЦИЯ $SrBi_2O_4$

ШШ

Ж.И. Сагинтаева, М.М. Матаев, М.К. Алдабергенов

Карагандинский государственный технический
университет

Б.К. Касенов

Институт фитохимии МОН РК

Қаттыфазалық тәсілмен $SrCO_3$ стехиометр өліемінен $SrBi_2O_7$ синтезделген рентгенографиялық әдіспен висмут стронция төмендегі өліемдер бойынша кристалданады: $a=12,69\text{Å}$, $V=2043,5\text{Å}^3$, $Z=32$, „Ітсіііі“ 7,56,

$\rho_{\text{тм}} > 40 \pm 0,26 \text{ г/см}^3$ интервалда оның изобарлық жылу өліемдігі зерттелінді; $C_p \sim f(T)$ тәуелді теңсіздігі шығарылды және $S^\circ(T)$, $H^\circ(T) - H^\circ(298,15)$, $\Phi^{**}(T)$ термодинамикалық функциясының температуралық тәуелділігі есептелінді.

Твердофазным способом из стехиометрических количеств $SrCO_3$ и $SrBi_2O_7$ синтезирован $SrBi_2O_7$. Рентгенографическим методом установлено, что висмутит стронция кристаллизуется в кубической сингонии со следующими параметрами решетки: $a=12,69\text{Å}$, $V=2043,5\text{Å}^3$, $Z=32$, „ткм“ 7,56, $\rho_{\text{тм}}=7,40 \pm 0,26 \text{ г/см}^3$. В интервале 298,15-673К исследовано его изобарная теплоемкость, выведено уравнение зависимости $C_p \sim f(T)$ и вычислены температурные зависимости термодинамических функций $S^\circ(T)$, $H^\circ(T) - H^\circ(298,15)$, $\Phi^{**}(T)$.

$SrBi_2O_7$ is synthesized from stoichiometric amounts $SrCO_3$ and $SrBi_2O_7$ with the help of solidphased method. By the X-ray method it is established, that bismutite of strontium crystallizes in cubical syngony with the following parameters of grating: $a=12,69\text{Å}$, $V=2043,5\text{Å}^3$, $Z=32$, „ткм“ 7,56, $\rho_{\text{тм}}=7,40 \pm 0,26 \text{ г/см}^3$. In the interval 298.15-673K its heat capacity at constant pressure is studied, the equation of dependence $C_p \sim f(T)$ is maneuvered and the temperature dependencies of thermodynamic functions $S^\circ(T)$, $H^\circ(T) - H^\circ(298,15)$, $\Phi^{**}(T)$ are computed.

Область применения висмутов в современной науке и технике очень обширна. Они являются одним из первых полупроводниковых материалов, используемых в технике [1].

Цель данной работы - рентгенографическое и калориметрическое исследование соединения SrBi_2O_4 , впервые обнаруженного нами при изучении системы SrCO_3 - Bi_2O_3 . Его синтез проводили путем твердофазного взаимодействия стехиометрических количеств SrCO_3 квалификации «х.ч.», Bi_2O_3 «ос.ч.», которые предварительно были прокалены до постоянного веса. Методом дифференциально-термическо-

го анализа (ДТА) определены условия твердофазного синтеза. Смеси указанных соединений были тщательно перемешаны, и твердофазный синтез проведен при 720 - 750°C , а низкотемпературный отжиг - при 500°C в течение 10 часов. Образование равновесного состава SrBi_2O_4 подтверждалось методом рентгенофазового анализа (установка ДРОН-2,0; Си К - излучение). Интенсивность дифракционных максимумов оценивали по стобальной шкале.

Методом гомологии [2] проиндексированы рентгенограмма порошка SrBi_2O_4 . В табл. 1 приведены результаты индексирования.

Таблица 1
Индексирование рентгенограммы порошка SrBi_2O_4

ИЮ	d, Å	ЮХксп-	hkl	$I_{\text{фв}}d^{2*}$,
1	2	3	4	5
4,8217	18	430,1	220	4371
3,6332	9	757,5	321	759,9
3,4491	21	840,6	400	850,3
3,2031	100	977,9	411	987,4
3,0583	65	1069	420	1073
2,9402	20	1157	332	1165
2,7467	10	1326	510	1335
2,4748	9	1633	521	1622
2,3094	14	1875	620	1866
1	2	3	4	5
1,9914	10	2522	550	2532
1,8697	23	2861	640	2858
1,8022	39	3079	642	3078

Удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных значений $10^4/d^2$, приведенных в табл. I, подтверждает корректность и достоверность результатов индексирования. Установлено, что полученный SrBi_2O_4 кристаллизуется в кубической объемноцентрированной сингонии со следующими параметрами решетки: $a=12,69 \text{ \AA}$, $V^0=2043,5 \text{ \AA}^3$, $Z=32$, $\rho_{\text{рент}}=7,56$, $\rho_{\text{пикн}}=7,40 \pm 0,26 \text{ г/см}^3$. Пикнометрическую плотность SrBi_2O_4 определяли по методике, описанной в [3]. В качестве индифферентной жидкости выбран толуол.

Теплоемкость полученного SrBi_2O_4 исследовали в интервале температур 298,15-673K на серийном калориметре ИТ-С-400. Продолжительность измерений во всем температурном интервале с обработкой экспериментальных данных составляла не более 2,5 часов. Предел допускаемой погрешности составляет $\pm 10\%$. Градуировка прибора осуществлялась на основании определения тепловой проводимости тепломера K_T [4,5]. Для этого были проведены несколько экспериментов с медным образцом и пустой ампулой. Тепловая проводимость тепломера определялась по формуле:

$$K_T = C_{\text{обр.м}} / (T_{\text{ш}} - T_{\text{т}}),$$

где $C_{\text{обр.м}}$ - полная теплоемкость медного образца, Дж/(моль К);

\bar{x} - среднее значение времени запаздывания на тепломере в экспериментах с медным образцом, с;

x^0 - среднее значение времени запаздывания в экспериментах с

пустой ампулой, с.

Полную теплоемкость медного образца вычисляли по формуле:

$$C_{\text{обр.м}} = m \cdot c_{\text{м}},$$

где $C_{\text{м}}$ - табличное значение удельной теплоемкости меди, Дж/(моль К);

$T_{\text{обр}}$ - масса медного образца, кг.

Значение удельной теплоемкости исследуемых веществ вычисляли по формуле:

$$C_{\text{в.4}} = K_T / m_0 (t - t^0),$$

где K_T - тепловая проводимость тепломера;

$m_{\text{обр}}$ - масса исследуемого вещества ;

$t_{\text{т}}$ - время запаздывания температуры на тепломере, с;

$x_{\text{т}}^0$ - время запаздывания температуры на тепломере в экспериментах с пустой ампулой, с.

Из удельной теплоемкости с учетом молярной массы вычислили значение мольной теплоемкости. При каждой температуре проводились по 5 параллельных опытов, полученные результаты усреднялись и обрабатывались методами математической статистики. Для усредненных значений удельных теплоемкостей при каждой температуре проводили оценку среднеквадратичного отклонения (δ), а для мольных значений - случайной погрешности (Δ). Систематическая погрешность и ошибки в измерении температуры в расчет не входили, так как они в нашем случае по сравнению со случайной составляющей были крайне малы, поэтому точность измерения

определяется случайной погрешностью [6]. Ниже в табл.2 приведены результаты калориметрического определения теплоемкости SrBi_2O_4 . По опытным данным было выведено уравнение температурной зависимо-

сти теплоемкости висмутита стронция. Для определения погрешностей коэффициентов в уравнении использовали среднюю случайную составляющую погрешности для всего температурного диапазона.

Таблица 2
Экспериментальные ; ичения теплоемкости SrBi_2O_4

Т, К	$C_p^{\circ \pm s}$ Дж/(гК)	$C_p^{\circ \pm D}$ Дж/(мольК)	Т, К	$C_p^{\circ \pm s}$ Дж/(гК)	$C_p^{\circ \pm D}$ Дж/(мольК)
298,15	0,2670±0,0049	152 ± 8	498	0,3070 + 0,0043	175 ± 7
323	0,2730±0,0028	156 + 4	523	0,3084 ± 0,0010	176 + 2
348	0,2816±0,0083	160+13	548	0,3122 + 0,0034	178 + 5
373	0,2861±0,0096	163+15	573	0,3145 + 0,0031	179 + 5
398	0,2899±0,0031	165 + 5	598	0,3186 + 0,0010	181+2
423	0,2923±0,0032	166 + 5	623	0,3200 + 0,0010	182+1
448	0,2931±0,0018	167 + 3	648	0,3223 + 0,0049	184 + 8
473	0,3040±0,0021	173 + 3	673	0,3258 + 0,0017	186 + 2

О достоверности полученных значений и работы калориметра в целом может свидетельствовать тот факт, что опытное значение стандартной теплоемкости арсената натрия Na_3AsO_4 , определенное нами на этом же калориметре ИТ-С-400 [7] и равное 169,1 Дж/(мольК), удовлетворительно согласуется с его реко-

мендованной величиной (170,3 Дж/(моль К)), приведенной в справочнике [8]. Математической обработкой зависимости мольных значений теплоемкостей от температуры, приведенных в табл.2, выведено уравнение Майера - Келли, которое для SrBi_2O_4 имеет следующий вид [Дж/(моль К)]:

$$C_p^{\circ} = (162,6 \pm 7,0) + (46,0 \pm 2,0) \cdot 10^{-4} \cdot T - (20,18 \pm 0,70) \cdot 10^{-6} \cdot T^2$$

Так как возможности калориметра не позволяют вычислить значение стандартной энтропии $S^{\circ}(298,15)$ непосредственно из опытных данных, ее оценили из [9]. Далее по известным соотношениям вычислены термодинамические функции $C^{\circ}(T)$, $H^{\circ}(T) - H^{\circ}(298,15)$, $S^{\circ}(T)$ и

$\Phi^{**}(T)$, которые приведены в табл.3.

Таким образом, впервые определены типы сингонии, параметры элементарной ячейки SrBi_2O_4 , в интервале 298,15-673К исследована его теплоемкость, выведено уравнение зависимости $C_p^{\circ} \sim f(T)$ и рассчитаны функции $S^{\circ}(T)$, $H^{\circ}(T) - H^{\circ}(298,15)$ и $\Phi^{**}(T)$.

Таблица 3
Температурные зависимости термодинамических функций Na_3AsO_4
 $C_p^\circ(T)$, $S^\circ(T)$, $\Phi^{**}(T)$; Дж/(мольК), $H^\circ(T)-H^\circ(298,15)$, Дж/моль.

T, K	$C_p^\circ(T)$	$S^\circ(T)$	$H^\circ(T)-H^\circ(298,15)$	$\Phi^{**}(T)$
298	152 ± 8	195 ± 12	.	193 ± 12
300	154 ± 15	196 ± 12	300 ± 10	193 ± 12
325	158 ± 5	206 ± 13	4000 ± 130	194 ± 12
350	162 ± 5	216 ± 14	7670 ± 250	194 ± 12
375	166 ± 5	225 ± 14	11320 ± 370	195 ± 12
400	168 ± 6	234 ± 15	14930 ± 490	196 ± 12
425	171 ± 6	242 ± 15	18520 ± 610	198 ± 12
450	173 ± 6	249 ± 16	22080 ± 730	200 ± 13
475	176 ± 6	256 ± 16	25620 ± 840	202 ± 13
500	178 ± 6	263 ± 17	29120 ± 960	205 ± 13
525	179 ± 6	269 ± 17	32590 ± 1080	207 ± 13
550	181 ± 6	275 ± 17	36040 ± 1190	210 ± 13
575	183 ± 6	281 ± 18	32450 ± 1300	213 ± 13
600	185 ± 6	287 ± 18	42840 ± 1410	215 ± 14
625	186 ± 6	292 ± 18	46200 ± 1520	218 ± 14
650	188 ± 6	297 ± 19	49530 ± 1630	221 ± 14
675	189 ± 6	302 ± 19	52840 ± 1740	224 ± 14

ЛИТЕРАТУРА

1. Оксидные материалы в электронной технике. - Серия химия. - М.: 1983. №6. - 64 с.
2. Ковба Л.М. Рентгенофазовый анализ. - М., 1976. - 256 с.
3. Кивилис С.С. Техника измерений теплоемкости жидкостей и твердых тел. - М., 1959. - 191 с.
4. Платунов Е.С. Теплофизические измерения в режиме. - М., 1973. - 223 с.
5. Техническое описание и инструкции по эксплуатации ИТ-С-400, М.: Изд-во МГУ. 1970. - 221 с.
6. Спиридонов В.П., Лопаткин А.А. Математическая обработка экспериментальных данных. - М.: Изд-во МГУ. 1970. - 221 с.
7. Шарипова З.М., Касенов Б.К., Бухарицын В.О. Теплоемкость и термодинамические функции арсенатов натрия в интервале 223-700К // Журнал физ. химии. 1991. - Т.63, №5. - С. 1408-1410.
8. Термические константы веществ. /Подред. В.П.Глушко. - М., Вып. 10.4.1. 300 с.
9. Кумок В.Н. Проблема согласования методов оценки термодинамических характеристик // Прямые и обратные задачи химической термодинамики. - Новосибирск. 1987. - С. 108-123.

УДК 546.87.001.5

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ГАЛОГЕНИДОВ ВИСМУТА (III) $BsHal_3$ (Hal = Cl, Br, I) С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО- ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ: ВЛИЯНИЕ УЧЕТА d-ОРБИТАЛЕЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ

С.Н. Тусупбаев, Г.П. Полатбекова

Казахский национальный университет им. аль-Фараби

Аталмыш мақалада квантты-химиялық модельдеу көмегімен висмут галогенидтер құрлысына жүргізілген зерттеулер қорытындысы ұсынылады.

В данной статье представлены выводы проведенных исследований структуры галогенидов висмута (III) с помощью квантово-химического моделирования.

In the given article the conclusions of the conducted studies of frame of halogenids with the help of quantum-chemical simulation are presented.

Галогениды висмута (III) имеют достаточно жесткое тригонально-пирамидальное строение, причем с увеличением электроотрицательноеTM атома галогена барьер пирамидальной инверсии должен увеличиваться [1]. Как известно, при расчетах геометрии соединений вполне достаточен минимальный базис. Однако для корректного описания молекулярной геометрии пирамидальных структур его необходимо дополнять поляризационными d-функциями. Учет электронной

корреляции и d-орбиталей необходимо также для получения энергетических характеристик, сопоставимых с экспериментальными данными, например, таких, как энергия связи.

В настоящей работе на различных уровнях теории: полуэмпирическим методом, методом псевдопотенциала (или эффективных потенциалов) и ab-initio методами проведено квантово-химическое исследование энергетических, геометрических и электронных характерис-

тик галогенидов висмута (III) с добавлением в базисный набор d-орбиталей и учетом электронной корреляции, изучено их влияние на указанные выше характеристики. Расчеты были проведены в рамках пакетов программ MOPAC6 [2] и GAMESS [3]. В пакете программ MOPAC6 атом висмута параметризован в методе PM3 [4]. Для изучения висмутсодержащих соединений в GAMESS реализованы базисный набор Стивенса-Баша-Краусса-Кундари (SBK) [5-7], адаптированный для элементов от Li до Rn, а также два базиса с фузингаговскими экспонентами поляризационных функций для элементов H 4- Rn: минимальный типа STO-3G базисный набор MINI и валентно-расщепленный -21 базисный набор MIDI [8]. Учет поляризационных d-функций и электронной корреляции проводился только для методов пакета программ GAMESS. Использовались следующие поляризационные функции d-типа: Vi (0,185), Cl (SBK 0,75; MINI и MIDI 0,514), Br (0,389), I (0,266). Учет электронной корреляции проводили в рамках теории возмущений Мёллера-Плессета второго порядка mp2(frozen core). Атомные заселенности были определены анализом по Малликену.

В дальнейшем для удобства мы будем обозначать различные приближения в виде: «метод» =

SBK, MINI, MIDI, расчет с учетом электронной корреляции - mp2/«метод». расчет с включенными в базисный набор d-орбиталями - «метод»^), и, наконец, расчет в рамках mp2 с учетом d-орбиталей - mp2/«метод»^).

В табл. 1 приведены значения полных энергий $E_{\text{полн}}$ (для методов ab-initio) и энергий валентных электронов $E_{\text{вал}}$ (для методов PM3 и SBK) галогенидов висмута (III), рассчитанных в различных приближениях. Включение в базисный набор d-орбиталей и учет электронной корреляции приводят к их уменьшению. Очевидно, что изменения полной и валентной энергий E будут равнозначны. Для уменьшения $E_{\text{пот}}$ и $E_{\text{вал}}$, вызванного учетом электронной корреляции (mp2/«метод»), это обусловлено тем, что при вычислении корреляционной энергии основные электроны в расчет не принимались. В то время как понижение $E_{\text{полн}}$ и $E_{\text{вал}}$, вызванное добавлением d-орбиталей (d-«метод»^), происходит с «перетеканием» электронной плотности на вакантную d-орбиталь, главным образом, с занятых валентных орбиталей. Следует отметить, что если для метода SBK энергетический выигрыш, обусловленный учетом корреляционной энергии (mp2/SBK) почти в 2 раза больше такового, вызванного включением поляризационных d-функций (SBK(d)),

то согласно методам ab-initio, наоборот, $\epsilon'(\text{ab-initio}(d))$ в 3^{16} раз больше $\epsilon'(\text{mp2/ab-initio})$. Другими словами, если для метода SBK понижение энергии в большей степени осуществляется за счет корреляционной энергии, то для методов ab-initio - за счет добавления d-орбиталей. Это в свою очередь должно отражаться и на других, рассчитываемых из $\epsilon_{\text{полн}}$ и $i_{\text{вал}}$, энергетических параметрах галогенидов (энтальпия образования, энергия связи и др.).

Данные табл. 1 позволяют проследить изменение энергетических характеристик с заменой атома

галогена. Согласно полученным данным, $\epsilon'(\text{mp2/SBK})$ и $\epsilon(\text{SBK}(d))$ по абсолютной величине уменьшаются от Cl к I, и соответственно, аналогично меняются абсолютные значения $\epsilon'(\text{mp2/SBK}(d))$. Для значений $\epsilon(\text{mp2/ab-initio})$ не наблюдается четкой тенденции изменения в зависимости от природы атома галогена. В то же время значения $\epsilon'(\text{ab-initio}(d))$ по абсолютной величине увеличиваются в ряду $\text{Cl} < \text{I} < \text{Br}$. Аналогично изменяются абсолютные значения $\epsilon(\text{mp2/ab-initio}(d))$, что отражает преобладающий вклад $\epsilon(2i(\text{ab-initio}(d)))$ по сравнению с $\epsilon'(\text{mp2/ab-initio})$.

Таблица 1

Полные энергии (для ab-initio методов) $\epsilon_{\text{полн}}$, энергии валентных электронов $\epsilon_{\text{в.дл}}$ (для методов PM3 и SBK) и энергии связи висмут галоген $\epsilon_{\text{св}}(\text{Bi-Hal})$ в галогенидах Bi (III)

Метод	$\epsilon_{\text{полн}}/\epsilon_{\text{вал}}, \text{ а. е.}$			$\epsilon_{\text{св}}(\text{Bi-Hal}), \text{ кДж/моль}$		
	Cl	Br	I	Cl	Br	I
PM3	-39.0509	-43.1590	-36.0412	273.80	265.89	233.12
SBK	-49.4045	-44.8018	-39.0253	109.40	82.54	56.54
mp2/SBK	-0.1409*	-0.1187*	-0.0962*	185.18	150.97	116.83
SBK(d)	-0.0675*	-0.0668*	-0.0590*	157.36	131.20	99.16
p2/SBK(d)	-0.5197*	-0.4996*	-0.4507*	248.64	225.71	187.37
MINI	-21412.5542	-27727.2747	-40728.7287	76.32	55.40	37.73
mp2/MINI	-0.0491*	-0.0489*	-0.0521*	118.67	97.14	80.70
MINI(d)	-0.3016*	-0.8040*	-0.3435*	168.03	150.18	121.13
p2/MINI(d)	-0.6468*	-1.1125*	-0.6285*	244.79	220.90	190.26
MIDI	-21412.6698	-27727.4084	-40728.8475	118.94	90.05	63.28
mp2/MIDI	-0.0777*	-0.1303*	-0.1077*	174.33	158.14	123.22
MIDI(d)	-0.2872*	-0.8290*	-0.3507*	206.29	186.49	130.40
p2/MIDI(d)	-0.6708*	-1.2269*	-0.7011*	293.97	273.06	210.65
лит.**	-	-	-	274,5	232,2	168,2

*понижение $E_{\text{тТ}} E_{\text{б}} \backslash i \backslash ^{151}$ различных приближений

**точность приведенных в литературе [9] значений $\epsilon'_{\text{св}}(\text{Bi-Hal})$ составляет ± 1 кДж/моль

В первом приближении стабильность галогенидов количественно может быть оценена как энергия связи висмут-галоген: $\xi_{св}(Bi-Hal) = -[\xi(BiHal_3) - \xi(Bi) - 3ii(Hal)]/3$. Согласно значениям $\xi(Bi-Hal)$, приведенным в табл. I, устойчивость галогенидов для всех методов уменьшается от хлорида к иодиду. Для методов SBK, MINI, MIDI значения $\xi(Bi-Hal)$ сильно меняются с добавлением в базисный набор d-орбиталей и учетом электронной корреляции. Сравнение рассчитанных значений энергий связи Bi-Hal с литературными позволяет сделать следующие выводы. Для количественной оценки $\xi_{св}(Bi-Hal)$ расчет в приближениях «метод», tr2/«метод», «метод»[^] недостаточен. Расчетные данные приближения tr2/«метод»[^] сопоставимы с литературными значениями $\xi(Bi-Hal)$. Метод PM3 дает хорошую количественную оценку энергии связи Bi-Cl, но завышает ее для связей Bi-Vg и Bi-I. Очевидно, в дальнейшем целесообразно применять наименее трудоемкие методы PM3 и tr2/SBK(d) для количественной

оценки энергий образования связи Bi-Hal в более сложных галогенсодержащих соединениях висмута.

В табл. 2 приведены геометрические параметры галогенидов висмута (III). Согласно проведенным расчетам галогениды Bi (III), как и следовало ожидать, являются незначительно искаженными тригональными пирамидами. Все использованные теоретические методы дают заниженную длину связи висмут-иод. Такое несоответствие с экспериментально определенной длиной связи связано с тем, что она была получена для иодида висмута (III) в твердом состоянии с помощью рентгеноструктурного анализа. В то же время значения длин связей Bi-Hal для Hal=Cl, Vg, рассчитанные в базисах SBK, MINI(d) и tr2/MINI(d), хорошо согласуются с литературными данными, полученными экспериментально в газовой фазе с помощью электронной дифракции. Расчет в наиболее строгом из использовавшихся базисных наборов MIDI в различных приближениях дает неудовлетворительные значения длин связей Bi-Hal.

Таблица 2

Геометрические параметры галогенидов висмута (III)

	Cl	Br	I	Cl	Br	I
	Длина связи Bi-Hal, А			Валентный угол HalBiHal, град		
PM3	2,420	2,603	2,789	99,9-100,0	98,6	102,7
SBK	2,488	2,637	2,855	97,3	98,4	99,9
mp2/SBK	2,529	2,684	2,905	98,3	99,4	100,7
SBK(d)	2,426	2,581	2,810	97,4	98,5	99,7
mp2/SBK(d)	2,431	2,593	2,820	97,9	98,8	100,0
MINI	2,586	2,769	3,002	95,5	96,5	97,9
mp2/MINI	2,618	2,805	3,043	96,0	96,9	98,2
MINI(d)	2,475	2,634	2,866	96,6-96,7	97,2	98,4-98,5
mp2/MINI(d)	2,474	2,635	2,870	96,9	97,4	98,5-98,6
MIDI	2,528	2,710	2,942	95,3	96,7	98,4
mp2/MIDI	2,556	2,757	2,996	95,8	97,2	98,6-98,8
MIDI(d)	2,437	2,594	2,837	96,0	97,0	98,0
mp2/MIDI(d)	2,431	2,608	2,852	96,1	96,8	97,6
эксп. [10,11]*	2,48 (r)	2,63 (r)	3,07 (тв.)	100±6(г)	100+4 (r)	.

*точность приведенных в литературе значений длины связи Bi-Hal составляет $\pm 0,02$ Е

Значения валентных углов HalBiHal, определенные различными методами, лежат в пределах, допустимых литературными данными (табл. 2). При этом наблюдается общая тенденция к их увеличению в тригалогенидах от хлорида к иодиду. В рамках теории ОЭВПО это можно объяснить сжатием неподеленной электронной пары (Е-пары) с уменьшением электроотрицательности атома окружения Hal от Cl к I. Это согласуется с данными работы [12], в которой проводился анализ стереоэффекта Е-пары атомов А^{III} (А= As, Sb и Bi). Авторами обнаружено уменьшение активности Е-пары, происходящее симбатно с ее сжатием, по мере увеличения координационного числа атома А, рос-

та заряда его ядра (от As к Bi) и уменьшения электроотрицательности атома окружения Hal (Hal=F, Cl, Br, I) от F к I. Качественно другую картину изменения величины валентного угла HalBiHal дает полуэмпирический метод PM3, согласно которому угол BrBiBr является минимальным.

Сравнение длин связей висмут-галоген ($R_{\text{Bi-Hal}}$) в галогенидах, рассчитанных в приближениях «метод» и «метод»(с1), показало, что включение в базисный набор d-орбиталей приводит к их заметному укорочению (на 0,045 - 0,136 д). При этом укорочение связи ($d R_{\text{Bi-Hal}}$) меняется по-разному для различных методов в зависимости от природы атома галогена. Так, метод

SBK указывает на немонотонное уменьшение $d R_{\text{BMal}}$ в ряду от хлорида к иодиду, согласно методу MINI значения $d R_{\text{Bi-Hal}}$, наоборот, увеличиваются в этом же ряду, причем для бромида и иодида $d R_{\text{Bi-Hal}}$ имеют близкие значения. Согласно же данным метода MIDI значения $d R_{\text{Bi-Hal}}$ увеличиваются в ряду $\text{Cl} < \text{I} < \text{Br}$. Валентный угол HalBiHal при этом меняется мало (максимальное отклонение равно $1,2^\circ$).

Учет электронной корреляции проявляется в незначительном удлинении $R_{\text{Bi-Hal}}$ (на 0,028 - 0,05 Å) и небольшом увеличении валентного угла HalBiHal (0,2 - Г). Различные «методы» при этом дают одинаковую тенденцию изменения $d R_{\text{Bi-Hal}}$ в зависимости от природы

атома галогена - они увеличиваются в ряду от хлорида к иодиду.

Из вышесказанного следует, что эффекты изменения длины связи при учете электронной корреляции и включения в базисный набор поляризационных d-функций взаимно противоположны. При этом эффект укорочения длины связи Bi-Hal при включении в базисный набор поляризационных d-функций является определяющим, как видно из сравнения длин связей, рассчитанных в приближениях «метод» и $\text{tr}2/$ «метод»[^]).

В табл. 3 представлены рассчитанные значения эффективных зарядов на атомах и энергии нижней свободной МО в галогенидах висмута.

Таблица 3

Заряды на атомах q и энергии нижней свободной МО $E_{\text{нсмо}}$ в галогенидах висмута (III)

	Cl	Br	I	Cl	Br	I
	q^*, e			• $E_{\text{нсмо}}$, ЭВ		
PM3	-0.32 (0.95)	-0.31 (0.94)	-0.28 (0.83)	-2.30	-2.98	-3.34
SBK	-0.38(1.13)	-0.29 (0.86)	-0.21 (0.62)	-0.55	-0.86	-1.30
mp2/SBK	-0.32 (0.97)	-0.25 (0.74)	-0.18(0.53)	-0.84	-1.22	-1.58
SBK(d)	-0.26 (0.78)	-0.24 (0.73)	-0.21 (0.63)	0.50	0.27	-0.41
mp2/SBK(d)	-0.21 (0.63)	-0.21 (0.62)	-0.18(0.54)	0.50	0.17	-0.48
.MINI	-0.36 (1.08)	-0.28 (0.84)	-0.18(0.55)	-0.26	-0.56	-1.02
mp2/MINI	-0.32 (0.96)	-0.25 (0.74)	-0.16(0.49)	-0.40	-0.69	-1.21
MINI(d)	-0.35 (1.05)	-0.32 (0.96)	-0.20 (0.61)	0.85	0.36	0.36
p2/MINI(d)	-0.32 (0.95)	-0.29 (0.87)	-0.17(0.52)	0.88	0.36	0.35
MIDI	-0.38(1.16)	-0.32 (0.96)	-0.23 (0.69)	-0.09	-0.70	-1.04
mp2/MIDI	-0.33 (0.99)	-0.28 (0.85)	-0.20 (0.61)	-0.20	-0.90	-1.31
MIDI(d)	-0.33 (0.98)	-0.26 (0.77)	-0.19(0.56)	0.86	0.43	0.18
p2/MIDI(d)	-0.28 (0.85)	-0.23 (0.69)	-0.16(0.49)	0.89	0.35	0.10

*в скобках приведены значения $\langle r^{-1} \rangle (\text{Bi})$

Согласно полученным данным на атоме висмута в галогенидах сохраняется значительный положительный заряд (0.49-г 1 Лбе). Следует отметить, что с учетом электронной корреляции распределение электронной плотности на атомах становится более «мягким». При учете поляризационных d-функций для указанной выше тенденции имеются исключения. Так, рассчитанные в приближениях SBK и SBK(d) заряды на атомах в иодиде практически одинаковы. Более высокие по абсолютной величине, по сравнению с приближением MINI, заряды на атомах получены для бромида и иодида в приближении MINI(d), а для бромида, кроме того, и для $tr2/MINI(d)$. Включение в базисный набор MINI вакантной d-орбитали, видимо, вызывает дополнительное смещение электронной плотности к более электроотрицательным атомам галогена. Это может быть связано с его малым размером и простотой, а также негибкостью АО данного набора. Метод РМЗ дает практически одинаковые значения зарядов на атомах в хлориде и бромиде. Интересно отметить, что при переходе от приближения

«метод» к приближению $tr2/$ «метод»[^]), где «метод»=8BK, MINI, наблюдается постепенное выравнивание зарядов на атомах в хлориде и бромиде. Для метода MIDI такая тенденция выражена слабо.

Нижняя свободная МО галогенидов висмута (III) представляет собой одну из антисвязывающих орбиталей связи висмут-галоген $a_{ш-Наг}^*$. Ее энергия может служить индексом реакционной способности к акцептированию E-пары донора. С таких позиций акцепторные свойства галогенидов, согласно данным всех методов, увеличиваются от хлорида к иодиду (табл. 3). Исключение составляют данные расчетов в MINI(d) и $tr2/MINI(d)$, согласно которым значения $\epsilon_{нсмо}^{дл\ddot{я}}$ бромида и иодида практически одинаковы. Учет электронной корреляции приводит к понижению $E_{нсмо}$, в то время как при включении поляризационных d-функций наблюдается обратный эффект. Сравнение результатов расчета в приближениях «метод» и $tr2/$ «метод»[^]) указывает на преобладающее влияние учета d-функций. Метод РМЗ дает значительно более низкие по сравнению с остальными методами значения

$F_{нсмо}$

ЛИТЕРАТУРА

1. В.И. Минкин, Б.Я Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул. - Ростов-на-Дону: «Феникс», 1997-С. 469-471.
2. МОРАС 6 - J.J.P.Stewart J.Computer-Aided Molecular Design 4, 1-105 (1990).
3. M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.J.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery, J.Comput. Chem. 14, 1347-1363(1993).
4. J.J.P. Stewart, J. Сотр. Chem., 1989, 10,221.
5. W.J.Stevens, H.Basch, M.Krauss J.Chem.Phys. 81,6026-6033 (1984).
6. W.J.Stevens, M.Krauss, H.Basch, P.G.Jasien Can.J.Chem. 70, 612-630(1992).
7. T.R.Cundari, W.J.Stevens J.Chem.Phys. 98, 5555-5565(1993).
8. «Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations» S.Huzinaga, J.Andzelm, M.Klobukowski, E.Radzio-Andzelm, Y.Sakai, H.Tatewaki Elsevier, Amsterdam, 1984.
9. Дж. Хьюи. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. - М.: Химия, 1987.
10. Trans. Faraday Soc., 1940,36, 681.
11. Z. Kristallogr., 1966, 123, 67.
12. Д.В. Пушкин, В.Н. Серёжкин, Ю.Н. Михайлов, Ю.А. Буславев. Стереозффект неподеленной электронной пары в галогенидах мышьяка, сурьмы и висмута. - Тез. докл. II Национальной кристаллохимической конференции, 2000, ИПХ РАН.

УДК 544.18 : 182.34

ВЛИЯНИЕ ПРОТОНИРОВАНИЯ НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭПОКСИДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ПИРИДИНПРОИЗВОДНЫМИ

К.Х. Жапаргазинова

Павлодарский государственный университет

им. С. Торайгырова

К.И. Иманбеков

Казахский национальный университет им. аль-Фараби

Мақалада эпоксид қосылыстардың пиридин туындыларымен әрекеттескен кезіндегі протонның ролі көрсетілген. Протонның қатысуымен және протонсыз жағдайлардағы эпоксид сақинасының ашылуының энергетикалық сипаттамалары есептелген. Құрылымдық өзгерістердің нәтижесінде ортаға байланысты этилен оксиді ацетальдегидке немесе ацетальдегидтің катионына айналуы белгіленді.

В работе показана роль протонирования на взаимодействие эпоксидных соединений с пиридинпроизводными. Рассчитаны энергетические характеристики процесса раскрытия эпоксидного цикла в отсутствие и присутствии протона. Анализ структурных изменений позволил установить, что оксид этилена в зависимости от среды изомеризуется либо в ацетальдегид, либо в катион ацетальдегида.

The work deals with the influence of protoning on interaction of epoxy compounds with pyridinderivatives. Energetic characteristics of opening epoxy cycle with and without proton are calculated. The analysis of structural changes allowed to determine that ethylen oxyd depending on environment turns into either acetaldehyd or acetaldehyd cation.

Механизм взаимодействия эпихлоргидрина (ЭХГ) с цианпиридинами или пиридинкарбоновыми кислотами, лежащий в основе синтеза многих ионообменных полимеров, окончательно не выяснен [1-3]. Известно [4,5], что взаимодействие 3-цианпиридина с ЭХГ на первых стадиях процесса приводит к образованию нестабильного М-(2,3-эпокси-ропил)-3-цианпиридиний-иона. Данный интермедиат, в зависимое-

ти от условий, может в дальнейшем вступать в реакции гомополимеризации или поликонденсации. В литературе мало сведений о квантово-химическом исследовании электронной структуры образующихся нестабильных промежуточных продуктов и механизма реакции при последующем их взаимодействии с ЭХГ.

Цель работы - установление влияния протонирования на процесс раскрытия оксиранового цикла при взаимодействии эпоксидных соединений с пиридинпроизводными.

Для установления механизма реакции модельного промежуточного продукта 1Ч-(2,3-эпоксипропил)-3-цианпиридиний-иона с молекулой ЭХГ и оценки энергетических характеристик различных путей ее протекания была исследована система $\{C_5H_5N-(CH^+-OH + OS, N_4)\}$. Для упрощения расчетов хлорметильная группа эпихлоргидрина заменена атомом водорода. Исходное соединение $C_5H_5N-(CH_2)_3-OH$ является продуктом, образующимся из модельного промежуточного N-(2,3-эпоксипропил)пиридиний-иона при раскрытии эпоксидного кольца в кислых средах [6]. В связи с различной активностью первичных и вторичных спиртов в реакциях, протекающих с проявлением кислых свойств, для модельной реакции был выбран 1-(Ы-пиридиний)-3-гидроксипропан. Данное соединение более легко вступает в реакцию с разрывом О-Н-связи

[7]. Для выяснения особенностей протекания модельной реакции были проведены расчеты, состоявшие из следующих этапов: 1) раскрытие эпоксидного цикла этиленоксида в зависимости от величины валентного угла С-С-О; 2) раскрытие эпоксидного цикла протонированной формы этиленоксида в зависимости от величины угла С-С-О; 3) установление легкости отрыва протона в ОН-группе и энергетических параметров системы 1-(К-пиридиний)-3-гидроксипропана по координате реакции; 4) исследование механизма взаимодействия 1-(1Ч-пиридиний)-3-гидроксипропана с оксидом этилена.

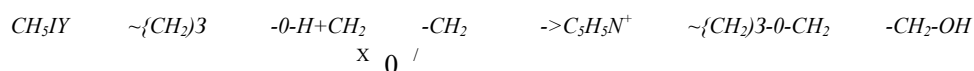
Для проведения квантово-химического исследования использован полуэмпирический квантово-химический метод РМЗ, поскольку сложность исследуемых соединений затрудняет их анализ *ab initio*. Выбранный метод позволяет провести анализ с максимальной возможностью полуэмпирического приближения и сделать на основе интерпретации результатов достоверные выводы о механизме реакции. Кроме того, метод РМЗ позволяет достаточно корректно описывать молекулярные системы с водородной связью.

В качестве координат реакции были выбраны: угол раскрытия О-С-С оксида этилена и межатом-

ные расстояния между протоном гидроксильной группы соединения $C_5H_5N-(CH_2)_3-OH$ и атомом кисло-

рода оксида этилена, а также атомом кислорода биполярного иона $C_5H_5N^+-(CH_2)_3-O^-$ и атомом углерода соединения $C_2H_4O H^+$.

Предполагаемая схема модельной реакции:



Удлинение величины ОН-связи гидроксильной группы в исходном 1-(М-пиридиний)-3-гидроксипропане должно было бы способствовать появлению свободной валентности на атоме углерода оксида этилена. Между атомом кислорода эпоксидного цикла и протоном гидроксила возможно образование водородной связи, причем достаточно сильной, вследствие наличия заряда у исходного 1-(М-пиридиний)-3-гидроксипропана. Миграция протона гидроксильной группы после разрыва связи О-Н к атому кислорода оксида этилена должна привести к образованию ковалентной связи Н-О, но уже в новом продукте конденсации. Раскрытие эпоксидного кольца в оксиде этилена по мере увеличения угла О-С-С неизбежно должно привести к большей поляризации атомов углерода. Поэтому логично было предположить, что биполярно заряженный 1-(М-пиридиний)-3-оксипропан и протонированный раскрытый оксид этилена образуют эфирную связь, приводя к конечному продукту $[C_5H_5N^+ - (CH_2)_3-O-CH_2-CH_2-OH]$.

Изменение величины угла С-С-О в оксиде этилена от 64 до 160° позволило выяснить следующее: уве-

личение угла С-С-О с 64 до 110° приводит к снижению напряженности в цикле и одновременному убыванию энергии и прочности противоположащей связи С-О (таблица). Величина энергии связывания указанных атомов изменяется существенно, причем уменьшение происходит за счет более значительного понижения ковалентной составляющей по сравнению с электростатической. При угле С-С-О, равном 76°, происходит упрочнение связи С-С и ослабление противоположащей С-О связи. Однако, структурная деформация оксида этилена при достижении угла 100° претерпевает значительные изменения: вероятно, в связи с удалением атома углерода, увеличением длины связи электронная плотность концентрируется в большей степени на атоме кислорода. Связь С-О становится короче и составляет промежуточное значение между длинами двойной и одинарной связей. Но несмотря на удлинение связи С-О, значение индекса Виберга (W) показывает, что разрыва связи не происходит. Неустойчивость системы при этом возрастает и достигает максимума при угле раскрытия 110° (рисунок 1).

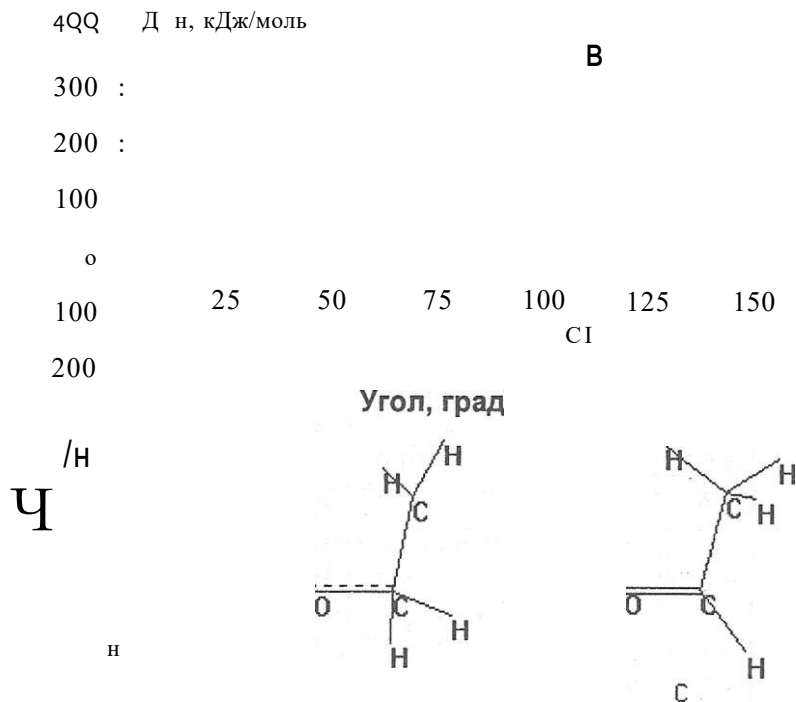


Рисунок 1. Энергетический профиль угла раскрытия эпексидного кольца в оксиде этилена

Последующее продвижение по координате реакции с увеличением степени раскрытия эпексидного цикла на 2.5° приводит к точке бифуркации, т.е. при α равном 112.5° неустойчивый продукт раскрытия оксида этилена изомеризуется в более стабильную форму - CH_3COH . Энергия активации данной структурной перестройки составляет 298.62 кДж/моль, что коррелирует с данными эксперимента [8]. Теплота образования стабилизированной формы CH_3COH составляет -142.58

кДж/моль и достигает минимума при значении угла CCO 122.5° (рисунок 1).

Гипотезы о возможности изомеризации раскрытого эпексидного цикла в энергетически более устойчивый ацетальдегид были подтверждены экспериментальными данными [8]. Энергия активации структурной реорганизации оксида этилена в ацетальдегид в отсутствие катализатора, полученная в ходе эксперимента, составляет 217.88 кДж/моль.

Таблица

Изменение энергии связывания (E_{CBjn}) и ее парциальных составляющих (E_{eE} , E_{eN}) в некоторых точках координаты реакции в оксиде этилена и протонированной его форме

КР	$E_{\text{Юi}}$, кДж	$E_{(c-O)}$, кДж			Длина (А) связи, С'О	W
		$E_{e,я}$	EE-E	EE-N		
Оксид этилена						
62.4	-57003.28	-1050.66	18261.73	-36292.88	1.4890	0.9532
110.0	-56705.15	-250.85	13158.90	-26426.84	2.2726	0.6147
112.5	-57145.10	103.23	14493.22	-27648.27	2.2742	0.0494
122.5	-57159.57	78.15	13941.36	-26632.34	2.3796	0.0545
125.0	-57159.54	72.36	13811.11	-26396.93	2.4039	0.0555
130.0	-57154.75	62.71	13562.19	-25951.19	2.4501	0.0574
Протежированный оксид этилена						
63.9	-57643.90	-868.32	16745.06	-34393.19	1.5374	0.8293
90.0	-57623.64	-173.66	12710.27	-27115.70	2.0497	0.2792
110.0	-57680.57	-19.29	11961.59	-25025.95	2.3172	0.0529
122.5	-57668.02	-10.61	11723.28	-24194.29	2.4460	0.0746
123.0	-57836.86	44.38	13266.00	-25883.65	2.4019	0.0284
125.0	-57823.36	35.70	12889.73	-25210.22	2.4718	0.0289
130.0	-57833.97	41.48	13157.94	-25686.83	2.4224	0.0286

Экспериментальное значение теплового эффекта раскрытия цикла, равное -113.13 кДж/моль, свидетельствует об экзотермическом процессе. По нашим расчетным данным, энергетический эффект составляет -148.28 кДж/моль, что согласуется с вышеприведенными данными. Кроме того, величина угла раскрытия, равная 122.5°, соответствует равновесному валентному углу связи C-C-O в альдегидах [9]. Расчетные параметры двойной связи C=O, полученные в ходе исследования, коррелируют с экспериментальными данными ацетальдегида: длина-

1.2319 д; значение индекса Виберга-1.9376, и позволяют идентифицировать продукт изомеризации оксида этилена.

Таким образом, циклический оксид этилена при угле раскрытия C-C-O 112.5° изомеризуется в термодинамически более устойчивый ацетальдегид. Движение вдоль координаты реакции для протонированной формы оксида этилена проведено с целью выяснения воздействия среды на легкость раскрытия эпоксидного цикла. Угол раскрытия C-C-O варьировал в пределах от 64° до 150° (рисунок 2). Ана-

лиз кривой зависимости теплоты образования от α показал, что в данном случае наличие протона, связанного с атомом кислорода оксида этилена, уменьшает высоту энергетического барьера с 298.62 до 20.03 кДж/моль (таблица).

Увеличение угла раскрытия от оптимальных значений до 90° дестабилизирует соединение, но в интервале $105-110^\circ$ наблюдается уменьшение значения теплоты образования и локальный минимум при 110° . В точке локального минимума система с полной энергией, равной $-5.76 \cdot 10^4$ кДж, подтверждает некоторую термодинамическую стабилизацию структуры. Индекс Виберга для связи C-O, испытывающей наибольшее растяжение, однако, значительно уменьшен.

При дальнейшем движении по координате реакции наблюдается

вновь некоторое повышение значений теплот образования и, следовательно, усиление неустойчивости соединения. Максимальное неустойчивое состояние, с полной энергией $-5.77 \cdot 10^4$ кДж, протонированный оксид этилена имеет при угле раскрытия эпоксидного цикла, равном 122.5° . Величина индекса Виберга для указанной точки свидетельствует о наибольшем удалении атомов связи C-O. Состояние структурной неустойчивости ($\alpha=123^\circ$) сменяется резкой перестройкой (эффект бифуркации) и перераспределением химических связей.

При угле раскрытия цикла свыше 125° происходит переход в более устойчивый катион CH_3COH^+ , либо в катион неопределенного спирта $\text{CH}_3^+ = \text{CH-OH}$ (рисунок 2, структура D—»E).

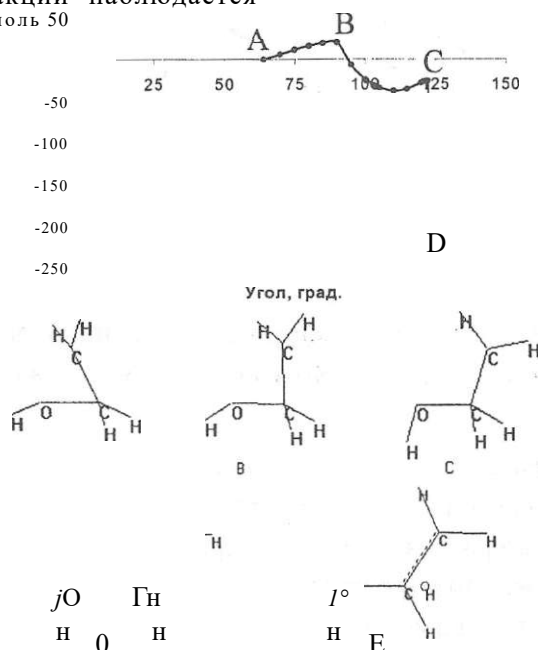


Рисунок 2. Энергетический профиль раскрытия кольца в протонированном оксиде этилена

Сравнительный анализ квантово-химических данных показал, что протонирование α -оксида этилена приводит к тому, что трехчленный цикл раскрывается легче, с меньшим активационным барьером, и, следовательно, взаимодействие КГ-(2,3-эпоксипропил)пиридиний-иона с последующими молекулами ЭХГ с образованием конденсационных полупродуктов будет протекать в кислых средах с меньшими энергетическими затратами и, вероятно, с большей скоростью.

Анализ результатов квантово-химических расчетов для исходной системы $[C_5H_5N^+-(CH_2)_3-O...H]$

позволил выяснить легкость отрыва протона в отсутствие межмолекулярного комплекса. Исследование участка ППЭ для модельного 1-(N-пиридиний)-3-гидроксипропана позволило установить, что энергия активации процесса отрыва протона гидроксильной группы составляет 434.80 кДж/моль (рисунок 3). Анализ вида энергетической изолинии свидетельствует о почти равных активационных барьерах для прямой и обратной реакций. Но при удалении протона гидроксильной группы от атома кислорода в интервале значений от 1.90 д до 2.0 д наблюдается эффект бифуркации.

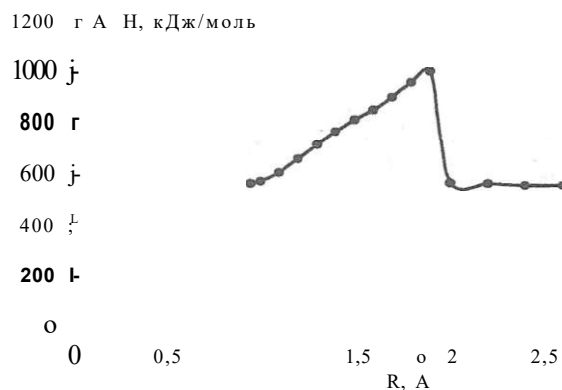


Рисунок 3. Энергетический профиль реакции отрыва протона от гидроксильной группы 1-(N-пиридиний)-3-гидроксипропана

Таким образом, на основании моделирования раскрытия эпоксидного цикла в различных средах установлено, что протонирование эпоксидного цикла снижает ве-

личину активационного барьера в 15 раз. Изомеризация протонированного этиленоксида в более устойчивый катион ацетальдегида объясняет наличие в реакционной массе ряда побочных продуктов.

1. Ергожин Е.Е., Тастанов, Менлигазиев Е.Ж. Гомо- и сополимеризация эпоксидных соединений //Сб. Синтез мономеров и полимеров. - Алма-Ата,-1988. -С.106-133.
2. Xue G., Ishida H., Koenig I.L. Polymerization of styrene oxide with pyridine // Macromol. Chem., Rapid. Commun.- 1986.-7,1. С.37-41.
3. Шостак Ф.Т., Серикбаева С.М., Любман Н.Я. Реакции третичных аминов с эпихлоргидрином // Теория и практика ионного обмена //Сб. научн. тр. -Алма-Ата,- 1963. - С.7-15.
4. Иманбеков К.И., Нусипова А.М., Жапаргазинова К.Х. Квантово-химический расчет структуры N-глицидилпиридиний-ионов //16 Менделеевский съезд по общей и прикл. химии: Тез.докл.- М.-Л., 1998,- С.319-320.
5. Жапаргазинова К.Х., Иманбеков К.И., Нусипова А.М. Спектроскопическое исследование механизма реакции эпихлоргидрина с 3-цианпиридином // Алматы, Вестник КазГУ, сер. хим. 1999.-№3. С.164-166.
6. Ергожин Е.Е., Менлигазиев Е.Ж. Полифункциональные ионообменники. - Алма-Ата: Наука, 1986. -295 С.
7. Днепровский А.С., Темникова Т.И. Теоретические основы органической химии. - JL: Химия, 1991.-560 С.
8. Зимаков П.В. Окись этилена. - М.: Химия, 1967.-320 С.
9. Дей К., Селбин Д. Теоретическая неорганическая химия. - М.: Мир, 1976.- 568 С.

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 62.002.6:338.24.004.12:006.006(100)is0

**ОБЕСПЕЧЕНИЕ
КОНКУРЕНТОСПОСОБНОСТИ ПРОДУКЦИИ
НА ОСНОВЕ ВНЕДРЕНИЯ СИСТЕМ
МЕНЕДЖМЕНТА КАЧЕСТВА
ПО МС ИСО 9001:2000****Г.Г. Пивень***Карагандинский государственный технический
университет***И.П. Падиарова***НИЦПМ МЭТР к*

Концептуалдық ережелер және МС ИСО 9001:2000 бойынша сапа менеджмент жүйелерін қурумен ендіру өзектілігі баяндалған. СМЖқызметі және қуру проблемалары бойынша міндеттерін ішеу үшін Қарағанды мемлекеттік техникалық университетінің құрамында Орталық құрылған.

Изложены концептуальные положения и актуальность разработки и внедрения систем менеджмента качества по МС ИСО 9001:2000; их влияние на обеспечение конкурентоспособности продукции. Для решения задач по проблеме создания и функционирования СМК создан Центр в составе Карагандинского государственного технического университета.

Conceptual aspects and actuality of the management systems of the MS ISO 9001:2000 quality introduction and development, their influence on the competitive products maintenance are presented in the article. For tasks solution to the problem of the management systems creating and functioning, Center was founded as a part of Karaghandy State Technical University.

Уровень качества жизни населения республики определяется, прежде всего, конкурентоспособностью и качеством выпускаемой продукции, безопасностью производственных процессов и объектов.

Вопросы обеспечения надлежащего качества продукции и услуг были актуальны во все времена, но особую остроту они приобрели в период становления и активного развития рыночных отношений.

Мировой опыт показывает, что научно-технический прогресс в таких странах, как Япония, Южная Корея и Китай был определен прорывом именно в качестве, позволившем им резко увеличить свой экспорт. Увеличение экспорта отечественных товаров в условиях постоянно растущих требований внешнего рынка невозможно без повышения их качества.

Сегодня среди составляющих конкурентоспособности товара на лидирующие позиции выходят потребительские свойства (функциональность, дизайн) и уровень сервиса. Именно то обстоятельство, что современный мировой рынок - это рынок покупателя, является **актуальным и побуждает разрабатывать методы повышения качества продукции.**

Современные методы управления качеством должны охватывать все этапы жизненного цикла изделий, начиная с изучения спроса (маркетинговых исследований) и кончая вопросами утилизации продукции.

Осознание того, что **качество** должно обеспечиваться в изделии или услугах на всех этапах жизненного цикла, и только это может **гарантировать устойчивость всех показателей качества**, изменило и сам характер того, что воспринимается потребителем продукции и услуг как гарантия качества. Это привело к наиболее важному изменению в

практике исследований и деятельности по обеспечению качества.

Эти изменения заключаются в следующем: простое подтверждение соответствия отдельных образцов продукции или услуг требованиям к ним потребителя, даже если это заключение выдано органом по сертификации, сегодня уже не воспринимается как гарантия сохранения этих характеристик в отношении всей приобретаемой продукции.

Для подтверждения способности к устойчивому качеству необходимы уже другие механизмы. И на современном этапе развития методов менеджмента качества такие механизмы созданы.

Общепризнанной **гарантией устойчивого качества** и подтверждения способности изготовителя обеспечить строгое выполнение требований контракта в отношении всего объема закупаемой продукции стало наличие у него специальной **системы менеджмента качества**, отвечающей международно признанным требованиям - стандартам ИСО серии 9000.

Модели систем качества по ИСО 9000 являются универсальными и применимы ко всем без исключения видам деятельности, что и определило их широкое внедрение: более 120 государств (на период 01.01.2001 г.) в качестве национальных приняли стандарты ИСО 9000.

Согласно постановления Коллегии Госстандарта Республики Казахстан от 2 февраля 2001 г. на территории Республики Казахстан введены в действие с 01.04.2001 г. международные стандарты ИСО серии 9000. Правительством Республики Казахстан принята Программа разработки и внедрения систем качества на предприятиях (утверждена протокольным совещанием № 17-5/И-44 от 19.02.2001 г.). Постановлением Правительства Республики Казахстан № 590 от 2 мая 2001 г. принята Республиканская программа "Качество" на 2001-2005 годы. В Программах предусмотрен комплекс мероприятий по разработке и внедрению систем качества и охраны окружающей среды на предприятиях республики, что обосновывает **необходимость и актуальность** проведения исследований по данному направлению.

Кроме того, процессы реформирования экономики Казахстана тесно связаны с реформированием национальных систем стандартизации, метрологии и сертификации, которые должны учитывать возрастание масштабов глобализации торговых отношений. Внедрение этих систем должно привести к сокращению инновационных циклов освоения продукции. Для этого необходимо ускорение темпов роста деятельности в области стандартизации и сертификации.

Международной организацией по стандартизации с 15 декабря 2000г. официально принята новая версия стандарта ИСО 9001:2000. Причины пересмотра стандартов ИСО серии 9000: 1994 следующие:

- установленный ИСО 5-летний срок пересмотра стандартов;
- проблемы с действующей моделью из 20-ти элементов;
- трудности применения малыми организациями;
- ориентация на производство;
- множество дополнительных стандартов;
- развитие требований потребителей;
- широкое распространение процессоориентированного подхода к менеджменту;
- необходимость совершенствования работы по качеству после сертификации.

По результатам опроса 1120 организаций в 40 странах мира комитетом ИСО были сформулированы требования пользователей стандартов к новой версии, основными из которых являются: большая согласованность со стандартами ИСО серии 14000; включение требований постоянного совершенствования; обеспечение удобства использования для организаций всех размеров и любых секторов экономики; легкость перехода от действующей вер-

сии к версии 2000.

В связи с этим все требования, содержащиеся в новом стандарте ИСО 9001: 2000, являются общими и запланированными для применения ко всем организациям независимо от вида, размера и поставляемой продукции. Кроме этого, введены новые требования, а именно: измерение удовлетворенности потребителя; повышенное внимание к ресурсам; измерения распространяются на систему, процессы и продукцию, включая услуги; анализ данных о функционировании системы; внутреннее общение.

В связи с введением перечисленных требований в названии стандарта ИСО 9001: 2000 нет слова «обеспечение», поскольку стандарт ориентирован как на обеспечение соответствия качества продукции установленным требованиям, так и на достижение удовлетворенности потребителей посредством эффективного применения системы, включая предупреждение несоответствий и процессы постоянного улучшения.

Новая структура стандарта построена на основе системного подхода, моделях процессов и наличии управления, которое предусматривается на стыке между отдельными процессами в рамках системы процессов, при их комбинации и взаимодействии.

Как показывает практика,

основными побудительными мотивами для сертификации систем качества зарубежными фирмами являются:

- стремление усилить конкурентные преимущества;
- требования заказчика (основного потребителя);
- получение льгот при кредитовании и страховании;
- преимущество при получении госзаказа;
- сокращение издержек;
- сокращение аудиторских проверок потребителями и партнерами;
- совершенствование организации и культуры производства;
- значительное сокращение брака и другие.

Целевые исследования в этой области проводила компания Регистр Ллойда. Объектом исследований послужило более 200 машиностроительных организаций. В качестве критериев сравнения были выбраны такие экономические показатели, как рентабельность, объем продаж на одного работающего, прибыль на одного работающего и инвестиции на одного работающего.

При сравнении этих показателей для крупных, средних и малых фирм, сертифицировавших системы качества, со средним значением по отрасли было установлено, что все

значения показателей по фирмам оказались в 1,5-2 раза выше, чем по отрасли.

Исследования, проведенные в девяти странах (Китай и страны Юго-Восточной Азии), показали,

что фирмы, внедрившие системы управления качеством и сертифицировавшие их на соответствие стандартам серии ИСО 9000, смогли значительно увеличить рыночные доли, расширить экспорт, повысить имидж своих товарных марок.

Таблица 1

ИНТЕРЕСЫ ПОТРЕБИТЕЛЯ; ИЗГОТОВИТЕЛЯ И ОБЩЕСТВА		
Потребитель	Изготовитель	Общество
1. Качество	1. Распространение на рынке	1. Уменьшение риска для третьих лиц
2. Соблюдение сроков поставки	2. Производительность	2. Минимальное загрязнение окружающей среды
3. Сервис	3. Достаточная прибыль	3. Сбережение ресурсов
4. Соответствие цены техническим характеристикам изделия	4. Уменьшение потерь по гарантии	4. Прочие социальные аспекты
5. Безопасность продукции, работ и услуг	5. Ответственность за продукцию	

В таблице 1 приведен перечень показателей для потребителя, изготовителя и общества от внедрения систем менеджмента качества.

Одним из принципов управления качеством является процессориентированный подход к формированию систем менеджмента качества.

Применение принципа включает:

- определение процесса для достижения желаемого результата;
- идентификацию и измерение "входов" в процесс и его результатов;
- определение участия подразделений и должностных лиц в реализации процесса;

- оценку рисков, последствий и влияния процесса на потребителей и других заинтересованных сторон;

- учёт при проектировании процесса всех влияющих на него факторов и элементов.

Описание процессов организации состоит из цикла PDCA: P - "планирование", D - "выполнение", C - "проверка, анализ, изучение", A - "коррекция, улучшение" [1].

На этапе "Plan (P) - планирование" необходимо ответить на шесть вопросов: What? - цели, требования; Why?-предпосылки; How? - технология, управляемые условия и ресурсы, Who? - исполнители; When? - сроки; Where? - место.

Отвечая на перечисленные вопросы, можно получить четкий план действий для всех циклов PDCA.

На этапе "Do (D) -выполнение" реализуются запланированные действия с учетом экономного использования всех ресурсов и достигаются некоторые показатели качества.

На этапе "Check (C) - проверка, анализ, изучение" проводится сопоставление достигнутых и планируемых показателей качества.

На этапе "Action (A) - коррекция, улучшение" анализируется возможность улучшения полученных результатов и проводятся корректирующие и предупреждающие действия.

Таким образом, циклы PDCA позволяют достаточно подробно описать не только отдельные процессы, но и рационально перейти к описанию взаимодействия процессов.

При внедрении и совершенствовании системы менеджмента качества необходимо разработать финансовые критерии применительно к процессам для содействия улучшению результативности и эффективности организации. Примеры финансовых критериев приведены в ИСО/ОПМС 9004: 2000 «Системы менеджмента качества. Рекомендации по улучшению деятельности».

Система менеджмента каче-

ства (СМК) в рамках ИСО 9001:2000 включает наиболее важные процессы, непосредственно определяющие удовлетворенность потребителя и вспомогательные процессы. Общее число процессов СМК, которые можно выделить для каждой организации, составляет [1]:

$$k$$

$$;=1$$

где N - число процессов СМК; k - число потоков деятельности, связанной с продукцией, внутри предприятия; n - число процессов на l -ом потоке деятельности; 4 - число этапов в цикле PDCA.

В МС ИСО 9001: 2000 можно выделить четыре макропроцесса: ответственность руководства; менеджмент ресурсов; процессы жизненного цикла продукции; измерение, анализ и улучшение. Для описания процессного подхода можно использовать методы из «Семи новых инструментов качества», например, матричную диаграмму, структурированные функции качества, методы Тагути и др. [2]. На наш взгляд описание макропроцессов рационально представлять блок-схемами алгоритмов, на основании которых составляются таблицы, содержащие требования стандарта, выполнение и виды работ, виды документов. Такие таблицы будут являться методическими рекомендациями для организаций при разработ-

ке СМК.

Такой подход определяет основные виды научных исследований, которые необходимо осуществить по данному направлению.

Разработка систем качества, даже по версии 1994 года, для большинства предприятий республики дело новое, а тем более по международному стандарту ИСО 9001: 2000. Необходимо уже сегодня начать исследования в области создания научно-методических основ и учебной литературы по системам менеджмента качества. Для реализации этих задач в Карагандинском государственном техническом университете создан Центр, деятельность которого планируется осуществлять в целях:

- совершенствования и расширения учебно-методической и научной деятельности КарГТУ в социально-гуманитарной, естественно-научной и технической областях, относящихся к проблемам стандартизации, метрологии и сер-

- тификации отечественной продукции, работ, услуг и охраны окружающей среды;

- внедрения достижений научно-технического прогресса, направленных на обеспечение конкурентоспособности и безопасности отечественной продукции, работ, услуг и охраны окружающей среды;

- подготовки и повышения квалификации специалистов в области стандартизации, метрологии, сертификации и управления качеством;

- совершенствования и разработки нормативно-методической документации в области стандартизации, метрологии и сертификации;

- совершенствования и координации научных исследований в области обеспечения качества продукции, работ и услуг;

- поддержания и укрепления учебных, научных и производственных связей КарГТУ с вузами, организациями, учреждениями и предприятиями Республики Казахстан, других стран в вопросах стандарти-

зации, метрологии и сертификации.

1. Владимирцев А.В., Марцинковский О.А., Шеханов Ю.Ф. Системы менеджмента качества и процессный подход // Методы ме-

неджмента качества. - 2001. - №2.

2. Владимирцев А.В., Шеханов Ю.Ф. Принцип постоянного улучшения в проектах МС ИСО семейства 9000: 2000 // Методы менеджмента качества. - 2000. - №10.

ЛИТЕРАТУРА

УДК 539.8

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОУДАРЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Д.К. Сулеев

*Казахский национальный технический университет
им. К. И. Сатпаева*

Мақалада металлдық материалдар соғылысуының мәселелері туралы зерттеулері ұсынылған. Қойылған міндеттерді шешу үшін классикалық, энергетикалық және Гельмголы - Гюггену әдістері қолданылған.

В статье представлены исследования по проблеме содержания металлических материалов. Приведены классический, энергетический и Гельмгольца-Гюйгенца методы решения поставленной задачи.

In the article the studies on the problem of collision of metallic stuffs are presented. The classic, energy and Helmholtz-Hughens methods of the set problem solution are brought up.

Проблеме соударения металлических материалов посвящено много работ, как ученых дальнего зарубежья Tong Chen, Darut Zheng [1]; Rossing T.S.D [2]; Warnaka G. [3]; Pennington D. [4]; Richards E.J., Lenzi A., Cuscheri Y [5]; Igarasi T. [6]; Crocker M., Price A. [7] и др., так и ученых СНГ Парфенов А.А. [8]; Злобинский Б.М. [9]; Павловская В.И., Кагерович А.Н., Лукьянов А.П [10]; Бринза В.Н., Москалева Л.Н., Працюк В.А [11]; Утепов Е.Б. [12]; В.Б. Степанов [13] и др.

В основном это работы прикладного характера, в которых разработаны устройства для исследования шума соударений; демпфирующие материалы;

изучены механизмы демпфирования металлических материалов; разработаны новые методы исследования параметров ударного шума и многое другое. В большинстве работ отсутствуют исследования процесса соударения теоретического характера. Прделанные работы теоретически не обоснованы. Так как исследуется пластина, необходимо учесть дифференциальные уравнения изгибных колебаний, использовать разложение мод в пространстве Фурье - спектр и.т. д. Данная работа призвана восполнить этот пробел.

Теоретические основы соударения металлических материалов представлены в виде решения задач.

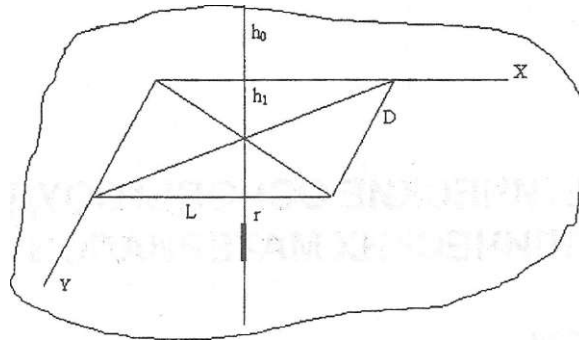


Рис. 1

Задача

Имеется металлическая прямоугольная пластина размером $L \times D$ и толщиной h , материал которой характеризуется модулем упругости Юнга E , коэффициентом Пуассона μ , плотностью ρ и коэффициентом потерь γ . На пластину с высоты h_0 падает металлический шарик массой m , который после соударения с пластиной, подскакивает на высоту h . На расстоянии r от

пластины (безразлично с какой стороны) измеряется звук. Требуется найти уровень этого звука.

Сначала найдём колебания пластины под действием такого импульсного воздействия. Будем искать смещение пластины в виде набора её собственных функций (мод), умноженных на временные коэффициенты, описывающие изменение колебания во времени:

$$S(x,y,t) = \sum_n A_n v_n(x,y) g_n(t) \quad (1)$$

где v - обозначает номер моды, каждая из которых имеет распределение амплитуды колебания по пластине, описываемое функцией $v_n(x,y)$.

Запишем дифференциальное уравнение изгибных колебаний пластины, возбуждаемой распределённой по её поверхности силой $p(x,y,t)$:

$$D \nabla^4 w - \rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = p(x,y,t) \quad (2)$$

Здесь для простоты принято обозначение:

$$D = \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)}$$

$m = \rho h$ - изгибная жесткость пластины и ее поверхностная масса.

Все члены уравнения (2) имеют размерность давления (H/m^2). После под-

становки выражения (1) в уравнение (2), получается:

$$\text{НИШ} \quad \frac{\rho H}{\bar{c}_x^2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 2 \frac{\rho H}{\bar{c}_y^2} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\rho H}{\bar{c}_z^2} \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + m \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = p(x, y, t). \quad (3)$$

Но из уравнения свободных гармонических колебаний пластины (уравнение (2), без правой части, где $v = (p_y((x, y)e^{j\omega t}))$, следует:

$$B(I + j\omega) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + m(I + j\omega)v = 0, C,$$

где ω — частота собственного колебания пластины (на резонансе моды номера v). С учётом этого уравнение (3) можно записать в виде:

$$m(Hj\omega) \nabla^2 v + mV \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = p(x, y, t). \quad (4)$$

Домножение уравнения (4) на $p_{ck}(x, y)$ и интегрирование по поверхности $S = L \times D$ пластины с учётом ортогональности собственных функций $p(x, y)$:

$$\int_{S_0} p \nabla^2 v \cdot p_{ck}(x, y) dx dy = i \int_{S_0} p_{ck}(x, y) p(x, y) dx dy = i \int_{S_0} p_{ck}(x, y) p(x, y) dx dy$$

$\langle p_i \rangle$ - среднее по поверхности пластины значение квадрата собственной функции, даёт уравнение для определения временной зависимости $g_v(t)$ колебаний:

$$T_{пл} \{I + j\omega\} \dot{g}_v(t) + T_{ш} \ddot{g}_v(t) = \int \int p(x, y, t) \langle p_{ck}(x, y) \rangle dx dy, \quad (5)$$

где $m_{ш} = \rho h \langle p_{ck}(x, y) \rangle S$ — колеблющаяся масса пластины.

В случае возбуждения колебаний точечной силой (в месте падения шарика) вида $p(x, y, t) = F(t) S(x_F, y_F)$, где $S(x_F, y_F)$ дельта - функция Дирака в точке приложения силы, получается:

$$\int \int F(t) S(x_F, y_F) \langle p_{ck}(x, y) \rangle dx dy = F(t) V v(x_F, y_F).$$

И уравнение (5) принимает вид:

$$T \cdot T \cdot I \frac{F a^2 g_v(t)}{L a -} + \alpha_v^2 \{ 1 + j r j \} g_v(t) = F(t) (p v(x_b y_F)). \quad (6)$$

Если пластину вывести из равновесия и предоставить самой себе, то $F(t) = S(x_f, y_f)$ = решением уравнения (6) будет:

$$g_v(t) = c_v e^{j \omega t / t},$$

где $\omega^* = \omega_v \sqrt{1 + j r j} = \omega_v (1 + j T / 2)$;

считается, что $r \ll 1$. Поскольку в момент приложения силы (соприкосновения шарика с пластиной), при $t = t_0$, отклонение пластины равно нулю, решение для $g_v(t)$ окончательно примет вид:

$$g_v(t - t_0) = c_v e^{j \omega (t - t_0)} \cdot \sin \omega (t - t_0), \quad (7)$$

где $S_v = \text{const}$.

Если взять величину ω , соответствующую значению ω_v , можно в коэффициенте S_v учесть частотную зависимость $\omega / (\omega_v)$. Поскольку в рассматриваемом случае пластина возбуждается коротким импульсом, имеет место соотношение:

U - импульс силы. Интегрирование с учётом этого уравнения (6) в пределах длительности импульса даёт:

$$\int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \frac{d g_v(t)}{dt} dt = \frac{U}{m t_0} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} f g_v(t) dt = \dots \quad (8)$$

Поскольку смещение пластины за время действия короткого импульса бесконечно мало (пластина начинает заметно колебаться после прекращения действия импульса от поступившей энергии удара), а до воздействия импульса ($t < t_0$) пластина была в покое, существенным будет только первый член в левой части уравнения (8). С учётом этого и выражения (7) получается:

$$g_v(t - t_f) = c_v \int_{t_f}^t f(x, y) \sin \omega_v(t - t_f) + e^{-\gamma(t - t_f)} \cos \omega_v(t - t_f) dt$$

$$c_v \int_{t_f}^t f(x, y) \sin \omega_v(t - t_f) dt \sim O_i$$

$$C_v \omega_v = V_v = \text{фн}(K_f, Y_f)$$

где Y_v - амплитуда скорости колебания моды V . Полное пространственно - временное распределение скорости колебания моды V составляет:

$$V_v(x, y, t) = \frac{U}{m_u} \int_{t_f}^t f(x, y) \sin \omega_v(t - t_f) dt \quad (9)$$

Полная нормальная составляющая скорости колебания пластины при импульсном возбуждении равна:

$$V_v(x, y, t) = Y V_v(x, y, t). \quad (10)$$

При возбуждении колебаний пластины шариком массой m , падающим с высоты h_0 , скорость его в момент соударения с пластиной составляет: $v_0 = \sqrt{2gh_0}$, где g —ускорение силы тяжести. По высоте отскока шарика h , можно найти его скорость в момент отрыва от пластины: $V = \sqrt{2gh}$, (поскольку скорость при обратном движении шарика равна $V = \sqrt{2gh}$ и в верхней точке, при $h = h_0$, она равна нулю $V = 0$).

Полный импульс силы, сообщаемый шариком пластине, составляет:

$$Ft = m(v_0 + V) = m\sqrt{2gh_0} \left(1 + \sqrt{\frac{h}{h_0}}\right) \quad (11)$$

Дальнейшее решение задачи может осуществляться двумя способами.

I. Классический подход

1. Каждая мода вида $V_r(p_r, x, y)$ раскладывается в пространственный Фурье - спектр:

$$Sv^y(c_x, 4l) = v_j \int_0^L \int_0^y \phi_y(x, y) e^{-j\omega t} dx dy.$$

Здесь ω - текущие волновые числа гармонических составляющих вида

$$dV_v = \frac{S}{4\pi} dc_x e$$

Поскольку при таком разложении считается, что нормальная компонента скорости $V_v(x, y)$ задана только на поверхности пластины, обычно полагают, что пластина заключена в плоский безграничный экран, являющийся её продолжением, на поверхности которого скорость равна нулю $V = 0$.

2. Каждая пространственная гармоника скорости порождает в примыкающей среде (воздухе) волну давления вида:

$$dp = \rho_0 \frac{dV_v}{dt} e^{-j\omega t},$$

где ω/c_0 - волновое число в среде при частоте ω , ρ_0 - плотность среды, $\frac{dV_v}{dt} = j\omega V_v$, координата направлена перпендикулярно пластине.

Таким образом, пространственно - волновой спектр давления в примыкающей среде составляет:

$$dp = \rho_0 S_v^v(4x, 4y) e^{-j\omega t}$$

$$\gg, \sim \rho_0 \omega V_v$$

3. Используя обратное преобразование Фурье, можно получить величину давления в точке пространства с координатами x, y, z , обусловленного колебанием V -ой моды пластины.

$$Pv(x, y, z) = \int \int S_p^v e^{-j\omega t} d\xi_s dCv$$

Интеграл в пределах $0 \leq z \leq x_{0v}$ учитывает как распространяющиеся (однородные) волны, для которых выполняется условие $k^2 < k_0^2$, так и неоднородные, для которых $k^2 > k_0^2$, в этом случае под корнем будет отрицательное число и $\sqrt{k^2 - k_0^2}$ перейдет в $i\sqrt{k_0^2 - k^2}$.

Особенность в знаменателе интеграла устраняется введением поглощения в среду (мнимой части в волновое число k_{Qr}). Неоднородные волны экспоненциально затухают при удалении от поверхности пластины и их учёт важен только на малых расстояниях от неё $z < x_{0v}/4$, где $x_{0z} = 2\pi l$ - длина волны в среде.

На расстояниях, превышающих указанное, будут преобладать распространяющиеся волны, вследствие чего интегрирование следует производить в пределах:

$$P_v(x, y, z) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} S_p^v e^{-k_z z} dk_x dk_y.$$

4. Полное давление в точке пространства с координатами x, y, z составляет:

$$P(x, y, z) = \sum_{v=1}^{\infty} P_v(x, y, z) \sin(k_z z) \cos(k_x x) \cos(k_y y).$$

Такое же давление будет в точке с координатами x, y, z . Количество учитываемых при этом мод определяется их вкладом в искомый результат. Граничные условия для пластины могут быть любыми, если для них удастся определить собственные функции $\psi_p(x, y)$ частоты ω_p . Применение методов требует расчётов на ЭВМ.

II. Энергетический метод.

1. В соответствии с работой [13] определяется пространственно - волновая спектральная плотность поверхностного распределения скорости колебания V - ой моды пластины:

$$S_v^v(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dot{\psi}_v(x, y) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} dx dy. \quad (12)$$

2. Определяется волновая спектральная плотность мощности пространственного распределения скорости колебания v - ой моды пластины:

$$W_v^v(\wedge 4_v) = \frac{\overline{TSv^v}^2}{DL} \quad (i3)$$

3. Доля среднего по поверхности пластины квадрата скорости колебания формируется пространственно-волновыми составляющими, заключёнными в узком интервале волновых чисел $d\omega_x$ и $d\omega_y$, равна:

$$dV_v^2 = \frac{1}{4\Gamma} W_v^v(\text{С.ч Л}) d\omega_x d\omega_y$$

4. Акустическая мощность, излучаемая при этом одной стороной пластины (которая, как и раньше, считается заключённой в экран), составляет:

$$dW = \frac{1}{2} \frac{\rho_0 c_0 DL W_v^v(\omega_x, \omega_y) d\omega_x d\omega_y}{4\pi r^2 \cos^2 \theta} = \frac{\rho_0 c_0 DL W_v^v(\omega_x, \omega_y) d\omega_x d\omega_y}{8\pi r^2 \cos^2 \theta}$$

$$\rho_0 c_0 DL W_v^v(\omega_x, \omega_y) d\omega_x d\omega_y$$

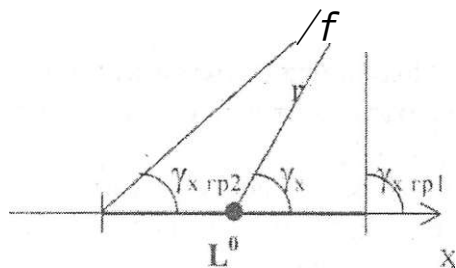
$$\frac{DL \cos^2 \theta}{r^2}$$

где $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ - углы, образуемые радиусом вектором \mathbf{r} , проведённым из геометрического центра пластины, с осями x', y', z' совмещённой с ним координатной системы.

5. Поскольку на небольших расстояниях от пластины $L = \mathbf{L}, \mathbf{D}$ полученный звук имеет вид пучка плоских волн, его энергия на расстоянии r распределяется по поверхности $dS = L \sin \omega_x D \sin \omega_y = D \sin \omega_x \sin \omega_y$, с учётом чего интенсивность звука составит:

Углы, под которыми точка наблюдения (где установлен микрофон) видна с противоположных краёв пластины [1], см. рис.2,

Рис.2 »М



$$- \gamma_x + \arctg \frac{L/2r \sin \gamma_x}{1 - L/2r \cos \gamma_x}; \quad \gamma_{s rp2} = \gamma_x \sim \arctg \frac{L/2r}{1 + L/2r \cos \gamma_x} \quad (15)$$

в случае, когда $2r/L, 2r/D > 1$

$\sin \gamma_t, \sin \gamma_v$ и $\cos \gamma$. на интервале интегрирования незначительно отличается от единицы. Поэтому формулу для интенсивности можно переписать в виде:

$$j = \frac{r \Gamma_{ii}}{8T} \int_{-Cv}^{w.v} \dots (16)$$

6. Полная интенсивность в точке наблюдения будет равна сумме интенсивностей, излучаемых всеми модами пластины:

$$\sum_{j=1}^{\infty} V_j \quad (17)$$

(коэффициент V_i получается от усреднения во времени $\sin^2 \dots$)

7. При практических расчётах количество учитываемых мод определяется их вкладом в суммарное поле излучения.

8. На расстояниях от пластины порядка $r > L, D$ неоднородные волны можно не учитывать вследствие их быстрого затухания по мере удаления от пластины.

Пример практического расчёта уровня шума пластины энергетическим методом

Имеется металлическая прямоугольная пластина размером $L \cdot D = 0,5 \times 0,5 \text{ м}^2$ и толщиной $h = 5 \cdot 10^{-3}$. Модуль Юнга материала пластины, его плотность, коэффициент Пуассона и коэффициент внутренних потерь составляют: $E = 2,2 \cdot 10^{11} \text{ Па}$; $\rho = 7,8 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$; $\nu = 0,29$; $\zeta = 0,01$,

В точку, соответствующую геометрическому центру пластины (на пересечении диагоналей), с высоты $h_0 = 0,4 \text{ м}$ падает металлический шарик массой $m_{ш} = 7,8 \cdot 10^{-3} \text{ кг}$, который отскакивает после соударения на высоту $h = 0,1$. Шум измеряется на расстоянии r от пластины.

Задача сравнительно просто решается только в том случае, когда пластина считается опёртой по контуру.

Тогда собственные функции пластины имеют вид:

$$w_{mn} = \sin \frac{j\pi x}{L} \sin \frac{k\pi y}{D} e^{-\zeta \omega t}$$

где $m, n = 1, 2, 3, \dots$ указывают количество изгибных полуволн, укладываемых по длине и ширине пластины. Подстановка этих функций в уравнении свободных колебаний пластины:

$$\Delta^2 w_{mn} + 2 \frac{d^2 w_{mn}}{dx^2} + \frac{d^2 w_{mn}}{dy^2} + \frac{d^2 w_{mn}}{dt^2} + m \frac{d^2 w_{mn}}{dt^2} = 0$$

даёт уравнение для нахождения собственных частот ω_{mn} колебания пластины

$$B(Kx^4 + 2 Kx^2 Ky^2 + Ky^4) = m \omega_{mn}^2, \text{ или}$$

$$\omega_{mn} = \frac{1}{m} \sqrt{Kx^4 + Ky^4}$$

где $Kx = -j - \zeta \omega$ - Du - компоненты волновых чисел колебания пластины вдоль осей x и y .

Учитывая также, что:

$\omega = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)L^3} \sim \rho \cdot c^2 \cdot \omega^2$ скорость продольной волны в пластине, а также, что $L \sim T$, окончательно получается

$$\omega_{mn} = \frac{c_y}{L} \sqrt{\frac{L^2}{12} (j^2 + k^2)} \quad (8).$$

(При любых других типах граничных условий - свободные, зажатые края пластины, собственные функции φ_{mn}) содержат комбинацию тригонометрических (\sin, \cos) и гиперболических (\sinh, \cosh) функций, в результате чего

$$\frac{d^4 W}{dx^4} - \lambda^4 W = 0 \quad \text{и} \quad \frac{d^4 W}{dy^4} - \mu^4 W = 0$$

и частотное уравнение не может быть получено в явном виде).

Подстановка параметров пластин в уравнение (18) дает следующие значения собственных частот (поскольку соударение шарика с пластиной происходит в ее центре, при $X_F = L/2$; $y_F = D/2$, Возбудятся только формы колебания с негативными номерами m, n , для которых $(\varphi_{mn}(x_F|y_F))^2 > 0$):

$$\omega_{11} = 626 \text{ раз/сек}; \quad \omega_{33} = \omega_{31} = 3130;$$

$$\omega_{53} = 5634;$$

$$\omega_{51} \sim \omega_{55} = 8138;$$

$$\omega_{35} = \omega_{53} = 10642; \quad \omega_{35} = 15650 \text{ раз/сек и т.д.}$$

2. Коэффициенты временного затухания мод равны:

$$\xi_{11} = \xi_{31} = \xi_{33} = 3,13; \quad S_{u1} = S_{u3} = 15,65;$$

$$\xi_{53} = 28,17; \quad S_{u5} = S_{u15} = 40,7;$$

$$J_{53} = 53,2; \quad S_{55} = 78,25 \text{ раз/сек.}$$

3. Для определения коэффициентов возбуждения мод

$$v_{mn} = \frac{1}{\omega_{mn}} \langle \dot{p}, \varphi_{mn}(x_F, y_F) \rangle$$

необходимо рассчитать импульс силы

$U = \int_0^t F dt$ по формуле (11), значения собственных функций $\varphi_{mn}(x_F, y_F)$ в месте соударения с шариком, а также $t_{пл} = \rho h \cdot S$

3.1. Импульс силы составляет $U = 1,47 \cdot 10^{-2} \text{ нсек.}$

3.2. Значения собственных функций

$$cp_{mn} = \sin \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi y}{D}$$

при

$x_F = L/2$; $y_F = D/2$ равны:

$$\Phi_{1,1} = 1; \Phi_{3,3} = 1; \Phi_{5,5} = 1$$

$$\Phi_{5,5} = \Phi_{5,5} = 1; \Phi_{3,5} = \Phi_{5,3} = 1; \Phi_{5,5} = 1 \text{ и т.д.}$$

В энергетическом расчете излучение определяется через квадрат скорости колебания пластины, благодаря чему для всех мод следует принять

$$\langle P^2_{\text{тп}}(x_F, y_F) \rangle = 1$$

3.3. Среднее значение квадрата собственных функций по поверхности пластины составляет:

$$\langle P^2_{\text{тп}} \rangle = \frac{1}{LD} \int_0^L \int_0^D \sin^2 \frac{m\pi x}{L} \sin^2 \frac{n\pi y}{D} dx dy = 1$$

С учетом этого колеблющаяся масса пластины равна:

$$m_{\text{тп}} = \frac{1}{4} \rho h L D = 2,44 \text{ кг}$$

3.4. Таким образом, коэффициенты возбуждения всех мод составляют:

$$U_{mn} = \frac{U}{m} \cdot k_{mn} \cdot (W_{mn})^2 = 6,02 \cdot 10^{11} \text{ М ссек}$$

4. Найдем далее по формуле (13) спектрально - волновую плотность мощности $W_v(\xi_x, \xi_y)$ скорости колебания пластины, для чего сначала определим спектрально - волновую амплитудную плотность по формуле (12):

$$S = 4 \cdot \frac{1}{2} \cdot V_{mn} \int_0^L \int_0^D \sin \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi y}{D} \cdot \xi_x \xi_y dx dy =$$

$$u - O \quad L \quad A \quad D$$

$$4 U_n = \frac{f_{ml}}{1-L} \left(\frac{1}{\cos \frac{\&L}{2}} \right)^2 \left(\frac{1}{\cos \frac{\&D}{2}} \right)^2$$

$$t(\dots) \approx \frac{16 \left(\frac{ml^2}{L} \right) \left(\frac{nm^2}{D} \right) \cos \frac{\dots}{2}}{v L u \dots}$$

Функция W'' имеет особенности при \dots и $hY - \dots$ в котором она принимает значение:

$$W \quad T i r f M = \frac{4 \left(\frac{Y \cos \dots}{(nl)^2} \right)}{D} \quad \text{либо}$$

$$W \quad D \quad 4 \left(\frac{ml^2}{\Lambda'} \right) \cos^2 \frac{\&L}{2} \quad \frac{D}{2}$$

$ml \dots nl$

$$W \quad K = \frac{16L \left(\frac{\dots}{D} \right) \cos \dots}{m^2 l^2 r_{III}^2} \quad \text{либо} \quad KD;$$

$$V_{т,п} \sim \frac{16f \cos^2 \frac{\pi}{2mn}}{L \sqrt{f/IL} \sqrt{LJ}}$$

Таким образом, при $\phi_{к\lambda} \ll \frac{mn}{2}$ спектральная плотность убывает с ростом номера моды приблизительно как $\frac{1}{mn^2}$ вблизи от особенности $\frac{mn}{L}$ (либо $\frac{Y_{in}}{D}$), как $\sim \frac{1}{\Gamma}$ или $\frac{1}{T}$. Поэтому, если принять в расчете одно из условий

$$z \ll \frac{L}{\sqrt{2}} \quad \text{или} \quad z \ll \frac{L}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\Gamma}$$

$\phi_{с,} \ll \{J, l(-j)\}$, либо $\phi_{с,} < 0,1$ (—), где берется большее из двух значений

$$\frac{L}{\sqrt{2}} \quad \text{или} \quad \frac{L}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\Gamma}$$

— или —, можно ожидать, что в расчете достаточно учитывать только первые две-три моды.

Примем далее, что измерение шума проводится в точке, также расположенной над центром пластины. Тогда, в соответствии с рис. 2 и формулами (15), получается:

$$\frac{1}{\phi_{с,}}$$

$$\frac{n}{2} \arctg \frac{L}{2\Gamma} = \arctg \frac{2z}{L}$$

откуда $\text{tg} \gamma_{с,г2} \sim \frac{2z}{L}$

$$\frac{\pi}{2} + \arctg \frac{L}{2\Gamma} = n - \arctg \frac{2\Gamma}{L}$$

Поскольку $L=D$, те же значения имеют углы $\gamma_{угр1}$ и $\gamma_{угр2}$

Учитывая, что пределы интегрирования величины $W^{(n)}$ ($\phi_{с,}, \phi_{у}$)

составляют $\pm \frac{\phi_{ср}}{2} = \int_{\phi_{ср} - 2' + Z_{с,у}^{\wedge}} = \phi_{ср} \cos \gamma_{с,у} > 2$ (см. выражение (16)) и что желательно выполнение условия

$< 0, 1(\sim)^2$, либо $\hat{\alpha}_{2,2p} < \frac{z_{пл}^2}{D}$. можно определить расстояние γ , начиная с которого будут справедливы данные условия (можно производить измерение шума).

Например, если в нашем случае учитывать моды вплоть до номера m, n (3,3), получается:

$$\hat{\alpha} = 5,634, \hat{\alpha}_{3,3} = \hat{\alpha} = \hat{\alpha} = 17,07;$$

$$4, \hat{\alpha} \cdot \hat{\alpha}^0, 316 \hat{\alpha} = 5,95 = \hat{\alpha}_{3,0,0,8} \hat{\alpha},$$

$$\text{откуда } \cos \hat{\alpha}, v, p-2 = \hat{\alpha} z = \frac{595}{z} = 0,394;$$

возв

$\gamma_{x, p2} = 69,6^\circ$ Учитывая даже, что

$$\gamma_{x, y, p1} = \arcsin \frac{2\Gamma}{\lambda^2 \gamma}, \text{ получаем:}$$

$$\Gamma = \lambda^2 \gamma_{xy, p2} = 0,612 \text{ м.}$$

Для мод 3,1 и 1,3:

$$\lambda_{0,3} = \lambda_{0,3}, \hat{\alpha} = 9,48; \hat{\alpha} = \lambda_{0,3} \cos \hat{\alpha}, v, p2 = 9,48 \cdot 0,349 = 3,3, \text{ что на}$$

много меньше величины $\frac{z_{пл}}{\lambda}, \frac{f}{\lambda}, \frac{p}{\lambda}$, являющихся крити

ческими значениями для $W]; x u W y^X$.

Для моды 1,1:

$$\lambda_{0,1} = 1,879; \hat{\alpha} = \lambda_{0,1} \cos \hat{\alpha}, v, p, = 1,897 - 0,349 = 0,66, \text{ что}$$

также много меньше критического значения $\hat{\alpha}_y = 2\lambda$.

5. Проведем численный расчет интервала

Для первой моды (1,1):

$$(39,4 - \phi c^2)^2 (39,4 - \phi y^2)^2$$

$$\phi_{c,y} = 0,66$$

$$\phi_{\text{пл}} = \cos^2 \rho$$

$$\cos^2 (0,25^\wedge)$$

Численные значения функции $F(\xi) = (39,4 - \xi^2)^2$ даны в таблице 1.

Таблица

	$F(\xi)$
0	6,44 10
0,1	6,44 10
0,2	6,44 10
0,3	6,44 10
0,4	6,43 10
0,5	6,42 10
0,6	6,41 10
0,7	6,4 10
0,8	6,39 10
0,9	6,38 10
1,0	6,37 10

Поскольку функция $F(\xi)$ симметрична относительно $\xi = 0,66$

$$-0,66$$

интегралы по ϕc и по ϕy будут одинаковыми, с учетом чего

$$\int_{-0,66}^{0,66} \int_{-0,66}^{0,66} w P(\text{fr}, \&) dZ_x dZ_y = 3,61 (8,5 \cdot 10^{-4})^2 = 2,61 \cdot 10^{-6}$$

Для моды (3,1) и (1,3)

$$K_{31} = 32,5 \frac{\cos^2(0,75\xi) \cos^2(0,25\xi)}{[355 - \xi^2]^2 [39,4 - \xi^2]^2};$$

$$\xi = 3,3$$

$$\cos^2(0,75g)$$

значение функции $F(0) = 355 - \xi^2$

дано в таблице 2.

Таблица 2

E	F (E)
0	$7,93 * 10^{''\circ}$
0,5	$6,8 * 10^{''\circ}$
1	$4,2 * 10^{''\circ}$
1,5	$1,4 * 10^{''\circ}$
2,0	$4 * 10^{''\text{H}}$
2,5	$7 * 10^{''\text{'}}$
3,0	$3,2 * 10^{''\circ}$
3,5	$6,4 * 10^{''\circ}$
4,0	$8,5 * 10^{''\circ}$
5,0	$6,1 * 10$
5,5	$2,94 * 10^0$
6,0	$4,0 * 10^{''\text{'''}}$
6,5	$2 * 10^{''\text{'}}$
7,0	$2,8 * 10$

$$j > (\text{£}) f \text{£s } 10 \text{ БЮ}^{-5}$$

0

3,3

$$J = 2,02 \cdot 10^1$$

-3,3

$$\cos^2(0,25g)$$

Значение функции $\wedge \text{—} \wedge^2 j^2$

в указанных пределах дано в таблице 3.

Таблица 3

E	F U)
0	$6,44 * 10^{''\text{H}}$
0,5	$6,4 * 10^{''\text{'}}$
1,0	$6,37 * 10^{''\text{'}}$
1,5	$6,27 * 10^{''\text{'}}$
2,0	$6,15 * 10^{''\text{H}}$
2,5	$5,98 * 10^{''\text{'}}$
3,0	$5,79 * 10^{''\text{H}}$
3,5	$5,57 * 10^{''\text{H}}$

$$J > (\text{£}) \wedge = 4,02 \cdot 10^{-3}$$

-3,3

Таким образом*

3,3 3,3

$$J \wedge^3 \text{—} \wedge^3 (4 \wedge J \wedge_v = 32,5 (2,02 \cdot 10^{-5}) (4,0240^{-3}) = 2,6440^{-6}$$

Таких мод две: 3.1 и 1.3, с учетом этого в расчете интенсивности интеграл надо удвоить: $2 \cdot 2,64 \cdot 10^{-6} = 5,2 \cdot 10^{-6}$.

Для моды 3.3:

$$W_{(0_x, 0_y)} = 292,5 \frac{\cos^2(0,75^\circ) \cos^2(0,75^\circ)}{[3,55 \cdot 10^{-5}]^2 [3,55 \cdot 10^{-5}]^2};$$

$$E_{wp} = 5,95$$

5,95

$$= (\text{см. табл. 2}) = 2,64 \cdot 10^{-5}$$

0

5,95

$$] > (E) / E = 5,28 \cdot 10^{-5}$$

-5,95

5,95

$$= (\text{см. табл. 2}) = 2,64 \cdot 10^{-5}$$

0

5,95 5,95

J

$$= 292,5(5,28 \cdot 10^{-5}) = 8,15 \cdot 10^{-7}$$

-5,95-5,95

6. Таким образом, расчет по формуле (16) дает:

J_н

$$= 1,38 \cdot 10^{-5} \text{ Вт/м}^2$$

$$J_{z3} = J_{31} = 1,41 \cdot 10^{-5} \text{ Вт/м}^2$$

$$J_{33} = 4,34 \cdot 10^{-6} \text{ Вт/м}^2$$

7. Полная интенсивность составит

$$J_y(t) = 1,38 \cdot 10^{-5} + 1,41 \cdot 10^{-5} + 4,34 \cdot 10^{-6}$$

Максимальное значение интенсивности получается при $t=0$.

Оно составляет:

$$J_z(0) = 2,317 \cdot 10^{-5} \text{ Вт/м}^2$$

Уровень интенсивности

$$L = 10 \lg \frac{J_z(0)}{J_h} = 10 \lg \frac{2,317 \cdot 10^{-5}}{10^{-12}} = 73,6 \text{ дБ.}$$

При этом, без учета вклада моды (3,3)

$$L = 10 \lg \frac{2,1 - 1(\Gamma^5)}{\dots} = 73,^2?$$

расстояние измерения должно составлять

$$r > 0,672 \text{ м}$$

8. Чтобы проводить измерение на более близком расстоянии, необходимо учитывать большее число мод.

III. Решение на основе интеграла Гельмгольца -Гюйгенса

3.1. От каждой моды колебания пластины вида:

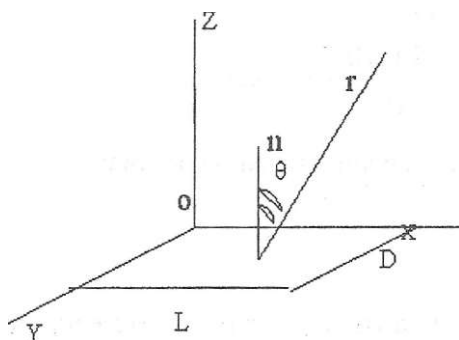
$p_m(x, y, t) = \dots \sin \dots \cos \dots$ *{см. формулу}* $p_m(x, y, t)$ -
 ковое давление в точке наблюдения m ищется путем численного интегрирова-
 ния на основе формулы Гельмгольца-Гюйгенса:

$$p_m(x, y, t) = \dots \int \dots \frac{p_j(r)}{r} dx dy,$$

Где $P_0 = 1,3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3} C_0 = 330 \text{ м/сек}$ - плотность воздуха и скорость звука в нем, \cos/C_0 - волновое число в воздухе, Θ - угол между радиусом - вектором r , проводимым из точек поверхности пластины в точку наблюдения, и внешней нормалью к пластине в этих точках.

3.2. Полное давление в точке наблюдения составляет:

При этом количество учитываемых мод (членов ряда) определяется их вкладом в величину $P_z(M, t)$.



Заключение

На основе анализа литературы по проблеме исследования соударения металлических материалов были сформулированы теоретические основы соударения металлических материалов. Теоретически найдены уровни звука при соударении прямоугольной пластины с металлическим шаром. Приведены классический, энергетический и Гельм-

гольца - Гюйгенса методы решения поставленной задачи.

Теоретические основы соударения металлических материалов являются результатом многочисленных экспериментальных работ аспирантов, кандидатов и докторов наук по проблеме соударения малозумных металлических материалов по методике МИСиС с 1971 по 2001гг.

ЛИТЕРАТУРА

1. Tong Chen, Darut Zheng. Acoustical properties of the gongle bells in China. - 13 Int. Conger/Acoust, Belgrade. 1989. - Belgrade, 1989, Vol. 3, pp. 49-52.
2. Rossing T.S.D. The acoustics of bells. - Amer. Science, 1984, v. 32, №5, pp. 440-447.
3. Warnaka G. And others at all Structural damping as a techigue Association Journal, 1972, v.33, № 1 pp. 1-11.
4. Pennington D. Basic shock and vibration theory - Recton Diokinson and Co.-USA, 1966, TP-219, pp. 1-11.
5. Richards E. I., Lenzi A., Cuscheri Y. On the predication of impact noise. Part VI. Distribution of acceleration noise with application to bottle impacts - Journal of Sound and Vibration, 1983, v. 90, № 1, pp. 59-80:
6. Игараси Т. и др. Нихон кикай гаккай ромбунсю. 1984. С-50.

№453, с. 804-847.

7. Crocker M., Price A. Damping in Plates. - Journal of sound and Vibration, 1969, v. IX, №3, pp. 501-504.

8. Парфенов А.А. К методике определения акустических характеристик металлических материалов. - В сб.: Проблемы инженерной охраны труда. - Науч. тр. Моск. ин-та стали и сплавов, № 127. - М.: Металлургия, 1981, с.75-79.

9. Злобинский Б.М., Муравьев В.А. Звукоизлучение чугунов. — Металловед, и терм, обработка металлов, 1971, № 11, с. 49-51.

10. Павловская В.И., Качерович А.Н., Лукьянов А.П. Акустика и электроакустическая аппаратура. - М.: Искусство, 1977. -224 е., ил.

11. Бринза В.Н., Москалева Л.Н., Працюк В.А. Исследование влияния карбидообразующих эле-

ментов в низколегированной стали на ее акустические свойства. — В сб.: Проблемы инженерной охраны труда. - Науч. тр. Моск. ин-та стали и сплавов, № 105. - М.: Металлургия, 1977.-С. 53-58.

12. Утепов Е.Б. Пути снижения производственного шума ударного происхождения в металлургических цехах: Дис. ... канд. техн. наук.-М., 1983.-251 е., ил.

13. В.Б. Степанов. Оценка угловых зависимостей интенсивности звука по энергетическим характеристикам распределения скорости колебания изучающей поверхности тела -Акустический журнал, 1996, - Т.42. - №3,-С. 426-431.

14. Утепов Е.Б, Сулеев Д.К., Бижанов Н.К и др. Научные основы создания «тихий» сплавов (проблема акустической экологии). - Алматы: ТОО «Принт», 2000. - 332с.

УДК 378.141

МОДЕЛЬ СПЕЦИАЛИСТА В УСЛОВИЯХ РЫНОЧНЫХ ОТНОШЕНИЙ

А.Ф. Проскуряков

*Павлодарский государственный университет
им. С. Торайгырова*

Мақалада қазіргі уақытта қалыптасып отырған нарықтық, қатынаста жұмыс атқаратын маман үлгісін құрастыру ережелері қарастырылған.

В статье рассмотрены принципы построения модели специалиста в свете складывающихся рыночных отношений.

In the article there have been considered the principles of the construction of the mode of a specialist in the light of the forming market relations.

Высшее техническое образование в современных условиях должно строиться с учетом, по крайней мере, двух основных объективно действующих факторов: научно-технического прогресса и развивающихся рыночных отношений. С одной стороны, развитие и внедрение информационных технологий, электронизации и автоматизации во все сферы человеческой деятельности диктует особую необходимость перестройки процесса подготовки инженерных кадров для машиностроительной отрасли как по содержанию, так и методике преподавания с целью приведения их в соответствие с научно-техническим про-

грессом. С другой стороны, развивающиеся рыночные отношения требуют придания учебному процессу определенной гибкости с целью оперативно реагировать на требования рынка труда, на требования заказчика по изменению, в том числе и расширению, сферы деятельности специалиста, его служебных и в первую очередь профессиональных обязанностей, и на этой основе оперативно вносить необходимые изменения в нормативную учебно-методическую документацию: учебные планы, рабочие программы и в учебный процесс в целом. И если первый фактор научно-технического прогресса не является чем-то новым для

высшей школы, а имеет уже свое историческое развитие, и до сих пор ему уделяется должное внимание в учебном процессе, то второй фактор рыночных отношений практически еще не занял своего приоритетного направления в организации подготовки инженерных кадров.

В то же время успех вуза в подготовке кадров должен быть обеспечен в ближайшей перспективе исключительно качеством подготовки специалистов. А требуемый уровень качества подготовки будет определяться не только прогрессивными направлениями в содержании образования, состоянием и показателями основных слагаемых качества: кадровым потенциалом, материальной базой и учебно-методическим обеспечением учебного процесса, - но и складывающейся конъюнктурой рынка труда, удовлетворением требований заказчика, формой представления (в том числе и рекламной) достижений вуза в подготовке кадров.

В условиях, когда потребителю кадров не навязываются выпускники вуза в соответствии с безусловным государственным распределением, когда сегодняшний выпускник не наделяется какими-либо льготами молодого специалиста, заказчик вправе ужесточить требования к выпускнику по критерию качества его подготовки. И здесь под ужесточением требований сле-

дует понимать не только какое-то количественное увеличение знаний и умений выпускника вуза, но вполне возможную со стороны заказчика свою трактовку, и свое понимание качества подготовки специалиста, требуемую его специализацию, профилизацию и т.п. Отсюда, если в эпоху государственного распределения за каждым выпускником было заранее закреплено место его будущей работы, где он, в результате несостоявшейся по каким-либо причинам требуемого качества подготовки, мог длительное время доучиваться, получая недостающие знания и умения непосредственно на производстве, то сегодняшний выпускник вуза должен практически сразу включаться в работу предприятия с соответствующим уровнем полезности - отдачи. Поэтому уже сегодня потребители кадров отказывают выпускникам-троечникам в устройстве на работу. Уже сегодня выдвигаются предложения по формированию государственных экзаменационных комиссий исключительно из представителей заказчиков с тем, чтобы на этапе итогового контроля сам заказчик мог оценить качество подготовки специалиста и удовлетворить свои кадровые потребности.

Таким образом, подготовку специалистов с высшим образованием необходимо нацелить в первую очередь на удовлетворение требова-

ний потребителя, а не на формирование благоприятных количественных показателей в статистической отчетности всей заинтересованной в этом структуры управления подготовкой кадров.

Нельзя исключить и тот факт, что для получения соответствующего признания в обществе перед вузом может быть поставлена задача получения сертификата качества какого-либо признанного в ближнем или дальнем зарубежье высшего учебного заведения, аналогично тому, как такого рода задача уже поставлена перед машиностроительными предприятиями республики.

Все изложенное выше заставляет вернуться к вопросу разработки системы качества подготовки специалиста, которая была начата еще в доперестроечный период и успешно забыта в процессе перестройки. Необходимо также организовать и непрерывно поддерживать систему управления качеством, под которой понимают методы и деятельность непрерывного оперативного характера, используемые для удовлетворения требований потребителя к качеству подготовки специалистов.

Важным этапом в разработке и внедрении системы управления качеством подготовки специалиста является документированное определение содержания образования с учетом выше высказанных требова-

ний. И здесь нужен документ, который бы регламентировал качество подготовки специалиста не самим фактом его наличия на кафедре, каковым является на сегодняшний день стандарт специальности, а служил бы действующим опорным инструментарием, который был бы ориентирован на рыночные отношения и на основе которого строился бы весь учебно-воспитательный процесс в вузе. Эта задача может быть успешно решена на основе формирования модели специалиста, опытный вариант которой создан на кафедре "Технология и оборудование машиностроения" для специальности 250140 "Технология машиностроения, металлорежущие станки и инструменты". На рис. 1 показано положение модели специалиста в системе принятой, нормативной учебно - методической документации [1,2, 3].

Модель специалиста следует считать нормативным учебно-методическим документом внутривузовского пользования, который разрабатывается кафедрой, ответственной за подготовку инженерных кадров каждой конкретно взятой специальности. Модель специалиста разрабатывается на основе действующих стандартов образования и специальности с учетом особенностей региона, отрасли, предприятий, требований заказчика и в целом складывающейся конъюнктуры рын-



Рис. 1. Место модели специалиста в учебной нормативно - методической документации. Проскуряков А. с]. «Модель специалиста в условиях рыночных отношений»

ка Труда и проходит утверждение в установленном для вуза порядке.

Из рис. 1 следует, что модель специалиста ни в коем случае не должна дублировать стандарт специальности, а являться тем звеном, которое устанавливает непосредственно тесную взаимосвязь между

вузом (производителем продукции) и заказчиком (потребителем продукции). Именно в этом аспекте должна разрабатываться и содержательная часть модели специалиста (ниже этот вопрос рассматривается в конкретизированном виде для специальности 250140 "Технология машиностро-

ния, металлорежущие станки и инструменты").

В своей содержательной части модель специалиста должна в первую очередь отражать возможную сферу его деятельности в современных условиях. Сфера деятельности устанавливается на основе изучения и анализа возможных мест работы, предполагаемых должностей и вида деятельности - прямых профессиональных обязанностей специалистов. Так, область возможного применения гледа инженера по специальности 250140 определяется объективно существующим многообразием (характерным для государств с рыночной экономикой) предприятий машиностроительного профиля, непосредственно производящих машиностроительную продукцию, а также различного рода предприятий сервисного характера: проектного, исследовательского, субъектов кооперации, экономически связанных с производителями продукции. К такого рода предприятиям относятся:

- заводы, акционерные общества, частные малые предприятия, занимающиеся производством машиностроительной продукции, ремонтом, восстановлением машиностроительного оборудования, сервисным обслуживанием машин и т.п.;
- структурные подразделения этих предприятий: механические и сборочные цехи основного производства; производства инструмента,

технологической и инструментальной оснастки, ремонтно-механические цехи;

- отделы главных специалистов: главного технолога, главного конструктора, главного механика;
- бюро, группы, лаборатории;
- проектно-конструкторские, технологические бюро и институты;
- научно-исследовательские, академические институты и т.п.

В этом многообразии предприятий инженер по специальности 250140 может занимать практически всю иерархическую цепочку должностей от начальной до конечной, т.е. от рядового инженера-технолога, инженера-механика, инженера-конструктора, младшего научного сотрудника и т.п. до главного специалиста, руководителя предприятия.

Анализ прямых профессиональных обязанностей специалиста позволяет выделить шесть основных видов деятельности инженера по специальности 250140: технологическую; конструкторскую; эксплуатационную; исследовательскую; организационно-управленческо-экономическую; информационно-компьютерную.

Для последующего формирования непосредственных показателей качества и, самое главное, функциональной схемы их обеспечения в процессе подготовки специа-

листа необходимо для каждого установленного выше вида деятельности обобщить и конкретизировать прямые профессиональные обязанности специалиста на основе априорной информации, изучения должностных инструкций и другой информации. Не исключено в данном случае и проведение соответствующих социологических исследований.

Например, конструкторский вид деятельности инженера по специальности 250140 включает в себя:

- конструирование технологического оборудования, станочных систем и комплексов;

- конструирование режущих инструментов, инструментальной и технологической оснастки; средств контроля качества продукции;

- конструирование нестандартного оборудования;

- разработку технической документации, авторский надзор за реализацией проектных решений;

- разработку нормалей, стандартов и другие виды работ.

Профессиональная ориентация специалиста является его визитной карточкой, а для заказчика является и своеобразным мерилom качества. Заказчика нельзя заинтересовать тем, что студент должен знать и уметь после изучения, например, дисциплины "Теоретическая механика", поскольку сам заказчик может вообще не иметь элементар-

ных понятий о содержании этой дисциплины. В то же время заказчик достаточно полно представляет, что должен уметь конструктор, технолог, мастер и т.д.

С учетом основных видов деятельности и профессиональных обязанностей в рассматриваемой модели необходимо аргументированно определить требуемый уровень качества подготовки специалиста в соответствии с уже принятой методикой решения такого рода задач в вузе. В настоящее время уровень качества подготовки специалиста отражается в соответствующей нормативной учебно-методической документации в виде требований к его знаниям и умениям по группам дисциплин (стандарт специальности) и по отдельным дисциплинам (типовые и рабочие учебные программы). Эти требования установлены в основном исходя из накопленного опыта подготовки кадров по каждой конкретно взятой специальности вне тесной связи с заказчиком. При их определении не исключен определенного рода формализм, субъективизм, идеологический подход доперестроечного периода. В то же время уровень качества подготовки специалиста является главным показателем, который регламентирует ответственность структурных подразделений и в целом вуза за обеспечение этого уровня и на основе которого решается вопрос

об аттестации специальности, продлении или выдачи новой лицензии на осуществление деятельности вуза по подготовке кадров. Поэтому необходимо кардинально изменить сам методический подход к регламентации требуемого уровня качества подготовки специалистов.

Регламентируемый уровень качества на этапе подготовки специалиста должен удовлетворять следующим требованиям:

- уровень качества подготовки должен быть дифференцирован по каждому виду деятельности специалиста;

- уровень качества должен быть технически обоснован в соответствии с достигнутыми научными и инженерными знаниями в каждом направлении деятельности специалиста;

- уровень качества должен соответствовать логической стройности, информационной завершенности; отражать требования заказчика, иметь техническую, организационную и экономическую базу для реализации;

С учетом этих требований в рассматриваемой модели выделено шесть основных информационных циклов в соответствии с видами деятельности специалиста: конструкторский, технологический, эксплуатационный, организационно-управленческо-экономический, исследовательский и информационно-ком-

пьютерный. Кроме того, выделены три дополнительных цикла, способствующие развитию общего интеллектуального потенциала специалиста и являющиеся общепринятыми для всех технических специальностей: естественно-научный, социально-гуманитарный и языки.

Согласно вида деятельности специалиста, его профессиональных обязанностей в рамках выделенных информационных циклов должен быть в конечном итоге определен уровень знаний и умений специалиста с учетом вышеизложенных требований. Эти требования должны быть достаточно детализированы с тем, чтобы в последующем свете этих требований строилось информационное обеспечение, т.е. содержательная часть учебного процесса. В методическом плане уровень качества и информационное обеспечение учебного процесса могут разрабатываться параллельно в тесной взаимосвязи. Для обеспечения наглядности и все тех же выше высказанных требований при выполнении этой работы рекомендуется использовать такой эффективный научно-методический инструментарий, как построение графа - дерева с несколькими ступенями ответвлений [рис. 2]. Ветви дерева определяют содержательную, информационную сторону учебного процесса с различной степенью детализации. Последовательность расположения ветвей опреде-

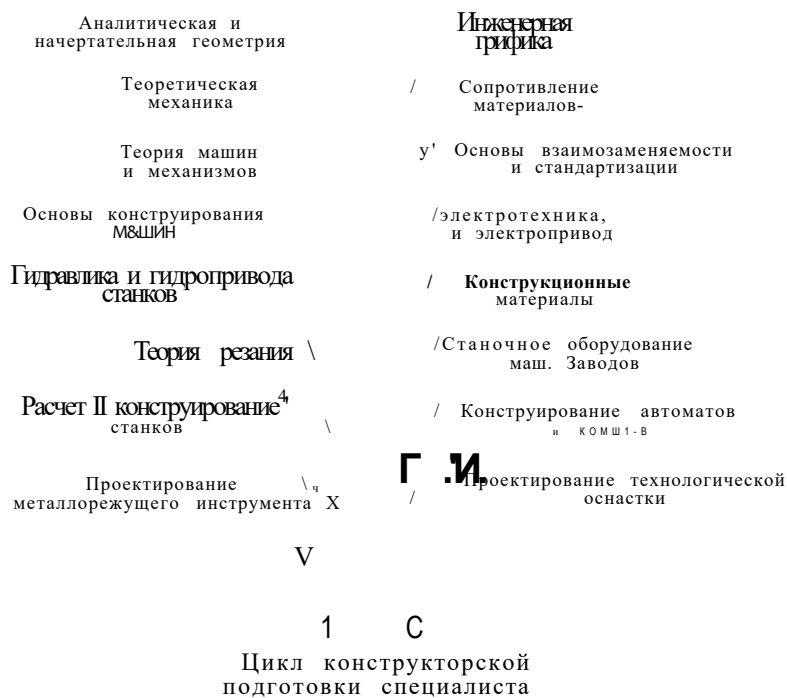


Рис. 2. Подграф (вторичное ветвление) информационного обеспечения конструкторской подготовки специалиста. Проскуряков А. Ф. «Модель специалиста в условиях рыночных отношений»

ляет логическую последовательность информационного обеспечения учебного процесса. Ствол дерева символизирует в данном случае систему знаний и умений специалиста, постоянно возрастающую в процессе его подготовки, начиная с его начальной стадии (1-го курса, первых дисциплин) и до конечной (завершения теоретической подготовки, сдачи госэкзамена, защиты дипломного проекта).

Первичное ветвление графа дерева осуществляется в соответствии с видами профессиональной

деятельности специалиста, т.е. в соответствии с выше выделенными информационными циклами: 6 основных и 3 дополнительных. В совокупности эти циклы и определяют целостную систему знаний и умений специалиста, которая реализуется в процессе его подготовки. Каждая первичная ветвь графа-дерева имеет свое ветвление (вторичное), которое определяет комплекс знаний и умений, получаемых студентом в процессе подготовки по какому-либо одному информационному циклу (на рис. 2 в качестве примера

представлен подграф - дерева конструкторской подготовки специалиста). Третичное ветвление соответствует блоку знаний и умений, приобретаемых студентами в процессе изучения каждой конкретно взятой дисциплины цикла. В конечном итоге ветвление заканчивается листвой дерева, где каждый листок соответствует элементам знаний и умений, которые несут в себе отдельные термины, понятия, принципы построения, физические закономерности, методы анализа, расчета и т.п., представляющие собой содержание конкретной темы, раздела отдельно взятой дисциплины.

Таким образом, в соответствии с построенной системой графов элементы знаний и умений (листья) объединяются в блоки (ветви 3-го уровня); блоки знаний и умений образуют циклы (ветви 2-го уровня), и, наконец, отдельные циклы образуют законченную систему знаний и умений специалиста (ветви 1-го уровня в совокупности со стволом графа-дерева).

Логическим завершением работы по формированию модели специалиста должна стать ее информационная часть, в которой необходимо определить:

- дополнительные указания по содержанию рабочих программ дисциплин, установленных стандартом специальности;

- перечень дисциплин, вводимых Советом вуза в данный момент времени и на перспективу;

- содержание рабочих программ по дисциплинам, установленным Советом вуза.

Однако, содержательная часть модели специалиста, как бы детализированно и глубоко она ни была продумана и разработана, не является гарантией того, что она состоится в процессе подготовки специалиста. Необходимо планомерная и повседневная работа по разработке и внедрению последующих элементов системы управления качеством подготовки в соответствии с разработанной моделью специалиста.

1. Образование высшее профессиональное ГОС О РК.3001 -2000. - Астана

2. Государственный стандарт основного высшего образования по специальности 2502 "Металлорежу-

щие станки и инструменты". - Алматы, 1997.

3. Государственный стандарт основного высшего образования по специальности 2501 "Технология машиностроения" -Алматы, 1996.

О МНОГОЗНАЧНОСТИ ТЕРМИНОВ «ТЕПЛОТА», «РАБОТА», «ЭНЕРГИЯ», «КОЛИЧЕСТВО ВЕЩЕСТВА»

В. В. Рынди́н

*Павлодарский государственный университет
им. С. Торайгырова*

Контексттерді талдай келгенде «жылу», «жұмыс», «энергия» терминдерінің көп мағыналылығы көрінеді. Осы терминдердің көп мағыналылығын төмендету әдістері баяндалғак «Молярлық» термині заттардың сандық ұқсастығы ретінде енгізіліп отыр.

Из анализа контекстов показывается многозначность терминов «теплота», «работа», «энергия». Изложены методы снижения многозначности этих терминов. Термин «молярность» вводится как аналог количества вещества.

From the analysis of contexts the polymeaning of the terms «heat», «work», «energy» is shown. The methods of decrease of a polymeaning of these terms are stated. The term «molarity» is entered as analogue of quantity of substance.

Теплота и работа — два понятия, сыгравшие большую роль в развитии термодинамики, нередко вносящие много неопределённости в эту строгую количественную науку. Термин «теплота» неоднократно изменял своё значение в связи с развитием представлений о теплоте, не является он однозначным и сейчас. Длительное время словом «теплота (тепло)» пользовались для обозначения теплового движения, внутренней энергии, молекулярно-кине-

тической энергии (тепловой энергии) и процесса теплообмена. Вряд ли существует в термодинамике слово, которое заставило бы студентов растеряться больше, чем слово «теплота». Сохраняющаяся неоднозначность и синонимичность термина «теплота» («тепло», «количество теплоты», «в форме теплоты» и др.) затрудняют обучение и в результате даже самый добросовестный и способный студент понять материал не в состоянии.

Но почему же в учебной литературе существует такая путаница с понятием теплоты? Какие причины породили путаницу? Чтобы правильно ответить на эти вопросы, нужно хотя бы бегло проследить историю возникновения этой путаницы. С этой целью ниже приведены выдержки из некоторых работ в хронологической последовательности¹.

«В наше время причина теплоты приписывается особой материи, которую большинство называет теплотворной, другие — эфиром, а некоторые — элементарным огнём ... Мы утверждаем, что нельзя приписывать теплоту тел сгущению какой-либо тонкой, специально для того предназначенной материи, но что теплота состоит из внутреннего вращательного **движения** (везде выделение моё. — В. Р.) связанной материи нагретого тела» [1, с. 90].

«... в течение почти двух столетий теплота рассматривалась не как **форма движения** обыкновенной материи, а как особая таинственная материя; только механическая теория теплоты осуществила здесь необходимое перевёртывание (с. 31). Но что сказать об изменении формы движения, или так называемой энергии? (с. 45). Но **теплота есть одна**

из форм так называемой «энергии»... [2, с. 57].

«**Энергия, которая передаётся** данному телу от более нагретого тела в результате теплового контакта между ними, без того, чтобы внешние условия, в которых находится рассматриваемое тело, изменялись и, следовательно, производилась работа одного тела над другим называется **теплом**. С точки зрения кинетической теории материи тепло связано с движением частиц ... и представляет собой микрофизическую **форму передачи энергии** от одного тела к другому» [3, с. 8].

«После открытия принципа эквивалентности стало ошибочным говорить о количестве теплоты, содержащейся в системе, независимо от того, вещество ли теплота или движение частиц тела. Теплота — это **движение в передаче**. Теплота ... является количественной **мерой передачи движения** ... беспорядочного. ... Максвелл, по-видимому, первый охарактеризовал работу, как передачу упорядоченного движения, а теплоту, как **передачу беспорядочного движения**» [4, с. 121].

«... теплота и работа не являются функциями состояния, а представляют собой **величины**, зависящие от пути процесса. Я настойчиво утверждал, что теплота **не есть**

Автором проанализировано более ста работ.

вид энергии, хотя и представляет собой форму движения. Утверждение, что теплота не есть вид энергии вызвало больше всего возражений... единственно правильное понимание тепла («теплого действия») как особой формы передачи энергии и количества тепла как энергии, передаваемой в этой особой форме» [5, с. 61].

«... теплота и работа являются формами передачи энергии ... теплота является энергией хаотического теплового движения микрочастиц, составляющих тело» [6, с. 24].

«... будем рассматривать термин «тепло» как сокращение более точного и обстоятельного определения «энергия, переходящая границы системы в форме тепла». Необходимо различать две формы энергообмена: перенос энергии ... в форме тепла и в форме работы. Теплообмен и совершение работы являются способами изменения внутренней энергии системы» [7, с.81].

«Передача энергии в результате обмена хаотическим, ненаправленным движением микрочастиц называется теплообменом, а количество переданной при этом энергии — количеством теплоты, теплотой процесса или теплотой... работа и теплота не шляются ни энергией ... ни видом энергии ... Работа и теплота

являются лишь количествами, измеряющими изменение материального движения Однако имеются лишь два принципиально различающихся способа передачи энергии (формы обмена энергией): работа и теплота» [8, с.14].

Д
«Энергия, которая может быть получена..., представляет собой одну лишь теплоту. Поэтому между количеством полученной системой теплоты и изменением её энергии должно существовать соотношение $\delta E_{\text{с}} = Q$, где Q — теплота, полученная системой» [9, с. 21].

«Обмен внутренней энергией ... без совершения механической работы называется теплообменом. В силу исторических условий изменение внутренней энергии тела при теплообмене часто называют количеством теплоты Q . Величина Q является числовым выражением энергии, переданной или полученной телом в процессе теплообмена» [10, с. 56].

«Тепловое движение—это особая форма движения материи..., а теплота—форма теплового движения. Передача энергии (формы обмена энергией) происходит двумя способами—работой L и теплотой Q » [11, с. 17].

«Количество энергии, передаваемой при неизменных внешних параметрах, представляет собой количество теплоты Q (иначе — теп-

ло), а сам процесс передачи энергии называется теплообменом [12, с. 9].

«Тепло и работа являются лишь формами передачи энергии, а не самой энергией. Именно поэтому нет смысла говорить о «запасе тепла» или о «запасе работы» [13, с. 18].

Из анализа контекстов можно отметить противоречивые суждения о том, что понимается под теплом (теплотой). Так, в [1, 2, 5, 11] утверждается, что теплота—одна из форм энергии; энергия хаотического движения микрочастиц тела— в [6]; в [5, 8], что теплота не шляется ни энергией, ни видом энергии, В работах [3, 4, 5, 7... 12] под теплотой (количеством теплоты) понимается энергия (количество энергии) перехода (энергия, переходящая границы системы в форме тепла) или изменение внутренней энергии «в форме тепла».

В качестве аргумента в пользу того, что теплота не является видом энергии, Путилов, а вслед за ним и другие авторы [3, 4, 6, 8, 13] видят в новом значении этого термина, обозначающего процесс, способ, микрофизическую форму передачи энергии. В результате противопоставляются различные категории — физические величины (именованные числа) и процесс (идеальное — реальное). То есть различные понятия,

определяемые термином «теплота», используются для взаимного «пояснения».

Ряд авторов для обозначения процесса вводят в параллель термину «теплота» («количество теплоты») термин «теплообмен», взяв его из теории теплообмена (теплопередачи) [12], и придерживаются такого разделения терминов на протяжении всего курса [7, 10]; другие же либо вводят термин «теплообмен» как исключение, отдавая дань «досадному пережитку» [5], либо, определяя теплообмен в начале курса (очевидно, отдавая дань «моде»), далее фактически отождествляют его с теплотой — формой (способом) передачи энергии [8, 11], что вновь делает термин «теплота» многозначным.

Во всех работах под теплотой явно или неявно понимается и само тепловое, хаотическое движение, содержащееся как в теле, так и передаваемое микрофизическим путём.

Обобщая всё это, можно отметить сохраняющуюся до наших дней синонимичность (теплород, тепловое движение, тепло, количество теплоты, теплота процесса, в форме теплоты, способ обмена энергией), категориальную многозначность (вещество, процесс, физическая величина) и видовую многознач-

иость (материя, её свойство — движение; вещество системы, переданное вещество; движение системы, переданное движение; энергия системы, переданная энергия, изменение энергии) **термина «теплота»**. Синонимичность и многозначность термина «теплота» приводит к тому, что студент (да и сам преподаватель) не в состоянии понять, что подразумевается под такими устойчивыми словосочетаниями, как «теплота превратилась в работу», «теплота не вид энергии, но количество энергии», «передача энергии происходит двумя способами — работой L и теплотой Q » (последнее буквально означает, что физические величины L и Q (предметы из мира идей) есть не что иное, как способы, процессы (предметы из мира вещей).

Чтобы разобраться во всём этом, сначала необходимо выяснить, какую категорию определяет термин «теплота». Поскольку все авторы едины в одном, что один из членов в уравнении первого закона термодинамики называется теплотой (количеством тепла, теплоты), то под теплотой следует понимать физическую величину (ФВ): в уравнения могут входить только физические величины. В связи с этим следует остановиться на правомочности использования словосочетания «количество

теплоты» применительно к физической величине — теплоте.

Строгое разграничение терминов «теплота» и «количество теплоты» приводится у Путилова, хотя и у него всё перепутано: теплота у него и ФВ, и форма движения, и форма передачи энергии, и не вид энергии; количество тепла — передаваемая энергия. В большинстве работ термины «теплота» и «количество теплоты» рассматриваются как **синонимы**, что недопустимо по следующим соображениям.

Согласно словарю русского языка С. И. Ожегова [14], «**количество**» — категория, характеризующая **предметы** и явления внешнего мира со стороны величины, объёма, числа. Следовательно, слово «количество» должно сопрягаться со словами, означающими категории, которые можно оценить количественно, например, такие, как материя (или вещество) или свойства материи (движение, протяжённость, инерционность и т. п.). Раз так, то теплота в словосочетании «количество теплоты» должна означать либо саму материю (теплород, флюид), либо свойство материи (движение). Тогда термин «количество теплоты» дословно должен означать количество теплорода, либо количество теплового, хаотического дви-

жения. Именно так и зародился этот термин, когда под теплотой (теплом) понимали теплород: количество теплоты \Leftrightarrow количество теплорода.

Если же под словом «теплота» в словосочетании «количество теплоты» понимать **ФВ** (что следует из синонимичного использования данных терминов), то получается **тавтология: «количество ФВ (теплоты) — количество количества»**, так как ФВ как раз и является количественным выражением каких-либо свойств. То же самое касается и таких словосочетаний, как «количество энергии» и «количество работы». Либо мы должны признать, что работа и энергия не являются физическими величинами в этих словосочетаниях (например, работа — направленное движение, а энергия — движение системы), либо получаем тавтологические словосочетания.

По мере развития науки термины «количество энергии» и «количество работы» стали заменяться терминами «энергия» и «работа». Что касается термина «количество теплоты (тепла)», то он до сих пор применяется в физике и в термодинамике для обозначения ФВ в параллель терминам «тепло» и «теплота», используемых для обозначения самого хаотического движения в сис-

теме или переданного. Однако сами авторы такого разделения до конца не придерживаются и рассматривают эти термины как синонимы, что приводит к отмеченной выше путанице.

К правильным словосочетаниям относятся «количество вещества» и «количество движения», где вещество и движение нельзя спутать с физическими величинами. Однако использовать эти термины для обозначения конкретных физических величин, как это принято сейчас, нецелесообразно, так как они обозначают обобщающие понятия, характеризующие запас вещества и движения в системе в самом общем виде.

После того, как физики установили, что мерами (количественными характеристиками) движения являются различные физические величины — импульс, момент импульса и энергия, — термин «количество движения» не рекомендуется использовать для обозначения конкретной ФВ (в механике об этом, видно, не знают, так как до сих пор используют его в качестве синонима импульса — как Декарт, который считал, что, кроме произведения массы на скорость, нет других количественных характеристик движения).

С точки зрения современной физики, термин "количество веще-

ства" так же, как и термин «количество движения», является многозначным термином, что затрудняет как понимание самой величины, обозначаемой этим термином, так и использование этого термина в контекстах. Применение термина "количество вещества" нередко встречает серьёзное возражение по трём причинам.

Во-первых, этот термин, как уже отмечалось, обозначает обобщающее понятие для таких количественных характеристик (ФВ) запаса (количества) материи (вещества) в системе, как масса, объём, число частиц, вес, и применять его для наименования одной конкретной ФВ, определяющей запас (количество) материи (вещества) в системе по числу укрупнённых порций частиц (молей), нецелесообразно.

Во-вторых, из-за возникающей тавтологии при применении этого термина. Например, в таких выражениях, как "количество вещества растворённого вещества равно 5 кмоль". Поэтому естественно стремление убрать "лишнее" слово "вещество" (что делать не следует) или переставить местами слова "количество" и "вещество" (что также делать не следует). Например, в таких выражениях: "количество водорода 5 кмоль", "число молей веще-

ства равно 5", "вещество количеством 5 моль", "количество 1 моль вещества водорода" и в других нарушена целостность термина "количество вещества".

В-третьих, критика термина "количество вещества" аргументируется тем, что при диссоциации многоатомных молекул вещества число "структурных элементов" в системе увеличивается, а, следовательно, увеличивается "количество вещества", что представляется мало логичным, если под количеством вещества понимать количество материи, запас вещества. В качестве примера можно привести пары йода, молекулы которого при низких температурах состоят из двух атомов, а при нагревании становятся одноатомными. "Количество вещества" при этом как бы удваивается, хотя масса системы, которая в данном случае также является характеристикой (мерой) запаса вещества в системе (количества вещества), не меняется. Получается парадокс: с одной стороны, количество вещества увеличилось (увеличилось число частиц в системе), а с другой стороны, количество вещества системы не изменилось (не изменилось количественное содержание материи в системе, о чём свидетельствует постоянство массы системы).

В связи с этим назрела необходимость заменить термин "количество вещества" на другой термин, лишённый указанных недостатков. Поскольку эта ФВ учитывает число структурных единиц системы, то её можно было бы назвать, например, "**структурность вещества**" (или просто "**структурность**"). Однако, учитывая широкое применение **молярных** величин, получаемых от деления какой-либо ФВ на количество вещества (например, **молярный** объём, **молярная** масса), то целесообразно эту величину назвать "**молярность** вещества", или просто **молярность**² (термин **мольность** не подходит, так как происходит от наименования единицы ФВ **моль**). Выбор термина "молярность" диктует необходимость обозначения этой ФВ (количества вещества) буквой μ (созвучной самому термину), которая менее многозначна по сравнению с применяемыми сейчас буквами для обозначения количества вещества ν (совпадает с обозначением частоты) и n (совпадает с обозначением концентрации частиц и показателем политропы).

Согласно приведённым контекстам понятие теплоты определя-

ется, исходя из понятия энергии: теплота (тепло) — одна из **форм энергии; энергия, которая передаётся; форма, способ передачи энергии; энергия** хаотического теплового движения микрочастиц, **количество** переданной при этом **энергии, изменение внутренней энергии; не являются ни энергией, ни видом энергии.**

Как видим, здесь термин «энергия» употребляется в различных значениях (о чём авторы не догадываются) и эти различные значения термина противопоставляются. Поскольку **передаваться, иметь форму** может только **объективная реальность**, то энергия — это материя или её свойство (например, движение); **количество же энергии** (объективной реальности), как и **изменение внутренней энергии, является физической величиной** (именованным числом — предметом из мира идей); **форма, способ передачи** энергии (объективной реальности) является **процессом**. Остановимся вкратце на историческом аспекте возникновения многозначности термина «энергия».

Физическая величина энергия была введена интуитивно в виде

² Раньше термин «молярность» использовался для наименования величин, получаемых от деления количества растворенного вещества на объем раствора. В настоящее время эту величину называют «молярная концентрация вещества», или «концентрация количества вещества».

³ Термин «живая сила» впервые ввел Г.Лейбниц в 1686 году для обозначения пойнгенсового произведения tc^2 , в отличие от «мертвой силы», например, силы сжатой пружины.

произведения массы на квадрат скорости ("живая сила"³ Гюйгенса). В начале XIX в механике, наряду с «живой силой», появляется термин "энергия" как эквивалент живой силы. Впервые этот термин был введён Томасом Юнгом в 1807 г. Для обеспечения эквивалентности между кинетической энергией и произведением силы на перемещение (работой) Кориолис в 1829 г. предложил ввести вместо величины mv^2 величину $mc^2/2$.

Даже в механике, не говоря о других науках, долго путали разные понятия: "сила", "энергия", "импульс" ("количество движения"). Разница между силой и энергией в XVIII в. не была ещё чётко понята. "Силу" (кинетическую энергию), заключённую в летящей пуле, путали с силой упругости пружины. Эта путаница осталась в названии единицы мощности — лошадиная сила.

Формирование понятия энергии завершило длительную эволюцию лейбницевской живой силы, с одной стороны, а с другой — положило конец двусмысленному понятию слова "сила" в ньютоновском и гюйгенсово-лейбницевском понимании, что имело место на протяжении всего XVIII века.

Постепенно энергетическое

описание процессов вытеснило силовое. В 70-х годах XIX в. стал распространяться взгляд на энергию как на нечто материальное, и её стали наделять свойствами объективной реальности. Распространение получили такие выражения, как "количество содержащейся энергии в теле", "запас энергии тела", "превращение материи в энергию" и т. п. То есть термин "энергия" становится синонимом термина "движение", что привело к категориальной многозначности термина "энергия" — наиболее вредной для учебников многозначности, когда в одном и том же контексте вначале говорится о ФВ, а затем об объективной реальности под тем же наименованием. Например, во многих учебниках энергия определяется как "физическая мера движения материи", т. е. как количественная характеристика движения — ФВ, а затем через неё определяется работа как «количество энергии» (количество ФВ), переданной макрофизическим путём.

Основоположники закона сохранения энергии (ЗСЭ) называли ЗСЭ законом сохранения силы (Ренкин впервые назвал закон сохранения силы законом сохранения энергии). Формулировка Майера: "В действительности существует только одна-единственная сила. Эта сила

/в вечной смене циркулирует как в мёртвой, так и в живой природе. . Нигде нельзя найти ни одного процесса, где не было бы изменения силы со стороны её формы". В настоящее время этот закон формулируется как закон сохранения и превращения энергии: энергия не исчезает и не возникает вновь, она лишь превращается из одного вида в другой в эквивалентных количествах.⁴

„Поскольку "циркулировать" и "превращаться" физические величины не могут, то, здесь под терминами "сила" и "энергия" следует понимать само движение и, следовательно, приведённые формулировки Майера и современных учебников физики выражают лишь философский (качественный) закон сохранения движения, сформулированный Р. Декартом и М. В. Ломоносовым, а не физический (количественный) закон сохранения энергии — как физической величины.

В то же время при различных изменениях формы движения "со-

храняющейся" величиной является не сила, а энергия. Поэтому в качестве частной (наряду с ЗСИ и ЗС момента импульса и др.) количественной формулировки закона сохранения движения при Изменении его формы будет закон сохранений значения физической величины — энергии (ЗСЭ): *движение не исчезает и не возникает вновь, оно лишь изменяет свою форму (вид) таким образом, что суммарное значение энергии во всех этих превращениях остаётся неизменным.*

До настоящего времени в физике и термодинамике не стихают споры о том, может ли тепло (теплота) содержаться в теле. Это связано с тем, что учёные под теплом понимают различные значения этого термина. Если под теплом (теплотой) понимать, как это принято в термодинамике, только переданное в хаотической форме движение, то нельзя говорить о содержании тепла в теле. Если же под теплотой понимать хаотическое движение мик-

⁴ До сих пор принято считать, что основоположники первого закона термодинамики в своих формулировках под силой понимали физическую величину — энергию. Но вот, что писал по этому поводу Энгельс: "Майер ... и Джоуль доказали превращение теплоты в механическую силу и механической силы в теплоту ... Гров доказал, что все так называемые физические силы — механическая сила, теплота, свет, электричество, магнетизм и даже так называемая химическая сила — переходят при известных условиях друг в друга без какой бы то ни было потери силы, и таким образом, доказал ещё раз, путём физического исследования, положение Декарта о том, что количество имеющегося в мире движения неизменно. Благодаря этому различные физические силы — эти, так сказать, неизменные "виды" физики — превратились в различным образом дифференцированные и переходящие по-определённым законам друг в друга форм движения" (выделено мною. — В. Р.).

рочастиц, как это принято в физике и теории теплообмена, то вполне допустимо говорить о содержании теплоты в теле, её потере и выработке на ТЭЦ. Однако, вопреки логике вещей, **количество теплоты** не является мерой **запаса теплоты** (ХД) в системе — ею является внутренняя энергия.

Недоразумений с применением понятий теплоты, тепла, количества тепла (теплоты) можно избежать, если уменьшить многозначность синонимичных терминов «теплота» и «тепло» путём разделения этих терминов для обозначения разных категорий. В связи с этим предлагается для обозначения **хаотического движения** в системе и переданного использовать термин **«тепло»** (например, теплообмен — это процесс переноса **тепла** (ХД) в пространстве, тепловой резервуар — резервуар, обладающий запасом хаотического, теплового движения), а для обозначения **физической величины**, характеризующей количество переданного тепла (ХД), — термин **«теплота»**⁵ или его синоним **«количество тепла»** (именно **тепла**—движения, переданного микроскопичес-

ким путём, а не **теплоты** — физической величины). При таком разграничении терминов говорить, что в теле содержится теплота (ФВ) или передаётся теплота, будет так же неграмотно, как говорить, что на нити висит масса (ФВ). Правильно говорить, что передаётся тепло, а мерой (количественной характеристикой) переданного тепла (ХД) является теплота (ФВ) или количество тепла (но не количество теплоты — как принято сейчас); количественной характеристикой тепла (ХД), содержащегося в теле, является внутренняя энергия.

Термин «работа» так же, как и термин «теплота», обладает категориальной многозначностью. Он обозначает и само упорядоченное **движение** тела, и переданное движение упорядоченным макроскопическим путём; **процесс** передачи движения макроскопическим путём; количество движения (энергии), переданного в упорядоченной форме, — **физическую величину**.

Для уменьшения многозначности терминов «теплота», «работа» и «энергия» предлагается выполнить следующее:

1) по возможности использо-

⁵ Термин «теплота» используется чаще для обозначения величины Q , чем термин «тепло» и «количество тепла».

вать эти термины для обозначения физических величин — количественных характеристик движения в системе или переданного;

2) для обозначения самого хаотического (теплового) движения в системе или переданного микрофизическим путём использовать термин «тепло» (а не «теплота»);

3) для наименования процессов передачи движения микрофизическим или макроскопическим путём использовать соответственно термины «теплообмен» (а не «тепло-

та»), «совершение работы» (а не «работа»),

В тех же случаях, когда термины физических величин используются в значении объективной реальности (например, в выражениях типа "внутренняя энергия превратилась в работу", "теплота переносится", "сила действует" и т. п.), следует предупредить читателя о том, что всё это иноязычные выражения, где под терминами физических величин следует понимать объективные реальности, и неоднократно, чтобы они это усвоили.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ломоносов М.В. Избранные произведения. Т. 1. Естественные науки и философия. — М.: Наука, 1986,—536 с.

2. Энгельс Ф. Диалектика природы. — М.: Госполитиздат, 1975.

3. Вукалович М.П., Новиков И.И. Техническая термодинамика: Учеб. для энергетич. спец. вузов. — М.: Энергия, 1968. — 496 е.: ил.

4. Кричевский И. Р. Понятия и основы термодинамики.— М.: Химия, 1970. — 440 е.: ил.

5. Путилов К. А. Термодинамика.—М.: Наука, 1971. — 375 с.: ил.

6. Кириллин В.А. и др. Техническая термодинамика: Учеб. для вузов. — 2-е изд. — М.: Энергия, 1974. — 448 е.: ил.

7. Бэр Г. Д. Техническая термодинамика. — М.: Мир, 1977. — 518 е.: ил.

8. Техническая термодинамика: Учеб. для машиностроит. спец. вузов/В.И. Крутов и др.—3-е изд., перераб. и доп.— М.:Высш. шк., 1991,—384 е.: ил.

9. Новиков И.И. Термодинамика: Учеб. пособие для студ. теплотехнич. спец. вузов.— М.: Машиностроение, 1984. — 592 е.: ил.

10. Жданов Л.С., Жданов Г.Л. Физика для средних специальных учебных заведений: Учебник.— М.: Наука, 1984. — 512 е.: ил.

11. Теплотехника: Учеб. для вузов /Под. ред. В.И. Крутова.— М.: Машиностроение, 1986. — 432 е.: ил.

УДК 681.3.06.001.63:664.723

ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЗАДАЧИ ПО РАСЧЕТУ ОБОРУДОВАНИЯ ДЛЯ СУШКИ ЗЕРНА

К. LSI Арынгазин, С.Р. Гирнис

Павлодарский государственный университет

им. С. Торайгырова

Мақалада кәсіпорындарында бидайды сақтау және қайта өңдеу, бидайды кешпіруші құрылғылардың есептеу негіздері жазылған, Object Pascal тіліндегі бағдарламалық реализация ерекшеліктері қарастырылған.

В статье изложены основы расчета оборудования для сушки зерна на предприятиях по его хранению и переработке, рассмотрены особенности программной реализации задачи на языке Object Pascal.

The article deals with the bases of calculations of the equipment for drying grains, the features of program realization of a task in language Object Pascal are considered.

Современный элеватор создан на основе почти столетнего опыта проектирования, строительства и эксплуатации. В настоящее время в практике развития элеваторной сети созданы совершенные зернохранилища в зависимости от их назначения, характера работы, оборудования и строительной конструкции.

Важная отличительная особенность элеватора от других промышленных сооружений - тесная

взаимопроникающая связь между его строительными конструкциями и транспортным и технологическим оборудованием. Комплект транспортного оборудования прямо зависит от величины, числа и конструкции вместимостей, их строительного материала и схемы расположения на площадке. Поэтому над проектом элеватора работает коллектив инженеров разных специальностей - строителей, механиков, технологов, электриков, экономистов. Только

это условие позволяет создать элеватор, полностью отвечающий своему назначению.

В целом элеватор как полностью механизированное зернохранилище, предназначенное для выполнения всех погрузочно-разгрузочных работ, полной технологической обработки и хранения зерна, можно рассматривать как комплексное объединение следующих основных устройств и сооружений:

- рабочее здание с технологическим и транспортным оборудованием;
- силосный корпус с транспортным и другим оборудованием;
- устройства для приемки зерна из автомобилей, вагонов и судов;
- устройства для отпуски зерна на различные виды транспорта и зерноперерабатывающие предприятия;
- цех отходов;
- системы аспирации и удаления отходов.

Для обеспечения сохранности сырого и влажного зерна его необходимо просушить до сухого состояния перед размещением в зернохранилища на длительное хранение. В ряде районов страны влажного и сырого зерна поступает до 70 - 90% общей заготовки. Поэтому своевременно просушить зерно можно толь-

ко в том случае, если правильно определена необходимая производительность и установлены соответствующие зерносушилки.

При проектировании новых предприятий и реконструкции существующих следует применять наиболее прогрессивные типы высокоэффективных зерносушильных аппаратов, оборудованных средствами автоматизации контроля сушильного агрегата.

Определение необходимого суточного объема сушки для предприятия в целом, необходимого суточного объема сушки основных и мелких партий зерна, необходимого количества зерносушильных аппаратов, расчетной суточной производительности зерносушильного аппарата для сушки одной партии, числа переключений на практике осуществляется вручную проектировщиками-специалистами. При этом результаты работы существенно зависят от опыта проектировщика и т.д. Поэтому есть смысл автоматизировать эти расчеты, чтобы сроки проектирования не были достаточно большими.

Разработанная программа «Сушка зерна» написана на языке Object Pascal для операционной системы Windows 95/98 и выше. Программа предназначена для решения задачи «Сушка зерна на предприя-

тиях по хранению и переработке зерна».

В зависимости от набора исходных данных программа позволяет:

1. Определить необходимый суточный объем сушки для предприятия в целом.

2. Установить необходимый суточный объем основных и мелких партий зерна.

3. Определить расчетную су-

точную производительность зерносушильного аппарата для сушки одной партии.

4. Определить необходимое количество зерносушильных аппаратов.

5. Определить число переключений.

На основе анализа данных о качестве зерна, поступающего за последние несколько лет, а также перспективы определяют необходимый суточный объем сушки для предприятия в целом по формуле:

$$P_p = 0,8 \cdot \frac{A_1 \cdot K_{nmX}}{K_{cxK,l}} + \frac{A_2 \cdot TC}{K_{c2} \cdot K_{..2}} + \frac{A}{K_{..K,}} \cdot \frac{K_{nmn}}{K_{..K,}} \quad (1),$$

где E_e (пл.т/сут)- необходимая расчетная производительность зерносушильных аппаратов.

A_1, A_2, \dots, A_u -количество сырого и влажного зерна различных партий, поступающих за период заготовок;

K_c - коэффициент суточной неравномерности;

K_{ent}, K_{m2}, K_{mm} - коэффициенты перевода физических тонн в

плановые.

$K_{n1}, K_{n2}, \dots, K_{un}$ - коэффициенты, учитывающие изменение производительности зерносушилок в зависимости от назначения просушиваемого зерна;

P - расчетный период заготовок.

Приведем пример описания входных данных программы «Сушка зерна» (таблица 1):

Таблица 1

Входные данные программы «Сушка зерна»

Обозначение	Имя переменной	Описание	Единицы измерения	Тип переменной
1	2	3	4	5
<i>Kc</i>	C	коэффициент суточной неравномерности		real
1	2	3	4	5
<i>PP</i>	PR	расчетный период заготовок	сутки	integer
<i>AKA2</i> , <i>...An</i>	PRO, PRO1, ..., PR04	количество поступающего зерна в зависимости от показателя качества	%	integer
<i>Knm!</i> <i>K,,,?:-</i> <i>Kmm</i>	KV1.KV2, KVN	коэффициенты перевода физических тонн в плановые		real
<i>Kch</i> <i>Kc2-</i> <i>KY</i>	KCR1, KCR2,..., KCRN	коэффициенты, учитывающие изменение производительности в зависимости от показателя качества		
<i>K,,,</i> <i>Kh'-</i> <i>K,,П</i>	KN1.KN2, ..., KHN	коэффициенты, учитывающие изменение производительности зерносушилок в зависимости от назначения просушиваемого зерна		real

В программе использованы понятные и содержательные имена переменных, соответствующие их назначению. Ввод длинных имен занимает немного больше времени, но позволяет быстро ориентироваться в тексте программы. Компилятор Delphi использует вместо длинных имен короткие обозначения, и конечный объем выполняемого файла не увеличивается.

В основной период заготовок

может поступать зерно различных культур, отличающееся по влажности и назначению, и поэтому нельзя заранее определить число слагаемых в формуле 1. При написании программы использовались динамические массивы, которые не требуют описания длины во время составления программы, а могут менять ее во время работы приложения.

Описания выходных данных приведены в таблице 2.

, ,
Таблица 2
Выходные данные программы «Сушка зерна»

Выходные данные программы «Сушка зерна»

Обозначение	Имя переменной	Описание	Единицы измерения	Тип переменной
1	2	3	4	5
Я,,	PZO	необходимое количество зерносушильных аппаратов для основных партий зерна	штук	real
л,,	PZM	необходимое количество зерносушильных аппаратов для мелких партий зерна	штук	real
&	QZCV1	необходимый суточный объем сушки для предприятия в целом	пл.т/сутки	real
£,,	QZCMI	расчетная суточная производительность зерносушильного аппарата	т/сутки	real
Па	PO	число переключений для основных партий зерна		real
Пм	PM	число переключений для мелких партий зерна		real

Для вывода полученных в результате расчета выходных данных служит поле редактирования, которое позволяет переносить данные в необходимые документы и базы данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пунков С.П., Румянцев Г.М. Проектирование элеваторов и хлебоприемных предприятий - М.: «Колос», 1982.- 239 с.
2. Малин Н.И. Справочник по сушке зерна - М.: Агропромиздат, 1986.- 159 с.
3. Тейксейра Стив, Пачеко Ксавье. Delphi 5. Руководство разработчика, том 1. Основные методы и технологии программирования. - М.: Издательский дом «Вильямс», 2000. - 832 с.
4. Фаронов В.В. Delphi 5. Руководство программиста. - М.: «Ноллидж», 2001.- 880 с.
5. Арынгазин К.Ш., Гирнис С.Р. Задача формирования схемы технологического процесса в САПР. Сб.: «Павлодарское Прииртышье: история и современность». - Материалы региональной научной конференции. - Павлодар, 1998. - с. 112.

УДК 519.872

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ УЗЛА СЕТИ

төмөжөт

Н.М. Зайцева, Н.А. Новицкая

Павлодарский государственный университет

им. С. Торайгырова

Интернет жүйесіндегі провайдерторан моделінің жұмысы көрестілген. Модель графигінің уақытқа қатысты сипаттамалары келтіріліп, модельдеудің нәтижелері талданған.

В статье рассматривается модель функционирования узла-провайдера сети Internet. Приводятся графики основных характеристик модели от времени. Анализируются результаты моделирования.

The model offunctioning of Web-provider of Internet is consided in the article. There are graphs of fundamental descriptions of model by time. The results of simulation are analysed.

Два последних десятилетия развития систем телекоммуникаций характеризуются появлением целого ряда новых технологий, интенсивно внедряющихся на телефонных сетях общего пользования. Особое место среди них занимает концепция Интеллектуальной Сети (Intelligent Network - IN), которая на сегодняшний день является одной из определяющих в развитии современной связи.

С внедрением концепции IN сети подвергаются значительным изменениям, так как обработка даже простого интеллектуального вызова вовлекает в себя совместную работу нескольких узлов сети, взаимодействующих посредством

системы сигнализации по общему каналу, что накладывает дополнительные условия при анализе производительности всей сети в целом или ее фрагментов.

При проектировании и расчете любых сетей связи большую роль играет разработка адекватных математических моделей и их анализ с целью повышения производительности. В то же самое время предсказать поведение трафика в IN достаточно трудно из-за недостатка статистических данных для обеспечения достоверной базы и динамики изменяющихся параметров, характеризующих трафик [1]. На сегодняшний день научные исследования, посвященные анализу интеллектуальных сетей

связи и их фрагментов, находятся на начальной фазе развития. Это объясняется, во-первых, тем, что необходимость в проведении подобного рода исследований возникла лишь недавно, во-вторых, высокой степенью сложности объектов исследования с точки зрения применения традиционных методов теории массового обслуживания.

Для решения ряда задач одного из провайдеров г. Павлодара была разработана модель работы узла сети Internet. При моделировании были сделаны следующие допущения: узел связи сети Internet рассматривался как система массового обслуживания. Заявки - поступающие от пользователей, звонки на подключение, каналы системы - порты модемов, через которые происходит связь, а обслуживание-это процесс подключения и осуществления связи.

Моделировалась многоканальная система массового обслуживания с отказами [2,3], т. к. звонок, посту-

пивший в тот момент, когда все модемы заняты, получает отказ. Поток заявок, поступающих для подключения их к сети, был принят простейшим. Рассматривалась модель работы узла сети Internet, имеющая 8 пропускающих каналов (модемов).

Предполагалось, что время обслуживания заявки есть случайная величина t , имеющая показательное распределение с плотностью

$$f(t) = \mu e^{-\mu t}, t > 0$$

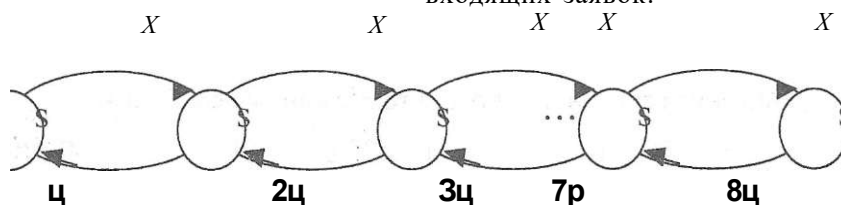
где μ - интенсивность потока выходящих заявок, который тоже является простейшим.

Возможные состояния системы:

S_0 -все каналы свободны,

S_j - занят один канал,

S_n -Все каналы заняты. Заявка, поступившая в тот момент, когда все каналы заняты, сразу же получает отказ. Граф состояний системы имеет вид, где $X \sim$ интенсивность потока входящих заявок:



Рассматривались следующие вероятности (система уравнений для нашего случая моделирования с 8-ю каналами):

$P(j)$ - вероятность того, что

система находится в состоянии S_0 ($P[S=S_0]$);

$P_i(t)$ - вероятность того, что система находится в состоянии

S_i ($P[S=S_i]$);

$P_j(t)$ - вероятность того, что система находится в состоянии S_j ($P[S=S_j]$);

$$\frac{dP_j(t)}{dt} = \lambda P_0(t) - (\mu + \nu) P_j(t) + \mu P_{j-1}(t) + \nu P_{j+1}(t)$$

<

at

$$\frac{dP_0(t)}{dt} = -\lambda P_0(t) + \mu P_1(t)$$

При моделировании рассматривался установившийся процесс, следовательно, приведенная выше система принимает вид:

$$X P_0 + I P_1 = 0$$

$$\lambda P_0 + (\mu + \nu) P_1 = 0$$

<

$$A - (\lambda + \mu + \nu) P_1 + (\mu + \nu) P_2 = 0$$

$$X P_2 - \mu P_3 = 0$$

В результате имеем систему алгебраических уравнений. Откуда:

$$P_1 = \frac{\lambda}{\mu + \nu} P_0, \quad P_2 = \frac{\lambda^2}{(\mu + \nu)^2} P_0, \quad \dots$$

Так как система обязательно находится в каком-либо из состояний S_0, S_1, \dots, S_p то

$$\sum_{j=0}^p P_j = 1$$

$$P_0 \left(1 + \frac{\lambda}{\mu + \nu} + \frac{\lambda^2}{(\mu + \nu)^2} + \dots \right) = 1$$

Значение вероятности того, что все каналы свободны:

$$P_0 = \frac{1}{1 + \frac{\lambda}{\mu + \nu} + \frac{\lambda^2}{(\mu + \nu)^2} + \dots}$$

Все интересующие вероятности вычисляются с помощью следующего соотношения:

$$P_0 = \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^m \frac{A^k}{k!}}$$

1 Основные характеристики данной системы:

Вероятность отказа: $P_0 = \frac{A^m}{m!}$

Относительная пропускная способность:

$$= 1 - P_0$$

Абсолютная пропускная способность: $A - Xq$

Среднее число занятых каналов:

I

Вероятность того, что произвольно взятый канал занят:

$$P_{mn} = \frac{R}{8}$$

На первом этапе моделирования для оценки значений l и m производился выбор требуемых данных из log-файла, создаваемого программой системного обслуживания узла провайдера, используемой для организации функционирования сети и введения статистических данных обо всех работающих пользователях системы.

Далее по формулам, приведенным выше, вычислялись основ-

ные параметры системы массового обслуживания: вероятности отказа системы, абсолютной пропускной способности, относительной пропускной способности, среднего числа занятых каналов, вероятности того, что произвольно взятый канал будет занят и вероятности того, что все каналы свободны. После этого по полученным значениям производилось построение графических зависимостей вычисленных параметров от времени.

Для моделирования были использованы Visual BASIC for Application, с помощью которого был реализован алгоритм функционирования модели и передача полученных значений в Excel. Затем были использованы графические возможности Excel для построения многочисленных графиков и диаграмм.

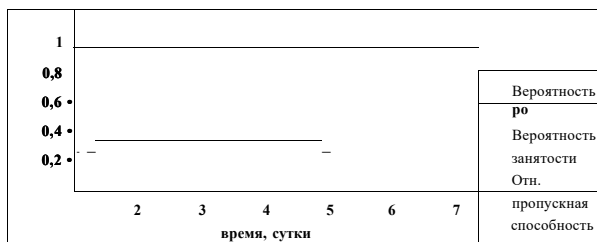


Рис. 1. Зависимость вероятностей P_0 , занятости и пропускной способности узла модели от времени на основе данных за неделю

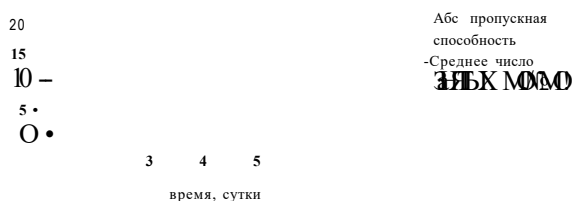


Рис. 2. Зависимость абсолютной пропускной способности узла и среднего числа занятых модемов модели от времени на основе данных за неделю

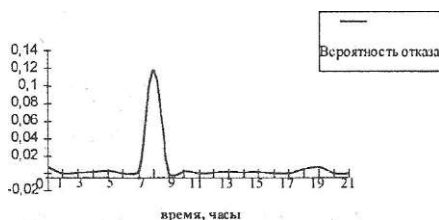


Рис. 3. Зависимость вероятности отказа узла модели от времени на основе данных за неделю

На основании полученных графиков (см. рис. 1,2,3) видно, что в течение первых пяти дней недели наблюдается стабильная работа системы с примерно одинаковой нагрузкой (в любой момент времени заняты 3-4 модема). К концу недели легко просматривается спад поступающих звонков и тем самым освобождение системы (простой нескольких каналов).

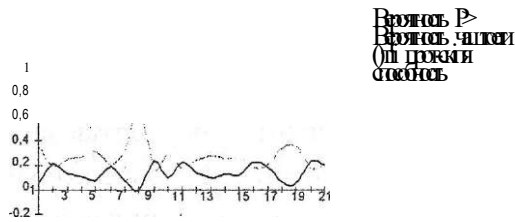


Рис. 4. Зависимость вероятностей P_0 , занятости и пропускной способности узла модели от времени на основе данных за сутки



Рис. 5. Зависимость абсолютной пропускной способности узла и среднего числа занятых модемов модели от времени на основе данных за сутки

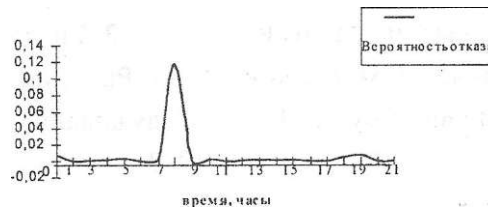


Рис. 6. Зависимость вероятности отказа узла модели от времени на основе данных за сутки

Базовый период исследования представленной системы выбирался на основе введенных данных, т. е. это либо данные за неделю, либо за сутки. Программный продукт, реализующий данную модель, предусматривает ввод значений количества каналов, интенсивности входящего и выходящего потоков с клавиатуры. Эта возможность реализована для просмотра различных способов построения узла.

Полученная модель адекватна работе реального узла сети

Internet. Это видно из приведенных графиков на рис. 1,2,3: при реальной интенсивности заявок практически половина модемов не используется, и система работает без отказов (относительная пропускная способность[^]).

Результаты моделирования позволили произвести полный анализ данной системы массового обслуживания и сделать вывод о необходимом количестве модемов для данного узла-провайдера, а так же возможности отключения части каналов (модемов) на профилактику в

различное время суток или недели в зависимости от интенсивности обращений пользователей узла.

Результаты статистической обработки загруженности узла могут быть использованы для оптимизации ценовой политики фирмы, в частности для снижения тарифов на подключение к узлу-провайдеру в "непопулярные" временные интервалы (см. рис.4,5,6).

Данная модель может быть использована так же при проведении проектных работ для любого узла связи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Анохин А.В. Применение теории систем массового обслуживания для анализа информационных систем // Актуальные направления исследований научно-технической информации. - М.: «Межвуз», 1985.

2. Саати Т.Л. Элементы теории массового обслуживания. - М.: «Советское радио», 1971.

3. Гнеденко Б.В., Коваленко И.Н. Введение в теорию массового обслуживания, 2-е изд. - М.: Наука, 1987.

УДК 658.011.56:519.873

ПОКАЗАТЕЛИ НАДЕЖНОСТИ ПЕРЕМОНИРУЕМЫХ ОБЪЕКТОВ

Р.А. Шагиева

**Павлодарский государственный университет
им. С. Торайгырова**

Сенімділіктің негізгі көрсеткіштері жұмыстың тоқтауының ықпималды модель нәтижесі бойынша бағаланады.

Основные показатели надёжности неремонтируемых объектов оцениваются по результатам вероятностного моделирования наработки до отказа.

The basic parameters of reliability are estimated by results of probable modeling of an operating time before failure (refusal).

Неремонтируемые объекты работают до первого отказа. Для оценки надежности используют вероятностные характеристики случайной величины - *наработки до отказа T*.

Полной характеристикой любой случайной величины является закон ее распределения, т. е. соотношение между возможными значениями случайной величины и соответствующими этим значениям вероятностями. Распределение наработки до отказа может быть описано с помощью различных показателей надежности неремонтируемых изделий. К числу таких показателей относятся: функция надежности $p(t)$,

плотность распределения наработки до отказа $f(t)$, интенсивность отказов $\lambda(t)$.

Функцией надёжности называют функцию, выражающую вероятность того, что T - случайная наработка до отказа объектов - будет больше заданной наработки $(0, t)$, отсчитываемой от начала эксплуатации, т. е.

$$p(t) = P\{T > st\}$$

Некоторые очевидные свойства $p(t)$:

1) $p(0) = 1$, т. е. можно рассматривать безотказную работу лишь тех объектов, которые были работоспособны в момент включения;

2) $p(t)$ является монотонно убывающей функцией заданной на-

работки t ;

3) $p(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$, т.е. любой объект со временем откажет.

Наряду с $p(t)$ используется функция ненадёжности:

$$q(t) = 1 - p(t) = P\{T < t\}$$

Она характеризует вероятность отказа объекта на интервале $(0; t)$. Функция ненадёжности является функцией распределения случайной величины T , эта функция иногда обозначается $F(t)$.

Во многих задачах в качестве показателя надёжности используется *вероятность безотказной работы* - вероятность того, что в пределах заданной наработки не возникает отказа объекта. При этом обычно имеют ввиду условную вероятность $p(t_1, t_2)$ безотказной работы в течение наработки от t_1 до t_2 при условии, что при t_1 объект был работоспособным. Эту условную вероятность можно определить по функции надёжности:

$$P(t_1, t_2) = \frac{P(h)}{P(h)}$$

Условная вероятность безотказной работы на интервале (t_1, t_2) равна отношению значений функции надёжности в начале и конце интервала.

Надёжность малых ремонтируемых объектов не всегда удобно характеризовать вероятностью безотказной работы, так как для небольших периодов заданной наработки значения $p(t_1, t_2)$ будут близкими к единице. Поэтому наряду с $p(t)$ используют

и другие показатели надёжности, например, плотность распределения наработки до отказа:

$$f(t) = \frac{dq(t)}{dt} = -\frac{dp(t)}{dt}$$

Плотность распределения наработки до отказа $f(t)$ является дифференциальной формой закона распределения наработки до отказа. График $f(t)$ часто называют «кривая распределения наработки до отказа». Плотность $f(t)$ является неотрицательной функцией, причём:

$$\int_0^{\infty} f(t) dt = 1$$

Величина $f(t)dt$ характеризует вероятность отказа за интервал наработки $(t, t + dt)$ объекта, взятого наугад из множества одинаковых объектов. При этом неизвестно, работоспособен ли этот объект к началу интервала (т.е. в момент t) или отказал ранее. Это не всегда удобно на практике, и $f(t)$ как самостоятельный показатель надёжности неремонтируемых объектов находит ограниченное применение. Чаще применяют *интенсивность отказов* $X(t)$ - условную плотность вероятности возникновения отказа неремонтируемого объекта, определяемую для рассматриваемой наработки при условии, что до этой наработки отказ не возник. Интенсивность отказов можно рассматривать как относительную скорость уменьшения зна-

чений функции надёжности с увеличением интервала (0, t).

$$P(t) = e^{-\int_0^t X(x)dx}$$

В качестве показателей надёжности неремонтируемых изделий применяют также числовые характеристики случайной наработки до отказа. Их обычно легче определить по экспериментальным данным, чем $P(t)$, $X(t)$, $f(t)$. Наиболее часто используют среднюю наработку до отказа (математическое ожидание наработки до отказа).

$$\bar{T} = \int_0^{\infty} P(t)dt$$

Для малых неремонтируемых объектов, например, элементов электронных схем средняя наработка до первого отказа является понятием условным, так как обычно они не эксплуатируются столь долго и устаревают гораздо раньше, чем успевают наработать m_1 .

Входной информацией для вычисления перечисленных выше оценок является совокупность значений случайной наработки t до отказа, полученных в результате заданного числа испытаний N .

Временная эпюра, поясняющая процесс моделирования значений наработки до отказа неремонтируемых объектов, изображена на рисунке 1.

Весь диапазон возможных значений наработки до отказа системы делится на p интервалов $\Delta t = \Delta T_i$, где $i = 1, 2, 3, \dots, p$. Выделяется оператор для подсчёта количества d_i отказов системы, происходящих на i -ый интервал наработки. В результате после N испытаний каждому интервалу будут соответствовать определённые числа d_i , $L_i > \dots > A_i^n$.

Выделяется также оператор для подсчёта накопленного количества отказов системы $\Gamma = d_1 + d_2 + \dots + d_k$ к началу рассматриваемого i -го интервала наработки.

Для вычисления оценки $P^*(t)$ вероятности безотказной работы (или вероятности отказа $q^*(t)$) удобно выделить оператор, который строит ряд чисел:

$$\Gamma_1 = d_1$$

$$\Gamma_2 = d_1 + d_2$$

$$\Gamma_i = A_i^1 + L_i^2 + \dots + A_i^i$$

$$\Gamma_n = d_1 + d_2 + \dots + d_n$$

Каждое из этих чисел представляет собой количество отказов системы, происходящее соответственно на интервал наработки (0, i), в течение которого вычисляется вероятность безотказной работы.

Блок-схема вычисления показателей надёжности неремонтируемых объектов представлена на рисунке 2.

После ввода исходных дан-

ных (m_i^* - средняя наработка до отказа и d_i - среднеквадратическое отклонение наработки до отказа) оператор 2 формирует значения случайной наработки до отказа элементов системы в соответствии с заданным законом распределения. Операторы 3 - 4 производят обработку результатов вероятностного моделирования и подготавливают исходные данные для вычисления показателей надёжности. Затем управление передаётся операторам 5 - 10, которые производят вычисление оценок показателей надёжности перемонтируемой системы. После этого оператор 11 строит графики по рассчитанным показателям $p^*(t)$, $q^*(t)$, $f^*(t)$, $X^*(t)$, а также выводит на экран значение средней наработки до отказа m_i^* и среднеквадратическое отклонение наработки до отказа d_i^* .

Программа, реализующая вышеприведённый алгоритм, написана в среде программирования Delphi 3.0. Результат работы программы представлен на рисунке 3. Время t моделируется по нормальному закону распределения по формуле:

$$t_j = m_i + 5 \cdot \frac{\sum_{V=1}^{12} \text{Random} - 6}{J}$$

где m_i^* - средняя наработка до отказа,

d_i^* - среднеквадратическое отклонение наработки до отказа.

Значения количества опытов и отрезков разбиения взяты с учётом скорости компьютера.

Графики функции ненадёжности $q(t)$ и функции надёжности $p(t)$ рассчитываются по формулам:

$$p^*(t) = 1 - N$$

Графики даны в масштабе (рисунки 3), $q(t)$ - монотонно возрастающий, а график $p(t)$ - монотонно убывающий. Кривая распределения наработки до отказа представляет собой усечённый нормальный закон распределения, среднее и среднеквадратическое отклонения равны исходным заданным значениям. Опыт эксплуатации многих технических устройств показывает, что функция интенсивности отказов в конце периода наработки имеет резко возрастающий вид вследствие износа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вентцель Б.С. Исследования операций. - М.: Советское радио, 1972.-552 с.
2. Дружинин Г.В. Надёжность автоматизированных систем. - М.: Энергия, 1977.-256 с.
3. Широков А.М. Надёжность радиоэлектронных устройств. - М.: Высшая школа, 1972. - 256 с.
4. Теория надёжности радиоэлектронных систем в примерах и задачах. /Под редакцией Дружинина Г.В. - М.: Энергия, 1976. - 448 с.

Δt_i Δt_i Δt_i Δt_i
 N I
 Рисунок 1. Временная
 эпюра процесса моделирования
 значений наработки до отказа
 неремонтируемого объекта.

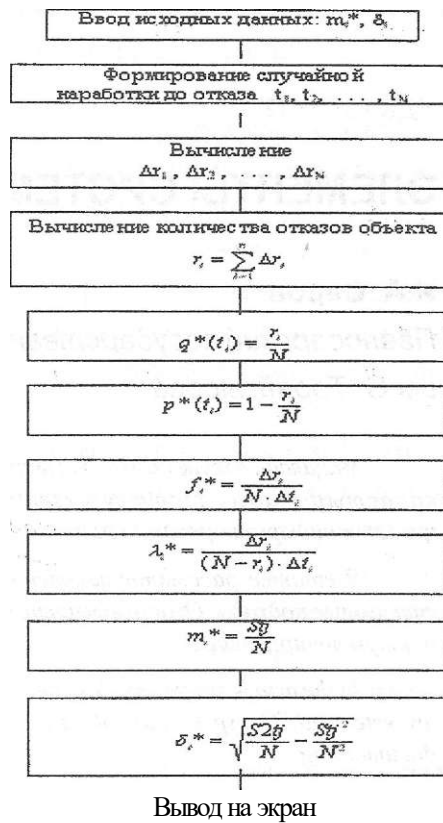


Рисунок 2. Блок-схема алгоритма программы

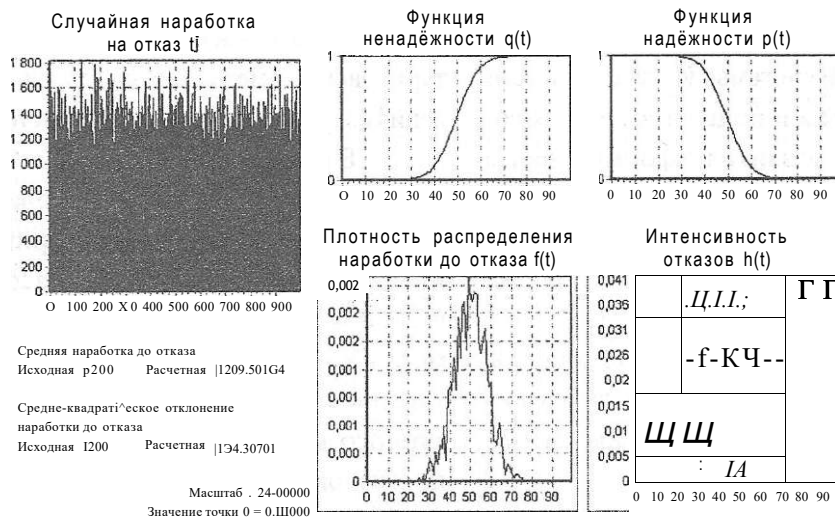


Рисунок 3. Результат работы программы

УДК 681.5.012

ЭЛЕМЕНТЫ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА

И.А. Серов

Павлодарский государственный университет

им. С. Торайгырова

Мақалада «жүйе дамуының циклы» сатылары мен жүйелік қолданулар қарастырылады. Зерттеу кезеңіде оның даму сатыларына және құжаттандыруға ерекше назар аударылады.

В статье рассматриваются стадии «цикла развития системы», системные подходы. Особое внимание уделяется стадии изучения, ее этапам и документированию.

In the article stages «cycle of development of a system», system approaches are esteemed. The special attention is given to stage of analysis, its phases and documenting.

В современных информационных системах широко используются компьютеры. Такие системы составлены из компонентов, называемых подсистемами, показывающих все характеристики системы. Из-за сложности этих систем и подсистем, для их создания и развития, сформировался структурный проектно-ориентированный процесс. Этот процесс, называемый «циклом развития системы», основан на концепции ряда стадий, через которые все системы должны пройти. Стадиями этого цикла являются изучение, создание, разработка и использование.

В прошлом главные трудности при создании и развитии компь-

ютерных и информационных систем возникали из-за недооценки сложностей, неспособности пользователей и программистов связаться, и, что наиболее важно, из-за недостатка структурированных методологий для управления созданием комплексных систем.

В настоящее время существует два принципиальных подхода в анализе и создании компьютерных информационных систем: классический метод и новый, структурный метод, хотя имеются предпосылки к увеличению использования структурного метода, реализованного в промышленности. Появление технологий четвертого и пятого поколений обеспечило машинные методы-

прототипы, расширяющие развитие процессов цикла развития. Однако, независимо от методов, используемых в системах анализа, финальный успех или неудача компьютерной информационной системы будут оценены её применимостью, что обосновывается восприятием системы основным пользователем.

Операционное управление имеет три информационных подуровня, каждый из которых в свою очередь имеет собственные информационные потребности:

- 1) нижнее управление, которое является надзорным;
- 2) среднее управление, тактическое;
- 3) верхнее управление, стратегическое.

Всё управление системами основывается на обратной связи и выполнении их целей.

Концепция *цикла* развилась до описания не только четырьмя фазами существования системы, но и родовидовыми связями между ними. *Цикл развития* компьютерных информационных систем имеет четыре стадии:

1. Стадия изучения, в которой задача определяется и анализируется, альтернативные решения оцениваются и дается рекомендация на общем проектном уровне.
2. Стадия проектирования, в которой детально проектируется сис-

тема, выбранная на стадии изучения.

3. Стадия разработки, в которой создается система, спроектированная на второй стадии.

4. Стадия применения, в которой разработанная система устанавливается, используется и обслуживается.

В конце каждой стадии, для перехода к следующей, необходим пересмотр сложных иерархических управлений. Документирование идет параллельно эффективной работе *цикла развития*, она накапливается на всем протяжении каждой стадии этого цикла.

Важнейшей сущностью документов являются:

1. Эффективная детализация, созданная во время стадии изучения.
2. Проектная детализация, созданная на стадии проектирования.
3. Системная детализация, созданная на стадии разработки.

Особо следует отметить важность формы представления системы управления. Пользователь является конечным владельцем элементами данных, которые будут собраны, типом и стилем формы, которые будут использованы и, конечно, размещением формы. Изготовитель формы является ответственным за её финальное создание согласно специфическим требованиям пользователя. Однако обязанность системного аналитика координировать создание фор-

мы усилиями пользователя и изготовителя формы. Во многих случаях эта задача координации делается проще с использованием персонала компьютеров и специализированного программного обеспечения. Автоматизация скорости процесса создания позволяет пользователю увидеть точно, каким может быть финальное представление.

Чтобы помочь пользователю, аналитик должен быть знаком с основными частями, типами и стилями формы представления. При этом он должен описать пять частей формы представления: заголовок, инструкции (команды), верхняя часть, тело и заключение. Тип формы определяется сложностью производителей системы.

Также аналитик должен всегда знать следующие принципы создания формы:

1. Законченная форма должна быть проста в использовании.
2. Форма не должна собирать данные, которые не будут использоваться в системе.
3. Форма не должна быть излишне «дорога».
4. Форма должна легко заполняться.

Системный аналитик является также ответственным за управление формами, координирование и создание форм или модификацией между пользователями и администраторами. Примеры форм, отвечающих требова-

ниям, изображены на рисунках 1 и 2.

Структурный метод для системного анализа и конструирования подчеркивает, «*чем*» должно быть сделано прежде, чем «*как*» это будет сделано. Структурный метод имеет три существенных требования к документации:

1. Описание отношений между данными и процессом передачи данных.
2. Определение всех структур данных.
3. Технические требования для всех основных процессов преобразования.

Стадия изучения является первой из четырех стадий *цикла развития* системы. Эта стадия, в которой проблема информационной системы бизнеса идентифицируется, определяется эффективность системы, оцениваются альтернативные решения и определяется наиболее полное решение для создания системы. Стадия изучения начинается с письменной инструкции пользовательской потребности, называемой «запрос информационной службы». Обычно это ограниченный запрос информационной службы, так как проблема полностью не определена, поэтому системный аналитик требует периода времени для ознакомления. Начальное исследование выполняется для этих целей. В заключение начального исследования аналитик гото-

вит изменения запроса информационной службы для обзора с пользователем. Результатом этого обзора является письменное соглашение, называемое директивой проекта между пользователем и организацией обслуживания информации.

Начало исследований является началом письменного запроса для поддержки информационной службы, называемого запросом информационного обслуживания. Запрос информационного обслуживания может подвергнуться некоторым изменениям, потому что он становится письменным контрактом, признанным директивой проекта между пользователем и организацией обслуживания информации. Четыре важных действия весьма эффективны в начале исследования:

1. Общий анализ.
2. Установление фактов.
3. Анализ фактов.
4. Организация и представление результатов.

Некоторые полезные методы поиска фактов: сбор данных, корреспонденция и анкетные вопросы, персональные интервью, наблюдения, исследования. Анализ фактов включает методы: анализ элементов данных, анализ ввода-вывода, повторение анализа данных, анализ использования отчета. Диаграммы потока данных и другие методы блок-схем являются значимыми повсюду при

установлении и анализе данных.

После завершения действий по анализу данных системный аналитик выделяет основного пользователя информационной системы. Это человек, который на практике примет или забракует систему. Также после установления данных аналитик должен быть способен подготовить изменения запроса информационного обслуживания для обзора пользователем. Результат этого обзора является финальной версией запроса информационного обслуживания - директивой проекта. Это устанавливает область, или контекст информационной системы и инициализирует формальное определение эффективности ожидаемой системы и всесторонний анализ выполнимости предложенной информационной системы.

Определение эффективности системы является переходом от требования логической эффективности к физической. Это включает инструкции общих связей, выделение определенной цели, описание выводов. Переход выполняется в четыре этапа:

1. Директива проекта, подготовленная по окончании начального исследования, используется для описания потока данных и процессов их преобразования. Результатом является логическая модель новой или измененной системы.

: 2. Описание общих связей, которые являются условиями, ограничивающими все решения, доступные аналитику для рассматривания, заявлены ясно.

3. Определенные цели, которые должны встречаться в информационной системе, получают из целей, заявленных в директиве проекта. Они - измеримые результаты эффективности системы, которые могут быть связаны с системными выводами.

4. Наконец, описание каждого системного ввода. Листы технических требований ввода используют для описания твердых и программных копий выводов. Они разрабатываются, чтобы быть ориентированными на пользователя; сопровождаются списком элементов данных, полученных из вводимого словаря данных, что объясняет все элементы данных, которые появляются на листах технических требований вывода.

После завершения действий по описанию эффективности системы системный аналитик должен готовить оценку выполнимости альтернативных систем.

Цель анализа выполнимости - выделить кандидата системы, оценить системы, основываясь на соотношениях по стоимости и эффективности. Девять шагов эффективного анализа выполнимости:

1. Формирование системы.

2. Обзор потока данных системы.

3. Разработка кандидатов системы.

4. Выполнение предварительной оценки кандидатов.

5. Подготовка детального описания кандидатов.

6. Выделение значимых характеристик системы.

7. Определение эффективности и стоимости для каждой системы.

8. Сопровождение характеристик эффективности и стоимости системы степенью важности.

9. Выбор лучшего кандидата.

Три матрицы - полезные инструменты при выполнении шагов с четвертого по девятый:

1. Матрица кандидата системы: таблица, перечисляющая функции, которые будут выполнены, и альтернативная система для их выполнения.

2. Матрица оценки кандидата: таблица содержит список критериев оценки и нормы альтернативных систем в терминах этих критериев.

3. Матрица взвешенной оценки кандидата: таблица, которая содержит весовую оценку кандидата, включающую его важность, и номер оценки.

Матрица взвешенной оценки кандидата является средством вычисления всеобщего количества для каждого. Кандидат с самым высоким общим количеством выделяется как

«наилучшая система». Наилучшей системой обычно является система, которая соответствует требованиям эффективности за наименьшую стоимость. После завершения периода концентрированного изучения, аналитик должен подготовить обсуждение всех кандидатов с основным пользователем и сделать рекомендации.

При заключении действий стадии изучения создается отчет, который является основой для обзора стадии изучения с основным пользователем и управляет воздействием информационной системы. Отчет этапа изучения имеет пять основных частей:

1. Системная область.
2. Заключение и рекоменда-

ции.

3. Технические требования эффективности.

4. Списки планов и стоимости.

5. Приложение.

Технические требования эффективности - центральный элемент отчета стадии изучения. Требования записываются на языке, понятном пользователю, и описывают внешнюю и внутреннюю эффективность информационной системы. Отчет стадии изучения включает законченный план проекта и графики стоимости. Главные промежуточные отчеты для всех стадий, обеспечивающих обзор всего проекта, и детальные промежуточные отчеты для стадии конструирования - это следующие главные действия.

ЛИТЕРАТУРА

1. Annette Mastrolia-Tynan. Information processing. - Gregg Division / Mc Gran-Hill Book Company, 1998.
2. Charles J. Benton. The data base guide. - A Prentice-Hall Publishing and Communication Company, 1997.
3. David M. Kroenke. Database processing: Fundamentals, Design, Implementation. - Science Research Associates, 1994.
4. Edward M. Reingold, Wilfred J. Hansen. Data Structure. - Little, Brown and Company, 1995.
5. Jacqnetta Megarry. Computer world. - A Gateway Fact Book Warwick Press, 1984.
6. Marilyn K. Popyk. World processing and information systems. - Gregg Division / Mc Gran-Hill Book Company, 1995.
7. Marvin Gore, John W. Stubbe. Elements of systems analysis. - Wm. C. Brown Publishers Dubuque, Iowa, 1997.
8. Nancy B. Finn. The Electronic Office. - Prentice-Hall, Inc, 1995.
9. Rich Didday. Using Basic. - West Publishing company, 1994.

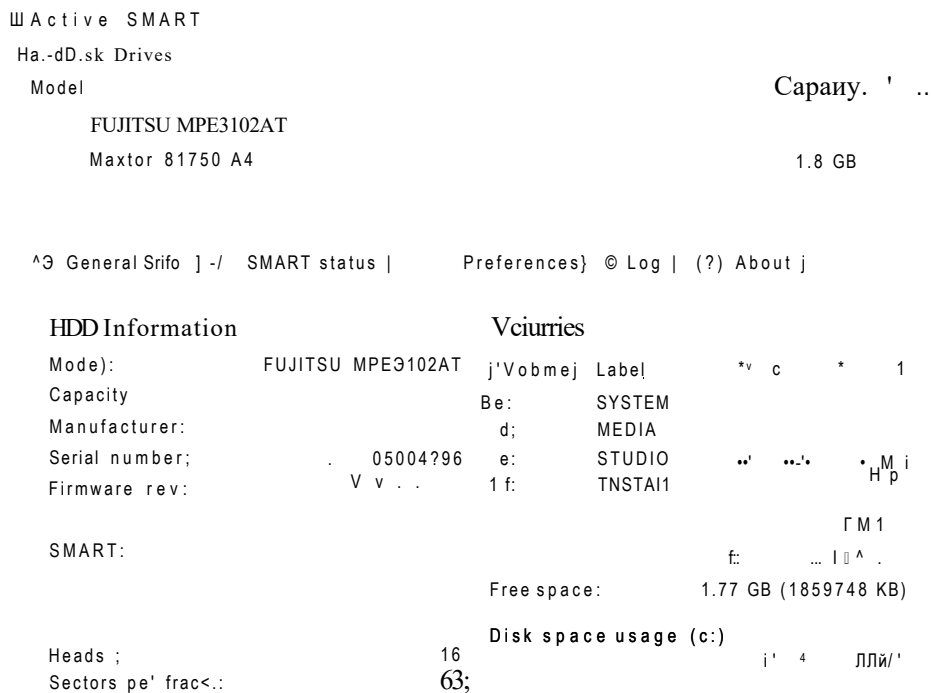


Рис 1. Форма системы слежения за состоянием устройств, использующей технологию S.M.A.R.T.

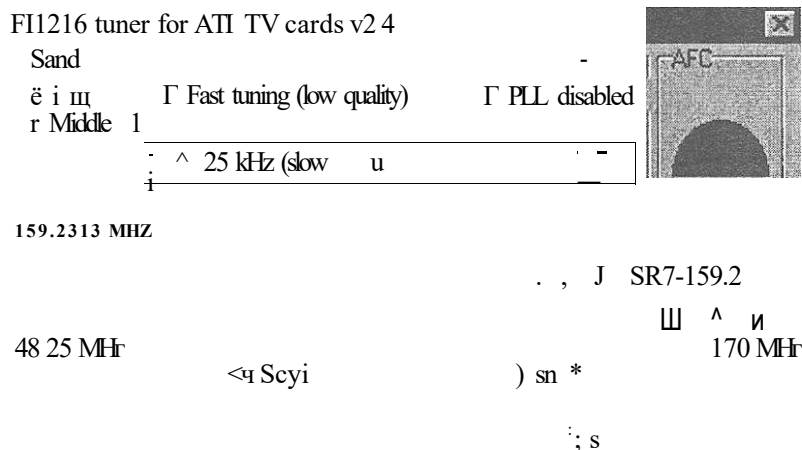


Рис 2. Форма системы автоматического поиска и точной ручной настройки телеканалов ТВ - тюнеров ATI

УДК 621.316.13:622.217

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИСТЕМ ЭЛЕКТРОСНАБЖЕНИЯ УГОЛЬНЫХ РАЗРЕЗОВ

Б.Б. Утегулов» М.Е. Волгин

*Павлодарский государственный университет**Щ им. С. Тора йгырова*

Жұмыста аса қуатты көмір разрездерін электрмен жабдықтау жүйелері параметрлерінің техника экономикалық көрсеткіштерін оңтайландырудың математикалық үлгіленуі тәжірибелік бағдарлама жасау мен жоспарлауды өліемдеу әдісі арқылы зерттеліп әзіртіген.

В статье разработаны и исследованы математические модели оптимизации технико-экономических показателей параметров систем электроснабжения мощных угольных разрезов путем использования методов критериального программирования и планирования эксперимента.

In job are developed and the mathematical models of optimization of technical and economic parameters of parameters of systems of electro-supply of powerful coal cuts (sections), way use of methods criterion of programming and planning of experiment are investigated.

Обеспечение экономичности систем электроснабжения (СЭС) любого промышленного предприятия является одной из главных задач, решаемых электроэнергетикой. Определение экономически целесообразных параметров должно производиться всей системы электроснабжения в целом, поскольку ее параметры находятся в тесной взаимосвязи. Таким образом, решение оптимизационной задачи является многопара-

метрическим, в качестве критерия оптимальности принимается минимум приведенных затрат на всю СЭС предприятия,

Эффективным методом решения поставленной задачи является метод критериального программирования. Достоинства этого метода заключаются в том, что кроме определения оптимальных параметров элементов СЭС, метод позволяет выявить экономически целесообразное соотношение

приведенных затрат по отдельным элементам СЭС и оценить влияние на приведенные затраты отклонения каждого параметра от его оптимального значения.

Для проведения исследований СЭС мощного угольного разреза при помощи данного метода необходимо построить технико-экономическую модель, в качестве целевой функции которой должна быть принята сумма приведенных затрат всех элементов входящих в СЭС разреза.

Для определения функций приведенных затрат были получены выра-

жения, с достаточной степенью точности аппроксимирующие зависимости стоимостных показателей отдельных элементов СЭС разреза от их технических параметров.

Стоимость сооружения трансформаторных подстанций СЭС открытых горных работ аппроксимируется следующими выражениями:

- Главные стационарные подстанции (ГСП) с двумя трехобмоточными трансформаторами и ОРУ 35-220 кВ без выключателей, с отделителями и короткозамыкателями в два блока и автоматической перемычкой между ними:

$$K_{\text{ГСП}} = (27,7 + 0,136U_{\text{H}})S_{\text{HT}}, \text{ тыс.тен.} \quad (1)$$

- То же, но с двухобмоточными трансформаторами:

$$K_{\text{ГСП}} = (16,0 + 0,084U_{\text{H}})S^{\circ}f, \text{ тыс.тен.} \quad (2)$$

- Однотрансформаторные карьерные передвижные подстанции (ПТП):

$$K_{\text{ПТП}} = (8,4 + 0,073U_{\text{H}})S_{\text{HT}}', \text{ тыс.тен} \quad (3)$$

Здесь U_{H} - высшее номинальное напряжение трансформаторов, кВ., а S - их номинальная мощность, мВА.

Удельная стоимость сооружения одного километра линий электропередачи можно представить в виде суммы двух составляющих - стоимости линий, зависящей

только от сечения провода и стоимости, зависящей только от уровня напряжения. Составляющие удельной стоимости линий аппроксимируются следующими выражениями:

$$K_{\text{Л(Ф)}} = a_w + a_{\text{F}}F, \text{ тыс.тен. км} \quad (4)$$

$$K_{\text{Л(V)}} = a_{\text{ov}} + a_{\text{U}}u_{\text{,,}}, \text{ тыс.тен. км} \quad (5)$$

Здесь F - сечение провода, мм²;

U_H - номинальное напряжение ЛЭП, кВ.

Значения аппроксимирующих коэффициентов a_{0B} , a_{0D} , a_v , a_w и показателей степеней a для различных типов линий приведены в таблицах 1 и 2.

На основании полученных зависимостей (1 - 5) и использования известных выражений для определения затрат на компенсацию потерь электроэнергии в ЛЭП и трансформаторах построена технико-экономическая модель, охватывающая внешнее и внутреннее электроснабжение мощного угольного разреза.

Таблица 1

Значения аппроксимирующих коэффициентов $a_{0\psi}$ и a_f функции для различных типов ЛЭП

Тип линии	Тип промежуточных опор	U_H , КВ	тыс.тенг $a_{0\psi}$ км	тыс.тенг «F» км.м ²
Одноцепные воздушные линии (провод марки АС)	Стальные	35	7,61	0,011
		110	9,85	0,011
		220	14,21	0,011
	Железобетонные	6 - 10	1,01	0,011
		20	2,35	0,011
		35	5,39	0,011
		110	7,02	0,011
		220	10,15	0,011
	Деревянные	6 - 10	1,47	○ ○ ○
		20	1,81	○ ○ ○
		35	3,73	○ ○ ○
		110	5,42	○ ○ ○
220		8,55	○ ○ ○	
Двухцепные воздушные линии (провод марки АС)	Стальные	35	11,17	0,024
		110	14,86	0,024
		220	22,15	0,024
	Железобетонные	35	9,21	0,024
110	12,11	0,024		
Кабельные линии	Кабель марки КШВГ	6	2,9	0,07
		6	3,7	0,07
		10	5,8	0,07

Таблица 2

Значения аппроксимирующих коэффициентов a_{oi} , a_v и показателей степеней a_{ii} функции $K_{л} = f(U)$

Тип линии	$a_{oV} >$ тыс.тенге км	$a_v >$ - тыс.тенге км	«и»
Одноцепные ВЛ (6 ~ 35 кВ) Железобетонные опоры	0,4	0,055	1,26
2- Деревянные опоры	1,15	0,03	1,20
Одноцепные ВЛ (35 - 220 кВ) Стальные опоры	7,0	0,048	1,36
2- Железобетонные опоры	5,1	0,006	1,24
3- Деревянные опоры	3,5	0,006	1,24
Двухцепные ВЛ (35 - 220 кВ) Стальные опоры	10,3	0,0065	1,40
2- Железобетонные опоры	8,4	0,011	1,24
Кабельные линии	0,0	1,82	0,42

$$\begin{aligned}
 Z = & A_0 U^{a_{oi}} + A_1 S^{a_{v1}} + A_2 F^{a_{v2}} + A_3 M^{a_{v3}} + A_4 U^{a_{v4}} + A_5 S^{a_{v5}} + A_6 M^{a_{v6}} + A_7 I^{a_{v7}} + A_8 U^{a_{v8}} + A_9 F^{a_{v9}} + A_{10} M^{a_{v10}} + A_{11} M_1^{a_{v11}} M_2^{a_{v12}} U^{a_{v13}} S_{нт2}^{a_{v14}} + A_{12} M_1^{a_{v15}} M_2^{a_{v16}} S_{нт2}^{a_{v17}} + A_{13} M_1^{a_{v18}} M_2^{a_{v19}} S_{нт2}^{a_{v20}} + A_{14} M_1^{a_{v21}} M_2^{a_{v22}} S_{нт2}^{a_{v23}} + A_{15} R^{a_{v24}} + A_{16} M_1^{a_{v25}} M_2^{a_{v26}} F_3^{a_{v27}}
 \end{aligned} \quad (6)$$

В формуле (6) первые три слагаемых отражают приведенные затраты на ЛЭП внешнего электроснабжения. Слагаемые 4-7 - затраты на главные стационарные подстанции; слагаемые 8-10 - затраты на распределительные линии разреза с напряжением U_2 и сечением провода F_2 ; слагаемые 11-14 - затраты на карьерные трансформаторные подстанции; слагаемые 15 и 16 - затраты на кабельные линии, питающие непосредственно экскаваторы.

Технико-экономическая модель (6) соответствует наиболее характерной схеме электроснабжения мощного угольного разреза с двумя ступенями трансформации электроэнергии. При ее составлении были

приняты следующие условия и допущения:

- электроснабжение разреза осуществляется по одной двухцепной воздушной линии при напряжении U , и сечении провода F , к которой подключается M , ГСП с номинальной мощностью трансформаторов $S_{нт1}$;

- к каждой из линий, отходящих от ГСП с напряжением U_2 и сечением провода F_2 , подключаются M_2 ПТП с номинальной мощностью трансформаторов $S_{нт2}$;

- от ПТП отходят кабельные линии с сечением жил F_3 ;

- трансформаторные подстанции (ГСП и ПТП) равномерно располагаются по своим зонам об-

служивания и имеют соответствующие равные мощности трансформаторов.

Вся необходимая исходная информация о СЭС разреза заключена в обобщенных константах А..

Решение класса задач с положительной степенью трудности методом критериального программирования не позволяет обобщить и распространить результаты расчета технико-экономической модели на другие подобные модели и произвести их технико-экономический анализ, не зная численного значения коэффициентов А целевой функции (6). Для устранения этого недостатка и с целью выявления общей тенденции изменения опти-

мальных значений параметров СЭС мощных угольных разрезов, были проведены расчеты по модели (6) для всех возможных сочетаний граничных значений основных влияющих факторов.

В качестве основных факторов, влияющих на оптимизируемые параметры, были приняты: расчетная электрическая мощность разреза S_F ; протяженность фронта горных работ L_F ; число распределительных линий, отходящих от одной ГСП (N_2); протяженность линий внешнего электроснабжения L_r . Граничные значения основных влияющих факторов, характерные для СЭС мощных угольных разрезов, приведены в таблице 3.

Таблица 3

Граничные значения основных влияющих факторов

Факторы	Верхний уровень	Нижний уровень
$S_p, \text{ мВА } (V_1)$	150	50
$L_f, \text{ км } (V_2)$	10	2
$N_2, \text{ шт } (У_3)$	8	2
$L_i, \text{ км } (У_4)$	50	5

Результаты расчетов позволили определить область экономически целесообразных соотношений переменной части затрат по отдельным элементам СЭС мощных угольных разрезов и выявить экономическую устойчивость технико-экономической модели СЭС разреза при отклонениях ее параметров от оптимального значения.

Анализ экономической устойчивости исходной модели (6) позволил

выявить и обобщить степень влияния каждого параметра на экономическую устойчивость затрат СЭС мощных угольных разрезов. В большей степени на приведенные затраты СЭС оказывают влияние отклонения от оптимального значения уровня напряжения ЛЭП внешнего электроснабжения (U_1), количество главных стационарных (M_1) и карьерных передвижных (M_2) подстанций, уровня промежуточного напряжения

(U,) карьерной распределительной сети. Следовательно, выбор этих параметров СЭС разреза требует самого тщательного обоснования.

Незначительное увеличение приведенных затрат вызывает отклонения от оптимальных (определенных при расчете) значений сечения проводников линий внутрикарьерного электроснабжения (F_2 и F_3), которые могут быть выбраны без особого экономического обоснования в соответствии с техническими требованиями.

Отклонения величин номинальных мощностей трансформаторов ГСП и ПТП (S_{HT1} и S_{HT2}) от оптимальных значений незначительно влияют на увеличение затрат. Как показывают исследования, проведенные рядом авторов, в частности [1], на величину приведенных затрат в значительной степени оказывают влияние загрузки трансформаторов. Поскольку в модель [6] не входит этот параметр, экономически целесообразную загрузку трансформаторов ГСП и ПТП можно определить по найденному при расчете количеству подстанций (M_1 и M_2), номинальным мощностям трансформаторов (S_{HT1} и S_{HT2}) и известной расчетной мощности разреза.

Отклонение сечения проводников линий внешнего электроснабжения (F_1) от оптимального значения имеет большой разброс степени влияния на устойчивость приведенных

затрат. При верхнем уровне основных факторов параметр F_1 требует строгого экономического обоснования, а при нижнем уровне может быть принят по чисто техническим условиям. Основным фактором, как показали исследования, влияющим на принятие того или иного решения при выборе параметра F_1 является протяженность линий внешнего электроснабжения.

Следует отметить, что в модель электроснабжения (6), не были введены ограничения, накладываемые на оптимизируемые параметры по техническим соображениям. Отсутствие технических ограничений позволяет определить общую тенденцию качественного изменения оптимизируемых параметров в чисто экономическом плане. Так, результаты расчетов показали, что экономические сечения (F_2) проводников распределительных линий в большинстве случаев значительно превышает сечения, отвечающие техническим требованиям. При этом даже трехкратное уменьшение сечения относительно расчетного (экономически целесообразного) не вызывает превышения нормированного, пятипроцентного увеличения затрат. Из этого можно сделать вывод, что превышение в пределах разумного сечения проводников распределительных ЛЭП допустимо.

Сечения кабельных линий (параметр F_3) в большинстве случаев

ев оказываются заниженными. Это можно объяснить тем, что в расчетной модели срок службы гибких экскаваторных кабелей принят равным одному году. В результате затраты, связанные с капитальными вложениями на кабельную линию, с увеличением сечения растут быстрее, чем затраты на компенсацию потерь электроэнергии при уменьшении сечения. Основными причинами небольшого срока службы кабелей являются механические повреждения, а не тепловое старение изоляции. Следовательно, для более эффективного использования кабелей целесообразно повышение и загрузки с тем, чтобы срок службы кабеля вследствие старения изоляции был соразмерен с его действительным сроком службы.

Верхним пределом количества карьерных трансформаторных подстанций (M_2) является число единиц технологического оборудования, в данном случае экскаваторов. Нижний предел определяется максимально допустимым числом экскаваторов, подключенных к одной ПТП, а также найденной в результате расчета экономически целесообразной загрузкой трансформаторов. По проведенным расчетам общей тенденцией является разукрупнение ПТП. Экономически целесообразным для СЭС мощных угольных разрезов является увеличение числа карьерных ПТП до верхнего предела, опре-

деляемого количеством экскаваторов.

Уровни напряжений внешнего и внутреннего электроснабжения (U_1 и U_2) не требуют дополнительных ограничений, кроме округления полученных расчетным путем величин до стандартного ближайшего значения. Здесь уместно отметить, что в ряде случаев экономически целесообразным промежуточным внутрикарьерным напряжением (U_3) является величина порядка 66 кВ. Такого уровня пока нет еще в шкале стандартных напряжений, принятых как у нас в стране, так и за рубежом. Введение данного напряжения в рамки стандарта и, соответственно, внедрение в область электроэнергетики позволило бы в ряде случаев (не только в горной промышленности) обеспечить высокую экономическую эффективность электроснабжения крупных промышленных предприятий.

Значения экономически целесообразных параметров, наиболее влияющих на экономическую устойчивость приведенных затрат, а также экономически целесообразные соотношения переменной части затрат по отдельным элементам СЭС разреза при граничных сочетаниях основных влияющих факторов приведены в таблице 4.

Кроме определения оптимальных значений параметров при проектировании СЭС, а также при ее эк-

сплуатации не менее важно проследить их изменение в зависимости от возможных изменений основных влияющих факторов. Очевидно, что для этого необходимо произвести большее количество решений целевой функции (6), варьируя при этом исходными величинами, введенными в обобщенные константы $A!$, что значительно усложняет процесс исследования.

Для исследования оптимальных решений эффективным может оказаться применение методов теории планирования эксперимента. Используя результаты расчетов целевой функции (6) для граничных сочетаний основных факторов, были получены математические модели

экономически целесообразных параметров СЭС мощных угольных разрезов. При этом были приняты наиболее характерные типы элементов СЭС мощных угольных разрезов:

- внешнее электроснабжение осуществляется двухцепной линией на стальных опорах;

- ГСП сооружаются с двумя трехобмоточными трансформаторами;

- распределительные линии внутрикарьерного электроснабжения выполняются на деревянных опорах;

- линии, питающие непосредственно экскаваторы, выполняются кабелем марки КППВГ.

Таблица 4

Значения оптимальных параметров и экономически целесообразных соотношений затрат по отдельным элементам СЭС разреза

№ опыта	Факторы				Затраты по элементам СЭС, %								
	s_p , мВА	LF, км	M_2 , ШП	Бь, км	i_1	i_2	M_1	M_2	$z_{..}$	$z_{гсп}$	$z_{л2}$	$z_{птп}$	$z_{л3}$
1	150	10	S	50	242,1	19,99	2,11	13,8	55,7	19,7	6,4	14,7	3,6
2	50	10	8	50	140,66	10,52	1,95	8,43	49,0	29,1	7,4	12,0	2,6
3	150	2	8	50	243,2	20,18	1,02	11,4	60,0	17,9	5,5	13,6	3,0
4	50	2	8	50	147,13	18,78	0,87	8,25	55,2	19,2	6,2	15,7	3,6
5	150	10	2	50	233,73	30,18	1,94	7,2	56,9	19,8	6,4	13,9	3,2
6	50	10	2	50	160,7	29,33	1,65	6,57	50,0	22,2	7,2	16,6	4,0
7	150	2	2	50	246,3	82,8	0,81	9,45	62,7	16,7	4,0	13,4	3,2
8	50	2	2	50	158,73	55,08	0,78	10,4	57,6	18,2	4,7	15,6	3,8
9	150	10	8	5	200,8	17,28	2,69	10,8	12,2	38,4	13,4	28,8	7,0
10	50	10	8	5	199,8	15,69	2,47	3,84	10,3	41,7	15,9	25,9	6,2
11	150	2	8	5	163,5	31,69	0,81	9,8	15,0	36,1	10,6	30,9	7,4
12	50	2	8	5	98,7	22,35	0,79	8,41	12,8	37,5	11,8	31,2	7,4
13	150	10	2	5	153,36	45,1	1,81	15,5	13,7	38,6	11,6	29,1	7,0
14	50	10	2	5	98,25	32,6	1,92	18,4	10,5	38,8	12,4	30,9	7,4
15	150	2	2	5	157,04	72,06	0,94	8,98	16,0	35,9	8,9	31,7	7,4
16	50	2	2	5	100,9	54,04	0,81	10,8	13,0	36,8	9,6	32,8	7,8

Особый интерес представляют модели тех параметров, которые существенно влияют на устойчивость приведенных затрат системы.

Алгоритм построения математических моделей оптимальных параметров, а также проверка их адекватности достаточно полно изложен в [2], поэтому ограничимся только конечными результатами.

1. Экономически целесообразное напряжение внешнего электроснабжения

$$U_1 = 171,56 + 33,45V_1 + 7,12V_2 + 7,93V_3 + 25,01V_4 - 4,62V_1V_2 + 11,32V_1V_4 + 9,24V_2V_3 - 9,39V_2V_4 - 11,23V_3V_4 + 5,15V_1V_3V_4 + 8,86V_2V_3V_4 + 5,17V_1V_2V_3V_4.$$

2. Экономически целесообразное напряжение распределительной сети внутрикарьерного электроснабжения

$$U_2 = 34,21 + 4,6V_1 - 9,38V_2 - 15,75V_3 - 1,95V_4 - 1,55V_1V_2 - 1,55V_1V_3 - 8,41V_1V_4 - 7,16V_2V_3 - 1,15V_3V_4 + 2,50V_1V_2V_3 + 3,12V_1V_3V_4 + 2,78V_1V_2V_3V_4.$$

3. Экономически целесообразное количество главных стацио-

нарных подстанций

$$M = 1,46 + 0,055V_1 + 0,6V_2 + 0,125V_3 - 0,07V_4 + 0,109V_2V_3 - 0,085V_2V_4 - 0,08839V_2V_3V_4 - 0,43V_1V_2V_3V_4.$$

4. Экономически целесообразное количество карьерных передвижных трансформаторных подстанций

$$M_2 = 10,15 + 0,72V_1 + 0,47V_2 - 0,81V_3 - 0,72V_4 + 0,49V_1V_2 + 1,39V_1V_3 + 0,31V_1V_4 - 0,59V_2V_3 - 0,90V_2V_4 + 1,84V_3V_4 + 0,48V_1V_3V_4 + 0,28V_1V_3V_4 + 1,67V_2V_3V_4 + 0,40V_1V_2V_3V_4.$$

Следует отметить, что влияющие факторы являются размерными величинами, причем размерность их различная. Поэтому в математических моделях факторы имеют кодированное значение. Кодирование факторов производится по формуле:

где V_i - кодированное значение фактора;

V_i - натуральное значение фактора;

$V_{i,s}$ - базовый уровень;

DDV_i - интервал варьирования.

В приведенных математичес-

ких моделях в качестве кодированных факторов V , ϵ_r

V_4 принимаются соответственно S , L_F , N_2 , и L_T . Диапазоны варьирования этих факторов приведены в таблице 3.

Анализируя полученные математические модели оптимальных параметров, следует отметить, что на уровень напряжения внешнего электроснабжения в большей мере оказывает влияние протяженность линий и передаваемая мощность.

Определяющими факторами для уровня внутрикарьерного электроснабжения и количества ГСП являются геометрические размеры разреза и число отходящих от ГСП линий. В меньшей мере оказывает влияние электрическая нагрузка разреза, в большей мере на величину этого параметра оказывают влияние сочетания факторов V , V_3 , V , V_4 , V_2 , V_3 , V_4 . Трудно отдать предпочтение какому-либо из основных факторов, наиболее влияющему на количество ПТП.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. Г. Гордиевский, В. Д. Лордкипанидзе. Оптимизация параметров электрических сетей. - М.: Энергия, 1978. - С. 145.

2. Карпов В. М. Методика вы-

бора рациональных напряжений в системах электроснабжения промышленных предприятий на основе теории планирования эксперимента. Автореферат канд. дисс. - М.: МЭИ, 1976. С. 19.

УДК 621.365.22 (075.8)

ОСОБЕННОСТИ ТЕПЛОВЫХ РЕЖИМОВ ПЛОСКИХ ПЛЕНОЧНЫХ ПЛАЗМЕННО НАПЫЛЕННЫХ НАГРЕВАТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

А.И. Алиферов

Новосибирский государственный технический университет

Т.В. Хацевская

*Павлодарский государственный университет**им.С. Торайгырова*

Осы мақалада жазық қабыршақ плазмалың тозаңданған қыздырғыш элементінің жылу моделі және жылу өткізгіш теңдеуінің сандық әдісі қарастырылған. Қыздырғыштың жылу тұрақтылығына талдау жасалған.

В статье рассматриваются математическая тепловая модель плоского пленочного плазменно напыленного нагревательного элемента и численный метод решения уравнений теплопереноса. Произведен анализ теплового режима нагревателя.

The mathematical thermal model of a flat film heating element covered by plasma and the numerical method, used for the decision of the equations of carry of heat are considered in this article. The analysis of a thermal mode of a heater is made.

1. Разработка тепловой модели плоского пленочного плазменно напыленного нагревательного элемента

Высокая надежность и работоспособность плоского пленочного плазменно напыленного нагревательного элемента во многом зависит не только от неравномерности и неоднородности состава наносимых пленочных покрытий, но и от распределения электромагнитного и температурного

полей. При общей постановке задачи исследования был введен ряд допущений, которые с учетом предваряющих результатов исследований распределения параметров электромагнитного поля по сечению токонесущего слоя значительно упрощают математическую тепловую модель [1].

Задачей становится нахождение стационарного температурного поля в многослойной структуре нагревателя при задании как общего количества тепла, выделенного в нагревателе, так и равномерного пространственного распределения (поперечного профиля) источников тепла в тепловыделяющем слое. По условиям эксплуатации нагревательный элемент помещен в воздушную среду атмосферного давления с вертикальной или горизонтальной ориентацией и является частью плоской нагревательной системы.

При принятых упрощениях модель нагревательного элемента может быть представлена как совокупность тонких слоев, для которых изменение температуры по толщине материала незначительно и сравнимо с ошибкой в расчетах из-за недостаточной достоверности данных об условиях теплообмена и теплофизических свойств материала. Несмотря на малость температурного перепада по толщине слоя, им нельзя полностью пренебречь, так как только наличие градиента температуры обеспечивает поперечный поток тепла от одного слоя к другому. На границах каждого слоя необходимо поставить или условия сопряжения, описывающие тепловой контакт между слоями, или условия теплообмена со средой дня открытых поверхностей. Теплообмен с внешней

средой осуществляется посредством свободной или вынужденной конвекции (конвективный теплообмен) и тепловым излучением (лучистый теплообмен).

Для более простого описания модели удобно считать, что многослойная структура нагревателя состоит из четырех тонких пластин, введя их следующую нумерацию: 1 - стальная подложка, 2 - первый электроизоляционный слой, 3 - резистивный слой, 4 - второй электроизоляционный слой. В соответствии с принятой нумерацией на рис. 1, изображающем поперечный разрез нагревателя, указаны обозначения толщины слоев и их ширина, а также приведены обозначения размеров и физических величин: l - ширина пластины 1; l_2, l_3, l_4 - ширина пластин 2, 3 и 4; S_1, S_2, S_3, S_4 - толщины пластин 1, 2, 3 и 4, соответственно; $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ - коэффициенты теплопроводности пластин 1, 2, 3 и 4, соответственно; T_p, T_1, T_2, T_3, T_4 - температурные поля в пластинах.

С учетом допущений, принятых при общей постановке, и результатов исследований распределения электромагнитного поля в резистивном слое математическая модель теплового состояния может быть представлена ниже следующей системой дифференциальных уравнений теплопроводности и граничных условий, записанных для каждой пластины.

Пластина 1

Уравнение:

$$\frac{\partial^2 T_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_x}{\partial y^2} = 0$$

Граничные условия:

- на свободной поверхности, контактирующей непосредственно с воздушной средой, при $0 \leq x < l_1$, $l_3 + l_1 < a - J$ - условие конвективного и лучистого теплообмена на верхней и при $0 \leq x \leq J$ - нижней поверхностях:

$$\alpha \frac{\partial T}{\partial y} = \epsilon \cdot (T_{\text{обг}} - T_{\text{сп}}) + \epsilon \cdot I$$

- на торцах пластины при $x = 0$ и $x = l_1$ - условие конвективного и лучистого теплообмена:

$$\alpha \frac{\partial T}{\partial x} = a \cdot (T_{\text{ок}} - T_{\text{сп}}) + \epsilon \cdot \sigma \cdot T^4$$

- на границе пластины 1 с пластиной 2 при $l_1 \leq x \leq l_1 + l_2$, - условие равенства теплового потока:

$$\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial y} = \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x}$$

Пластина 2

Уравнение:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial T}{\partial y} = 0$$

Граничные условия:

- на торцах пластины при $x = l_3$ и $x = l_3 + l_2$, - условие конвективного и лучистого теплообмена:

$$\alpha \frac{\partial T}{\partial x} = a \cdot (T_{2\text{мз}} - T_{\text{сп}}) + \epsilon_2 \cdot \sigma \cdot T^4$$

$$\alpha \frac{\partial T}{\partial x} = \epsilon \cdot (T_{\text{обг}} - T_{\text{сп}}) + \epsilon \cdot I$$

- на границах с пластинами 7 и 3 при $l_3 \times J \times J l_3 + l_2$ - условие равенства тепловых потоков:

$$A_7 \frac{\partial T_2}{\partial y} = \frac{\lambda_3}{l} \frac{\partial T_3}{\partial y}$$

Пластина 3

Уравнение:

$$\frac{\partial^2 T_3}{\partial y'^2} = \frac{q_{в}(x)}{\lambda_3}$$

Граничные условия:

- на торцах пластины при $x = l_3 \times J \times J l_3 + l_2$ - условие конвективного и лучистого теплообмена:

$$\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial x} = a(T_3 - T_{ср}) + \epsilon_3 \cdot \sigma \cdot W_{3+2}$$

- на границах с пластинами 4 и 2 (при $l_4 \times J \times J l_4 + l_2$) - условие равенства тепловых потоков:

$$\lambda_4 \frac{\partial T_4}{\partial y} = \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial y}$$

Пластина 4

Уравнение:

$$\frac{\partial^2 T_4}{\partial y^2} = \frac{Q}{\lambda_4}$$

Граничные условия:

- на свободной поверхности (при $l_3 \times J \times J l_3 + l_2$ и торцах пластины - условие конвективного и лучистого теплообмена:

$$\lambda_4 \frac{\partial T_4}{\partial x} = a(T_{нне} - T_{ср}) + \epsilon_4 \cdot \sigma \cdot W_{4я}$$

$$= a(T_{якбл3} - T_{ср}) + \epsilon_4 \cdot \sigma \cdot W_{4|x=l_3}$$

$$\frac{\partial T_4}{\partial x} = a(T_{нне} - T_{ср}) + \epsilon_4 \cdot \sigma \cdot W_{4я}$$

- на границах с пластиной 3 (при $l_3 \ll l_1, l_2$) - условие равенства тепловых потоков:

$$cT_A \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial y}$$

2. Особенности методов исследований и решений задач

Несмотря на известные достоинства аналитических методов [2], в данной задаче применение численного метода неизбежно по трем причинам:

1) сложная форма нагревательного элемента требует двухмерной постановки задачи;

2) неодинаковые краевые условия на различных границах не позволяют использовать аналитические методы без существенного упрощения задачи;

3) необходимость учета излучения приводит к сильной нелинейности математической модели, что в сочетании с пунктами (1) и (2) приводит к невозможности решения данной задачи аналитическими методами.

Наиболее универсальным численным методом приближенного решения дифференциальных уравнений, который широко применяется для решения нелинейных уравнений тепло- и массопереноса, является метод конечных разностей.

При его применении нет необходимости задаваться аналитическими выражениями для уравнений границ тела, граничных условий и коэффициентов переноса, что особенно важно в данной задаче.

Поскольку дифференциальные уравнения для каждой пластины одного типа, а граничные условия похожи между собой, достаточно рассмотреть принцип построения разностной схемы на примере одной пластины.

Например, для пластины 3 запись постановки задачи после изменения индексов в обозначении температур и других переменных следующим образом (рис. 2.): собственная температура и коэффициент теплопроводности пластины Γ и 1; температуры и коэффициенты теплопроводности для пластин, расположенных сверху и снизу $T_{z, 1y}$ и $T_{z, 1z}$, соответственно, будет иметь вид следующего уравнения и граничных условий:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial T}{\partial y^2} - \frac{q_v(x)}{\gamma} = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = c(T_{x=l_j} - T_{cp}) + s - cm. \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \alpha(T_{x=h+h} - T_{cpn}) + \beta < y \cdot T_{x=l} + l_z'$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{cT}{\partial y}$$

Получение разностной схемы из дифференциальной задачи (уравнение Пуассона и граничные условия к нему) исходит из записи в разностном виде первых и вторых производных на пятиточечном шаблоне с постоянным шагом h_x по оси x и h_y по оси y (рис. 3):

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{h_y} \quad \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{h_x}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i-1,j} - 2T_{i,j} + T_{i+1,j}}{h_x^2}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_{i,j-1} - 2T_{i,j} + T_{i,j+1}}{h_y^2}$$

где $T_{i,j}$ и $T_{i-1,j}$ - температура на границе и в приграничной точках.

Учитывая, что толщина пластины много меньше ширины, достаточно построить трехслойную разностную сетку по оси y (направление j) для того, чтобы в каждой пластине имелся один центральный слой $T_{i,j}$ и два граничных $T_{i,j-1}$ и $T_{i,j+1}$ (рис. 2). Этот прием позволяет записать разностную схему дифференциального уравнения только для центрального слоя, исключив индекс j , и существенно упростить решение разностной схемы, что дает большой выигрыш во времени счета. В итоге разностная схема уравнения теплопроводности после подстановки конечно-разностных выражений вторых производных в дифференциальное уравнение записывается следующим образом:

$$\frac{y_{j-1} - 2T_{i,j} + m_{i,j} + T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{h_y^2} + q_{i,j} = 0$$

Для удобства реализации метода прогонки его можно записать в виде

$$\left(\frac{\lambda}{h_y} \right)$$

$$A = 1; \quad B = 1; \quad C = 2 - \frac{1}{\lambda} ;$$

$$A \cdot T_{i,j-1} - C \cdot T_{i,j} + B \cdot T_{i,j+1} = M$$

Выражение для температуры граничных слоев получается из условий сопряжения (1) с прилегающими пластинами путем записи их в конечных разностях:

$$K_1 \frac{\partial T}{\partial x} = -K_2 \frac{\partial T}{\partial x} \quad \text{в } x = 0; \quad K_2 \frac{\partial T}{\partial x} = -K_3 \frac{\partial T}{\partial x} \quad \text{в } x = L;$$

Из него можно получить выражение для температуры на границе со слоем 1

$$m_{h1} = \frac{1}{1 + BQ} T_{z1} + m_1$$

где обозначено $BQ = \frac{\lambda \cdot h \cdot J}{\kappa \cdot h}$

Аналогично для температуры на границе со слоем 2 условие сопряжения в конечных разностях:

$$\frac{2-2}{\%} (T_{z2} - T_2) = \frac{r_2 \cdot (T_{z2} - T_2)}{h}$$

И температура на границе со слоем 2

$$T_{F2} = \frac{1}{1 + BO_2} T_{z2} + m_2$$

где обозначено $BO_2 = \frac{\lambda_1 \cdot h}{\kappa \cdot h}$

На торцевых участках пластины (при $i = 1$ и $i = n$) также необходимо записать разностный аналог граничных условий конвективного и лучистого теплообмена (1)

$$\frac{\lambda}{h} (T_{GA} - T_z) = a(m_z - T_{cp}) \cdot \gamma_r$$

Для реализации метода прогонки необходимо записать эти выражения в общем виде $T_G = A T_{G1} + B$, выразив температуру на границе явным образом

$$T_{G1} = \frac{1}{1 + \epsilon} T_{z1} + \frac{T_{cp} - T_{z1}}{a \cdot (1 + \epsilon^*)}$$

$$T_{Gn} = \frac{1}{1 + \epsilon^{n-1}} T_{zn} + \frac{T_{cp} - T_{zn}}{a \cdot (1 + \epsilon^*)}$$

где обозначено $\epsilon = \frac{\lambda}{\kappa \cdot h}$

Для решения полученной разностной схемы методом прогонки необходимо задать начальное распределение температуры T, T_n, T_y , (обычно задается температура, равная температуре среды T_{cp}) и вычислить граничные значения температур T_n и T_y

Полученная разностная схема является трехдиагональной. Решать такие схемы позволяет метод прогонки. Решение ищется в виде

$$T_i = a_{j+1} B_{j+1} - T_{j+1} + P_{j+1} i = B_{j+1} X_{j+1} \quad (2)$$

где a_{j+1} , B_{j+1} - коэффициенты прогонки, вычисляемые по рекуррентным формулам

$$a_{j+1} = \frac{B_{j+1}}{C - A_{j+1}}, \quad B_{j+1} = C - A_{j+1} a_j, \quad a_1 = 1, \quad B_1 = T_{cp} - a_1 T_{cp}$$

Чтобы вычислить по этим формулам значения a и B , во всех узлах сетки нужно знать значения a и B , которые определяются из левого краевого условия

$$T_1 = \frac{D^*}{1 + \epsilon} + \frac{n}{1 + \epsilon} T_{cp} - a$$

Значения температуры по правой границе находится из правого краевого условия

$$T_m = \frac{B}{1 + \epsilon} + \frac{P_{m+1}}{1 + \epsilon} T_{cp} - a \frac{e-a}{1 + \epsilon} + \frac{B}{1 + \epsilon} a$$

после чего по (2) вычисляются все T при $i = n-1$ до 1.

3. Анализ результатов исследований, выводы и рекомендации

При исследовании тепловых режимов работы плоского пленочного нагревателя возьмем широкие диапазоны изменения геометрических и теплофизических параметров всех элементов многослойной структуры:

- коэффициент теплопроводности подложки будем изменять в пределах $\lambda = 1 \dots 120 \text{ Вт/м}^{\circ}\text{К}$ такое широкое варьирование соответствует применению в качестве подложки как металлических, так и керамических материалов;

- толщину подложки S_j от 2 мм (для металлических материалов) до 10 мм (для керамических);
- толщину электроизоляционных слоев $S_i = S = 0.1 \dots 1 \text{ мм}$
- коэффициент теплопроводности электроизоляционных слоев $\lambda_i = \lambda = 0.1 \dots 1 \text{ Вт/м}^{\circ}\text{К}$,
- распределение мощности внутренних источников теплоты полагаем равномерным.

Как показали расчеты, в приведенном диапазоне изменения парамет-

ров температурное поле резистивного слоя дублирует распределение температуры в подложке с погрешностью не более 5 %. Поэтому анализ теплового режима нагревателя с требуемой точностью можно проводить по распределению температуры по ширине подложки.

На рисунке 4 приведена зависимость распределения температуры по ширине подложки от коэффициента ее теплопроводности при фиксированных значениях толщин всех слоев ($S=2\text{ мм}$, $S_7=S_3=S_4=0.1\text{ мм}$) и коэффициентов теплопроводности напыленных пленок ($\lambda_1=10\text{ Вт/мК}$, $\lambda_2=20\text{ Вт/мК}$, $\lambda_4=10\text{ Вт/мК}$). Из рисунка видно, что увеличение коэффициента теплопроводности подложки (с 30 до 120 Вт/мК) приводит к интенсификации теплоотвода из области резистивного слоя и вызывает:

а) выравнивание поля температур в подложке;

б) понижение уровня температуры в омическом слое, что обеспечивает возможность увеличения абсолютной мощности нагревательных элементов, повышая их среднюю удельную мощность при сравнительно невысокой температуре токонесущего слоя.

Оказалось, что для керамических материалов, имеющих коэффициент теплопроводности $\lambda = 1 \dots 10\text{ Вт/мК}$, получить температурное распределение в резистивном слое и подлож-

ке, имеющих требуемую равномерность, невозможно. Кроме этого, при мощностях нагревателя $P = 400 \dots 800\text{ Вт}$, максимальная его температура, не превышающая 500 °C , получается при толщине подложки не менее 10 мм. Поэтому при использовании керамической подложки необходимо напылять нагреватель таким образом, чтобы напыленный резистивный слой покрывал всю рабочую поверхность нагревателя. Только в этом случае обеспечивается равномерное поле температур и понижается уровень термических напряжений, разрушающих напыленный слой. Подобная конструктивная особенность нагревателей с керамической подложкой указывает на то, что при одинаковом уровне предельной рабочей температуры они должны обладать меньшей удельной поверхностной мощностью, чем нагреватели с металлической подложкой.

На рис. 5 приведено распределение температуры в металлической подложке в зависимости от толщины электроизоляционного слоя S_2 в диапазоне 0.1 мм до 1 мм. Искажение температурного поля как подложки, так и резистивного слоя не превышает 1-2 %. На рис. 6 показаны зависимости поля температур в подложке от ее теплопроводности и толщины. Установлено, что если выдерживать одинаковое значение произведения $\lambda \cdot S_n$ то поле температур в подложке за пределами резистивного слоя будет одина-

ково. Выявленное условие имеет существенное значение при выполнении работ по оптимизации конструкции и геометрических параметров пленочных плоских нагревателей.

Полученные результаты позволяют сформулировать следующие положения технологии изготовления и конструкции нагревателей:

- технология нанесения электроизоляционного слоя может фор-

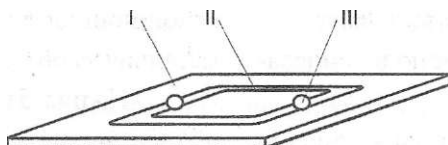
мироваться независимо от тепловых условий работы нагревателя и технологии напыления омического слоя;

- с целью уменьшения термических напряжений, возникающих за счет различных величин коэффициентов линейного расширения у материалов многослойной структуры, в пределах общей толщины электроизоляционного слоя (до 1 мм) следует наносить буферные слои.

ЛИТЕРАТУРА

1. Алиферов А.И., Казанов А.М., Ершов А.А. Экспериментальные характеристики резистивных плоских электронагревателей // Электротехнологические процессы и установки. - Новосибирск: ИТФ СО РАН, 1995.

2. Исаченко В.П., Осипова В.А., Сукомел А.С. Теплопередача. - М.: Энергоиздат, 1981.



I— (IK-

I,

Рис. 1. Конструкция (а) и расчетная схема плоского нагревательного элемента (б): I-подложка; II-трехслойная композиция нагревателя; III-контакты.

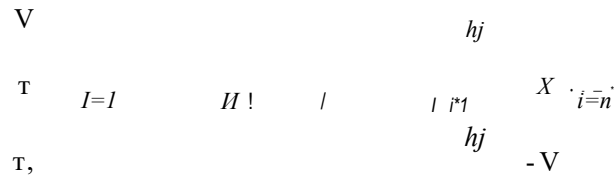


Рис. 2 Расчетная схема одной пластины

	$i, j+1$				
$i-1, j$	i, j				$i+1, j$
	$i, j-1$		Q	$r-1, j$	

Рис. 3. Пятиточечный шаблон (а) и обозначение точек на границе (б)

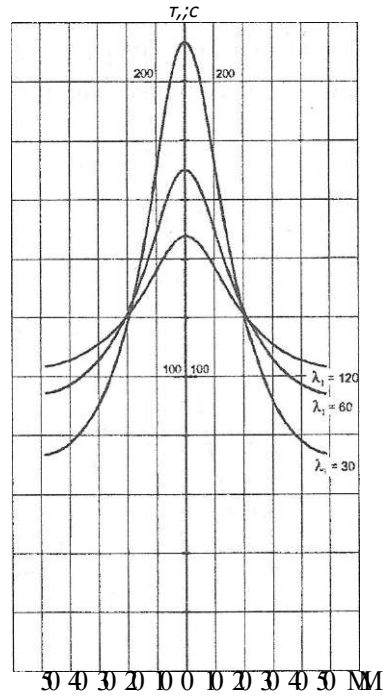


Рис.4. Распределение температуры по ширине подложки в зависимости от ее теплопроводности

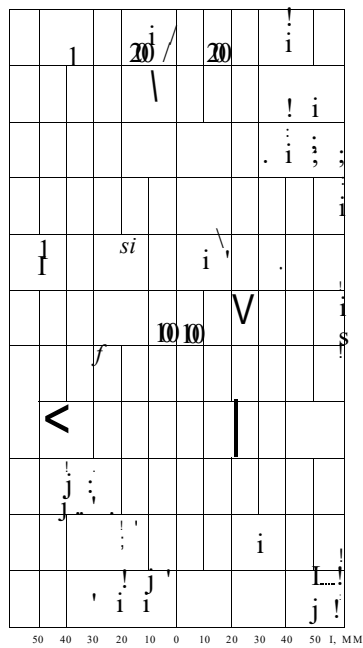


Рис. 5. Распределение температуры по ширине металлической подложки в зависимости от толщины электроизоляционного слоя

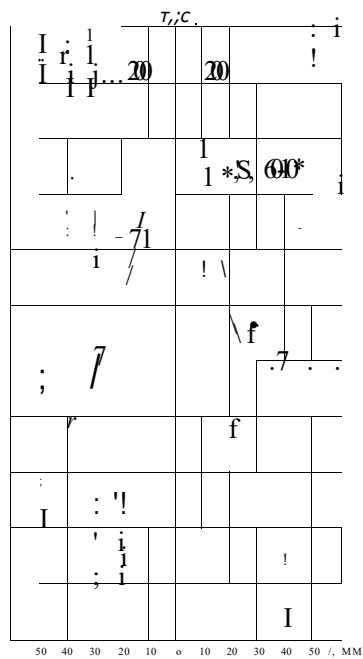


Рис. 6. Распределение температуры по ширине подложки при постоянном значении l ,

§ УДК 821.387.143

I
§

РАСЧЕТ ПУСКОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК И СИСТЕМЫ ЗАЩИТЫ ОТ АВАРИЙНЫХ РЕЖИМОВ ПОЛЫХ КАТОДОВ ВАКУУМНЫХ ПЛАЗМОТРОНОВ

А. П. Киотов

*Павлодарский государственный университет
им. С. Торайгырова*

А. В. Чередниченко ©

*Новосибирский государственный технический
университет*

Мақалада вакуумды плазмотрондардың жартылай катодтарының аналитикалық есеп щорытындылары мен істен шығу жұмысындағы математикалық моделі келтіріледі.

В статье приведена математическая модель в виде аналитических выражений расчета пусковых и аварийных режимов работы полых катодов вакуумных плазмотронов.

Mathematical model in the manner of analytical expressions of calculation for activate and emergency working modes of hollow cathodes of vacuum plasmathrons is considered in this article.

В обычном варианте работы плазмотрона реализация вакуумного дугового разряда осуществляется с катодом, представляющим собой цилиндрическую трубку с внутренним радиусом R_j и наружным R , через которую подается газ в камере низкого давления. Открытый конец трубки направлен в сторону анода, отстоящего от катода на расстоя-

нии 10—150 мм в зависимости от вводимой мощности. При этом общая масса рабочей части катода изменяется от 0,1 до 2 кг.

Использование в электротехнологиях вакуумных плазмотронов с полыми катодами позволило получить плотности тепловых потоков на поверхностях нагрева до 10^7 — 10^8 Вт/м² при низких напряжениях (30 — 100

В). Промышленная эксплуатация плазмотронов в рабочих режимах с ярко выраженными эффектами полого катода обеспечила низкие эрозийные характеристики катодов (порядка $1 \cdot 10^{10}$ кг/Кл) при рабочих токах до 10 кА. Это соответствует срокам службы катодов в различных электротехнологиях до 1000 часов.

Для возбуждения дугового разряда с полым катодом катод должен быть разогрет до температуры появления термоэмиссионного тока. В пусковых режимах разогреть катод необходимо, предотвращая контрагирование катодных пятен, при появлении которых эрозия катодов может достигать катастрофически больших величин ($> 1 \cdot 10^6$ кг/Кл). Как было показано экспериментально, для снижения эрозии катодов целесообразно осуществлять процесс разогрева катодов в режимах аномального тлеющего разряда с использованием систем программного введения мощности и стабилизации режимов.

Проблемы стабилизации аномального тлеющего разряда и разработки систем предотвращения возникновения контрагированных катодных пятен потребовали изучения механизмов перехода несамостоятельного разряда в самостоятельный тлеющий с последующим переводом разряда в аномальный тлеющий разряд. Особенностью реализации этих режимов является необходимость изменения напряжения на разряде по мере разогрева катодов до темпе-

ратур 1500—1600°C. В результате проведения комплексных экспериментальных исследований установлено, что напряжение на катоде должно изменяться по алгоритму, включающему зависимость этого напряжения от температуры катода. Диапазон режимов аномального тлеющего разряда с полыми катодами имеет малоустойчивый оптимум, зависящий от первого коэффициента Таунсенда a , коэффициента вторичной эмиссии g , материала катода и его температуры. На рис. 1 приведены полученные экспериментальные характеристики напряжения зажигания тлеющего разряда в зависимости от произведения давления (p) на межэлектродное расстояние (d) в атмосфере аргона для электродов из тантала при различных температурах. Характеристики $U=f(p*d)$ построены в полулогарифмических координатах и имеют вид кривых Пашена с ярко выраженным минимумом. Левые ветви зависимостей характеризуются большей крутизной, чем правые. Этот факт используется в практических целях. При свободном истечении газа из полости катода в рабочую камеру по длине полости катода устанавливается градиент давления, лежащий в диапазоне от 1 до 5 ми.рт.ст. . Этому давлению соответствует диапазон параметров на кривой Пашена вблизи минимума $U=f(p*d)$ и прилегающей правой ветви этой зависимости. Обозначим напряжение зажигания разряда в полости като-

да $U_{\text{зап}}$ Для режима разогрева катода рабочее давление в камере электропечи устанавливается $1 \cdot 10^{-3}$ мм.рт.ст. Это давление определяет развитие процессов на наружной поверхности катода, и, следовательно, напряжение зажигания разряда $U_{\text{зап}}$ будет определяться левой ветвью кривой Пашена с параметром $p \cdot dl < 0,1$ (см.мм.рт.ст.). Режим разогрева катода аномальным тлеющим разрядом выбирается таким образом, чтобы обеспечить диапазон напряжений $J_{\text{ти}} < i_{\text{нар}} \cdot c$ кратностью и $T_{\text{мр}} / U_{\text{зап}} > 1,5$. При таких условиях в пусковых режимах снаружи катода само-

стоятельный разряд возникать не может, что способствует проведению разогрева катода только за счет разряда в полости катода с меньшей вероятностью возникновения контрагированных катодных пятен.

Построение алгоритма управления рабочими режимами разогрева катодов основывается на исходном значении энергии запуска $Q_{\text{зап}}$, необходимой для повышения температуры катода $T_{\text{к}}$ - массой $m_{\text{к}}$ до температуры появления термоэмиссии с учетом зависимости удельной изобарной теплоемкости материала катода $C_{\text{к}}$ от температуры, т. е. $Q_{\text{зап}} = C_{\text{к}}(T_{\text{к}}) m_{\text{к}}(T_{\text{к}} - T_{\text{н}})$.

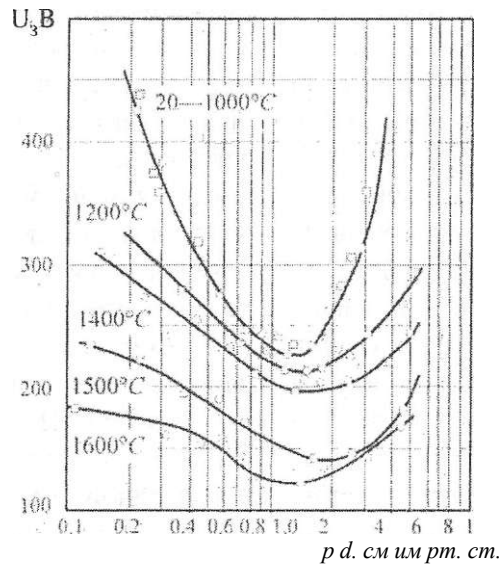


Рис.!

Непрерывный контроль вводимой в разряд энергии $Q_{\text{зап}} = i \cdot t / (T_{\text{к}}) \cdot i$ позволяет проводить вычисление текущей температуры катода с учетом известной зависимости $U - f(T_{\text{к}})$. Устройство запус-

ка катодов в рабочий режим включает систему слежения и стабилизации тока источника питания, обеспечивающую отключение тока в цепи на время, необходимое для ликвидации возникающих дуг

с контрактированными катодными пятнами ($I_{\text{пм}}J$). По величине это время должно быть меньше тепловой постоянной времени остывания катода (τ

т. е. $t_{\text{анвст}} \ll I_{\text{пм}} \tau$. Это обусловило высокую стабильность разогрева катодов и позволило обеспечить уровень эрозии катодов в пусковых режимах не более $1 \cdot 10^{-9}$ кг/Кл

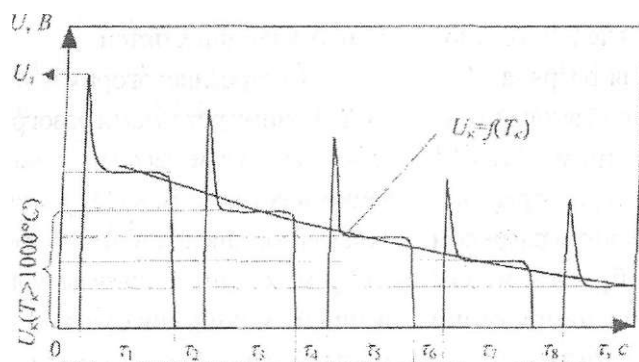


Рис.2

На рис.2 приведена зависимость рабочего напряжения на катоде от температуры катода $U_k = f(T_k)$ и его изменение во времени. Напряжение на катоде в диапазоне времени t соответствует режиму горения аномального тлеющего разряда при температуре до 1000°C . При возникновении в этот период контрактированных катодных пятен, что сопровождается резким увеличением тока, система защиты катода отключает источник питания на время, достаточное для деионизации межэлектродного (прикатодного) промежутка и распада плазмы вблизи катода, но недостаточное для значительного понижения температуры катода. Этот режим аналогичен показанному на рис.2 в периоды времени t_1 , t_4 , t_6 и т. д. При достижении температуры катода $T_k = 1000^\circ\text{C}$ рабочее напряжение на разряде снижается в соответствии с зависимостью $U_k = f(T_k)$, полученной на ос-

новании анализа кривых Пашена, приведенных на рис.1. Снижение напряжения на катоде $U_k > U_{t_7}$ и т.д. может проводиться без отключений, если источник питания позволяет это осуществлять. В этот период разогрева катода существенно увеличивается коэффициент вторичной эмиссии γ . Это способствует возникновению микропробоев в прикатодной области с возникновением локальных микродуговых разрядов, перемещающихся по внутренней поверхности катода. При токах до 10 А появление микродуговых разрядов в прикатодной области не приводит к дестабилизации аномального тлеющего разряда и существенному увеличению эрозии поверхности катодов. По мере разогрева катода до температуры появления тока термоэмиссии разряд скачком переходит в режим дугового разряда с полым катодом, который характеризуется диффузион-

ной (распределенной) катодной привязкой с прикатодным падением потенциала 20—30 В. При увеличении рабочего тока до 10 кА напряжение на разряде повышается до 90—100 В. Оптимизация пусковых режимов полых катодов позволяет сократить время запуска массивных катодов до 1—2 минут при сохранении величины эрозии катодов не выше $1 \cdot 10^{10}$ кг/Кл.

Для оценки тепловых процессов в катоде необходимо рассматривать нестационарный процесс теплопередачи от внутренней поверхности к наружной с оценкой осевых тепловых потоков. В общем виде тепловое состояние катодов определяется двенадцатью переменными и задаваемыми параметрами, от которых зависит температура внутренней поверхности катода T :

$$T = f(q_s, q_v, r, l, \gamma, I, d, \lambda, \alpha, T_{cp}, 15, 5),$$

где q_s —поверхностная мощность нагрева на внутренней поверхности катода; q_v —мощность тепловыделения в катоде; r, l, d —радиус, длина и толщина катода; t —время; $a = \sqrt{c \cdot \rho}$, λ , α —коэффициенты температуропроводности, теплопроводности и теплоотдачи; T_{cp}, T_0 —температуры средняя по толщине катода и охлаждающей среды; S —площадь поверхности нагрева и охлаждения; ρ, c —плотность и теплоемкость материала катода.

Используем традиционные подходы к решению задач такого типа [2]. Для реальных катодов можно принять, что внутренний радиус катода $r \gg d$, где d —толщина катода. В этом случае тепловые процессы в стенке катода можно рассматривать как в плоском теле (плите), для которого с помощью преобразования Лапласа можно решить дифференциальное уравнение теплопроводности с учетом объемной мощности тепловыделения:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{q_v}{c \cdot \rho} \quad \begin{matrix} 0 < x < l; \\ 0 < r < \infty, \end{matrix}$$

В связи с тем, что в соответствии с поставленной задачей наибольший интерес представляют скорости охлаждения катода, граничные и начальные условия принимаем

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0; \quad T = T_0 \text{ при } x = 0, l$$

Принятые допущения основываются на известном положении [2], что охлаждение полых цилиндров при нагреве изнутри можно рас-

сматривать как охлаждение плоских тел, если $d_{нар} / d_{вн} < 2$. При этом ошибка расчета оказывается менее 4 % и показатели ее снижаются с уменьше-

нием этого отношения.

Для установившегося режима

$$T(x) = T_{\kappa} \left[1 - \frac{x}{L} \right]$$

Для снижения числа параметров введем следующие симплексы:

$$\Theta = \frac{T - T_0}{T_{\kappa} - T_0} \quad \text{— относительная температура внутренней стенки катода;}$$

x/d — относительная координата.

Кроме этого будем использовать критерии подобия Фурье $F = a * t / d^2$ и Био

(∞) распределение температуры

$T(x)$ по толщине стенки катода [3]:

$$T(x) = T_{\kappa} \left[1 - \frac{x}{L} \right]$$

$Bi = a * d / \lambda$. В выражении для Θ : T — текущая температура внутренней поверхности катода; T_{κ} — температура этой поверхности перед началом охлаждения. Тогда $\Delta T = T_{\kappa} - T$ — снижение температуры за время t .

Решение задачи охлаждения катода получено в виде аналитического выражения для относительной температуры имеет и вид [3]:

$$\Theta = \frac{T - T_0}{T_{\kappa} - T_0} = \frac{2 Bi}{Bi + 1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 + (k + Bi) \sqrt{F_0}} \exp(-s_k^2 F_0)$$

где s_k — корни трансцендентного уравнения $s_k * tg s_k = a * d / \lambda = Bi$. По этому выражению рассчитаны и широко представлены в литературе [2, 3] графики Будрина охлаждения пластин $\Theta = \Theta(F_0, Bi)$, которые позволяют определять снижение температуры катода за паузы времени t . Для катодов вакуумных плазмот-

ронов критерии F_0 , и Bi изменяются в следующих диапазонах: $Bi = 0,04 \dots 0,1$; $F_0 = 0,8 \cdot 10^{-3} \dots 5 \cdot 10^{-3}$. Численные оценки Θ показывают, что изменение относительной температуры при $t = 1 \dots 5$ с лежит в пределах $0,95 \dots 0,99$. Это может учитываться при расчетах баланса энергии в режимах разогрева катодов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Чердниченко А. В. Пусковые режимы полых катодов вакуумных плазмотронов в тлеющем разряде. — Научный вестник НГТУ. — 2000. — № 1.
2. Электрические промышленные печи. Учебник для вузов. - В 2-х ч. - Ч. 1.

3. А. Д. Свенчанский. Электрические печи сопротивления. - Изд. 2-е. - М.: Энергия, 1975.

4. Шадрин Н. И. Расчет охлаждения футерованных электрических печей сопротивления периодического действия — НТС Электротермия, — 1967, № 62.

УДК 621.365.9

ИНДУКЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ НАГРЕВА С КОАКСИАЛЬНЫМИ ЦИЛИНДРАМИ

К.В. Хацевский

**Павлодарский государственный университет
им. С. Торайгырова**

В.С. Чередниченко

**Новосибирский государственный технический
университет**

Бул жұмысғи электроэнергиясын жылу энергиясына айналдырудың ферромагниттік өзекшелері бар коаксиалды цилиндр/ер түрінде жасалған электр магниттік жүйелері қарастырылған.

В настоящей работе рассмотрены электромагнитные системы преобразования электрической энергии в тепловую, выполненные в виде коаксиальных цилиндров с использованием ферромагнитных сердечников.

Electromagnetic transformation systems of electrical energy to heat executed as coaxial cylinders with use ferromagnetic cores are considered in this paper.

1. Введение

Низкотемпературные нагреватели жидкостей и газов выпускаются в различных конструктивных вариантах многими отечественными [1,2] и зарубежными фирмами и организациями [3, 4]. Имеется большое число патентов, в которых предложены различные конструктивные решения индукционных нагревателей для данной цели [5-8].

По принципу работы эти уст-

ройства аналогичны трансформаторам. На рис. 1 для примера показаны конструктивные схемы перспективных быстродействующих водонагревателей.

Полости для нагрева жидкостей создаются в виде полых концентрических цилиндров, помещенных внутри индуктора (рис. 1а), из трубки (рис. 1б), полых цилиндров, образующих кольцо коробчатого сечения и охватывающих

индуктор (рис. 1в) или магнитопровод (рис. 1г). Особенностью конструкции, приведенной на рис. 1а; является то, что цилиндры выполнены из ферромагнитной стали и совместно с подводным и отводящим коллекторами выполняют роль магнитопровода. Наиболее часто магнитопроводы выполняются из электротехнической стали. В индукционных нагревателях такого типа вторичные обмотки в виде коаксиальных цилиндров играют роль промежуточных нагревателей для непроводящих материалов—жидкостей и газов. Очевидная взаимосвязь электромагнитных, тепловых и гидродинамических параметров, определяющих эксплуатационную эффективность конструкции в

целом, возможность выполнения вторичной обмотки в виде двух и более коаксиальных цилиндров определили необходимость разработки специальных методов расчета таких систем нагрева. В этих исследованиях индукционные устройства нагрева рассматриваются как отрезок бесконечной электромагнитной системы без учета краевых эффектов. В задачи настоящей работы входит общий анализ электромагнитных связей в системе нагрева, выявление оптимизационных взаимосвязей между конструктивными и режимными параметрами, эксплуатационная и расчетная оценки влияния краевых эффектов на результаты инженерных расчетов.

2. Постановка задачи

Возможное многообразие технических решений проточных индукционных нагревателей трансформаторного типа обобщаются магнитной системой, включающей магнитопроводы и электропроводящие коаксиальные цилиндры. Конструктивная схема обобщенной системы приведена на рис. 2.

В теории индукционного нагрева существуют два подхода к математическому описанию такого типа систем. Первый основан на известных физических законах—законе Фарадея (электромагнитной индукции) и законе Джоуля-Ленца (преобразование электрической энергии в тепловую),

которые имеют вид: в дифференциальной форме $e = -c i \Phi / dt$, $p = E^2 / \rho$, и в интегральной форме $U = 4,44 f B S$, $P = U^2 / R$. В этих выражениях e —электродвижущая сила; Φ - магнитный поток, t - время; p_v - удельная объемная мощность; E —напряженность электрического поля; ρ - удельное электрическое сопротивление; U - напряжение; f - частота; B - магнитная индукция; S - площадь поверхности, через которую проходит магнитный поток; P - мощность; R - активное сопротивление проводника. Этот подход будет нами использоваться для анализа электромагнитных связей между отдельными

элементами системы: магнитопродом, индуктором и коаксиальными цилиндрами. На основе постановки задачи, принятой в [9], с использованием схем замещения и теории цепей проведена оценка электрических параметров системы нагрева с коаксиальными цилиндрами без учета краевых эффектов.

Второй подход основывается на уравнениях Максвелла, характеризующих локальные параметры

электромагнитного поля:

$$\operatorname{rot} H = E/p + dD/df,$$

$$\operatorname{div} \vec{E} = -\partial B / dt;$$

$$B = ju/LIqH; D = \epsilon \epsilon_0 E; \operatorname{div} B = 0; \operatorname{div} E = a$$

где H - напряженность магнитного поля;

D - электрическая индукция;

ϵ - магнитная проницаемость;

s - диэлектрическая проницаемость;

и ϵ_u - магнитная и электрическая постоянные;

a - плотность электрических

зарядов.

Этот подход позволяет проводить анализ процессов внутри тел, находящихся в электромагнитном поле, и будет нами использоваться для определения собственных сопротивлений элементов, составляющих индукционную систему. Укажем здесь же, что электромагнитная волна несет энергию, определяемую вектором потока энергии - вектором Иойтинга: $S = |i \cdot n \setminus E$ если ϵ и μ изменяются во времени по синусоидальному закону, т.е. описываются комплексными выражениями, то выражение для среднего за период значения вектора потока энергии будет иметь вид: $Y_0 = Y \wedge [\vec{E} - H^*]$, где n^* - сопряженная величина вектора n . Физически вектор qI является средним значением (за период) величины потока энергии в секунду через единицу площади, перпендикулярной направлению волны, и определяет развитие процессов нагрева жидкостей и газов, т.е. тепловое поле в системе нагрева.

3. Магнитная схема замещения системы нагрева с коаксиальными цилиндрами

В соответствии с обобщенной конструктивной схемой, приведенной на рис. 2. нагрузкой индуктора являются короткозамкнутые коаксиальные цилиндры, охватывающие индуктор с внешней стороны. Внутри индуктора помещен

ферромагнитный сердечник. Для проведения предварительного анализа будем считать, что эта система имеет большую протяженность и в модели можно рассматривать соотношение параметров на единицу ее длины.

В соответствии с законом электромагнитной индукции в каждом коаксиальном цилиндре, создающем самостоятельный замкнутый контур, наводится электродвижущая сила e_n , величина которой определяется скоростью изменения потокосцепления конкретного контура Ψ :

$$e = -d\Psi/dt, \quad (1)$$

где p - число путей распределения магнитного потока.

На рис. 3 приведена магнитная схема замещения рассматриваемой системы нагрева, из которой следует, что потокосцепление снаружи индуктора разделяется на $\Psi_P = \Phi_I, \Phi_{II}, \Phi_{III}, \dots$, и, следовательно, можно записать

$$\Psi_0 = \Phi_1 + \Phi_2 + \dots + \Phi_n, \quad (2)$$

Необходимо учитывать, что потокосцепление каждого цилиндра создается не только магнитным потоком в конкретном зазоре $\Phi_{12}, \Phi_{23}, \dots, \Phi_{n-1,n}$, но и собственным магнитным потоком каждого цилиндра Φ при протекании по нему электрического тока i , т.е.

$$\Phi_{II} = \Phi_{II,II} + \Phi_{II} \quad (3)$$

Величина $\Phi_{II,II}$ э.д.с. самоиндукции $e = -L_n \cdot di/dt$, где L_n -

индуктивность каждого цилиндра. Составляющие магнитного потока создаются индуктором так, что

где $T_{w_{j0}}$ - количество ампер-витков индуктора на единицу длины;

$$J_{\theta}^* = \dots$$

A_{j0} - комплексное магнитное сопротивление каждого из путей магнитного потока;

U_j - напряжение на индукторе;

w_j - число витков индуктора;

f - частота;

Z - электрическое сопротивление отдельных элементов системы нагрева.

Выражение (4) позволяет провести предварительный анализ рассматриваемой системы нагрева. Так как устройство аналогично по конструкции трансформатору (после преобразований все сопротивления вторичной цепи - коаксиальных цилиндров - приводятся к эквивалентному сопротивлению Z''_m), то для него справедливо выражение для числа витков индуктора $w = U_1/U_2$, где U_1 - напряжение на индукторе (например, 220 или 380 В); Z''_m - эквивалентная электродвижущая сила, наведенная в коаксиальных цилиндрах. При снижении эквивалентного электрического сопротивления коаксиальных цилиндров Z''_m , но при постоянстве напряжения на

индукторе U и мощности, выделяющейся в коаксиальных цилиндрах, общее число витков индуктора w , увеличивается за счет снижения J_y . Следовательно уменьшается магнитный поток в магнитопроводе ($\Phi_n = U/4,44-wff$) и при постоянстве магнитной индукции $B=0/S_v$, снижается сечение магнитопровода S_v , его масса, потери в магнитопроводе и его реактивная мощность. Это позволяет сделать нагревательное устройство более компактным и экономит электротехническую сталь. Однако, увеличение числа витков индуктора w , увеличивает расход меди (или алюминия) при сохранении плотности тока в индукторе. Поэтому для каждой конструкции нагревательного устройства имеется оптимальное соотношение масс электротехнической стали и меди (алюминия), используемой для индуктора.

Таким образом, соотношение эквивалентных сечений цилиндров и их высота, магнитная проницаемость, удельное электрическое сопротивление материала цилиндров и расстояние

между ними являются оптимизационными параметрами, так как влияют на стоимость устройства и эксплуатационные показатели $\{\cos \phi, \text{ а также } \gamma^{\wedge}\}$. Снижение эквивалентного электрического сопротивления вторичной цепи достигается установкой параллельно первому каждому последующему коаксиального цилиндра. Связь электрического расчета устройства с теплотехническим в конкретной методике осуществляется заданием значения допустимой удельной поверхностной мощности на поверхностях нагрева q_0^S , которую легко изменять установкой дополнительного коаксиального цилиндра, выполнением цилиндров с продольными и радиальными ребрами и другими путями. Это же позволяет обеспечивать оптимальные эксплуатационные параметры при выполнении нагреваемых цилиндров из ферромагнитных или немагнитных материалов.

В зазорах между индуктором и ближайшим к нему цилиндром и между цилиндрами магнитные потоки можно рассчитывать по следующим выражениям:

$$\Phi_{12} = \frac{y/\pi}{4\sigma l} \frac{CO}{H_{J2}} = M\sigma^{H_{J2}} (d_{1B} \quad d_{0H}) \quad (5)$$

$$\Phi_{12} \sim M\sigma^{H_{J2}} \frac{H_{J2} x_{12}}{CO} (d_{2B} \quad d_{JH}) \quad (6)$$

Наличие в схеме замещения, приведенной на рис. 3, составляющей магнитного потока Φ , (снаружи пос-

леднего в системе нагрева цилиндра), определяется конечным значением протяженности системы, т.е. высотой

н этого цилиндра.

Магнитные потоки, проходящие в коаксиальных цилиндрах, соответственно равны:

$$\Phi_{\text{ч}} = \frac{J_{\text{сo}}}{\pi n} \cdot \frac{M}{\pi} \cdot \frac{Y_{\text{н}}}{\pi} \cdot \frac{L_{\text{ч}}}{\pi} \cdot \frac{L_{\text{сo}}}{\pi} \quad (7)$$

$$\Phi_{\text{ч}} = \frac{J_{\text{сo}}}{\pi n} \cdot \frac{M}{\pi} \cdot \frac{Y_{\text{н}}}{\pi} \cdot \frac{L_{\text{ч}}}{\pi} \cdot \frac{L_{\text{сo}}}{\pi} \quad (8)$$

где Z_{2i} - собственные электрические сопротивления цилиндров;

X_{2i} и X_{2i}^* активные и индуктивные сопротивления слоев

цилиндров, по которым проходит магнитный поток.

Полученные выражения позволяют произвести предварительный анализ новой системы нагрева.

ЛИТЕРАТУРА

1. Елшин А.И., Казанский В.М. Безопасные электронагреватели // Сб. науч. тр. электронагреватели трансформаторного типа. - Новосибирск: Изд-во НГТУ, 1997. С. 46-57.

2. Химические аппараты с индукционным обогревом. С.А.Горбатков, А.Б.Кувалдин, В.Е.Минеев и др. - М.: Химия, 1985. - 176 с.

3. Carl Canzler. Induction Heating, S. 4 [Каталог фирмы]. М.: Отделение Всесоюз. науч.-исслед. ин-та электромеханики. Микрофильм № И, 15.01,38. -1969.

4. Otto junker GMBN. Kombinierte Ausen - und Innenbeheizung Lammersdorf. - 3 S. [Проспект фирмы]. -1971.

5. Елшин А.И. Расчет ширины кольцевого канала теплообмен-

ника трансформатора - нагревателя.// Научный вестник НГТУ. - 1999, - № 2 (7). - С. 78-90.

6. Кувалдин А.Б. Низкотемпературный индукционный нагрев стали. - М.: Энергия. - 1976 - 112 с.

7. Чередниченко В.С. Расчет индукционных нагревателей с электромагнитными экранами //Электротермия. - 1967, Вып. 66, - С. 27-31.

8. Инкин А.И., Литвинов Б.В. Синтез каскадных схем замещения индукционных электрических машин на базе типовых Е - Н четырехполюсников. -Электротехника, 1977,№ 1. -С. 29-33.

9. Инкин А.И., Чередниченко В.С.,ХацевскийК.В. и др. Расчет индукционных систем нагрева трансформаторного типа // Электротехника, 2000. -№ И.

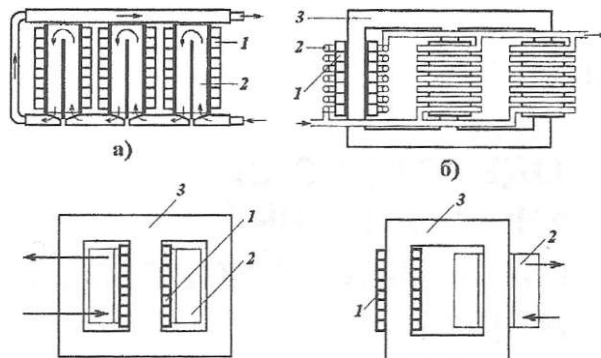


Рис. 1. Индукционные нагреватели трансформаторного типа:
 1 - индуктор; 2-нагреватель(вторичная обмотка);
 3 - магнитопровод

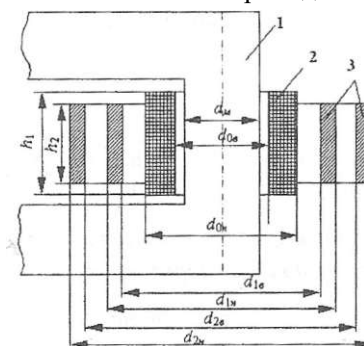


Рис.2. Обобщенная конструктивная схема системы нагрева:
 1-магнитопровод; 2-индуктор;
 3-коаксиальные цилиндры

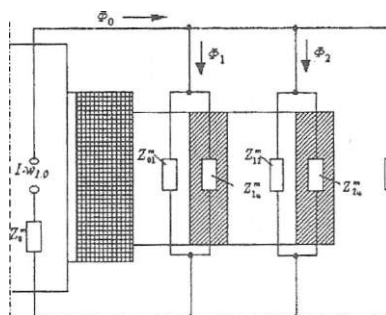


Рис.3. Магнитная схема замещения системы нагрева

УДК 621.317.729

БЫСТРОДЕЙСТВУЮЩИЙ ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЙ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ НАПРЯЖЕНИЯ

Н.И. Овчаренко

Московский энергетический институт

Ю.А. Пеньков

Павлодарский государственный университет

им. С. Торайгырова

Бұл мақалада кернеудің гальваномагниттік өлшеуіші турлгндіргіштерін қурудың сурақтары қаралады.

В статье рассматриваются вопросы построения гальваномагнитных измерительных преобразователей напряжения.

The questions of construction galvanomagnetic measuring changer of a voltage are considered in the item.

Гальваномагнитные измерительные преобразователи амплитуды переменного тока промышленной частоты в напряжение постоянного тока автоматических устройств телеизмерения напряжения и регулирования возбуждения синхронных генераторов выполняются [1] на основе однофазных и трехфазных выпрямителей. Выпрямленные напряжения, кроме сигнала - постоянной составляющей, содержат помехи - гармонические составляющие, кратные промышленной частоте.

Для выделения сигнала используются частотные фильтры нижних частот с постоянной времени не менее половины периода T_n промышленной частоты, которые создают инерционность измерительных преобразователей, обычно оцениваемую временем установления сигнала на их выходе 0,95 при нулевых начальных условиях переходного процесса $t_y > 3T \ll 1,5T_n$. Необходимость в столь инерционном фильтре и при трехфазном выпрямителе обуславливается его действием как

однофазного при сильной несимметрии трехфазной системы напряжений, в частности, при двухфазных коротких замыканиях.

Свойство сдвоенного гальваномагнитного генератора ЭДС Холла [2] (сдвоенного холлотрона) взаимной компенсации гармонических составляющих ЭДС исключает необходимость в инерционных частотных фильтрах и обеспечивает быстрое действие измерительного преобразователя амплитуды напряжения.

На рисунке 1 приведена схема быстродействующего измерительного преобразователя напряжения, выполненного на двух гальваномагнитных измерительных преобразователях мгновенной мощности

ИПМ1 и ИПМ2 типа П030.1, выпускаемых Кишиневским заводом «Виброприбор». При его выполнении изменение обмоточных данных магнитных систем МС1, МС2 холлотронов не производится, в связи с опасностью разрушения расположенных в воздушных зазорах магнитопроводов полупроводниковых пластин X1, X2. Поэтому применялись согласующие трансформаторы T1 и T2 с коэффициентами трансформации $n_m = 277$, в качестве первичной обмотки W1 магнитных систем МС1, МС2 использовалась обмотка, рассчитанная на ток 5А, а в качестве вторичной W2 - дополнительная обмотка, предназначенная для подключения ИПМ на номинальный ток 1А.

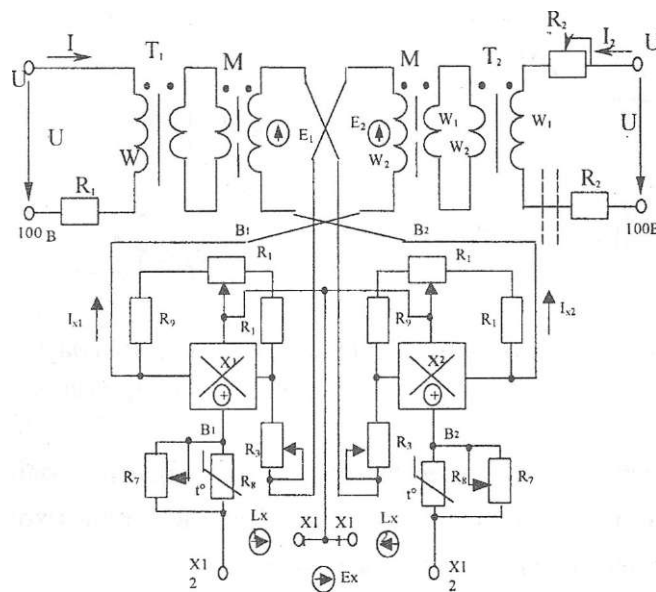


Рисунок 1. Принципиальная схема трехфазного измерительного преобразователя амплитуды напряжения

Выходное напряжение измерительного преобразователя определяется только удвоенным значением постоянной составляющей ЭДС Холла, поскольку гармонические составляющие взаимно компенсируются [2]:

$$E_x = 2 \cdot I_1 \cdot I_2 \cdot \cos \theta \quad (1)$$

где θ - угол сдвига фаз между токами I_1 и I_2 в первичных обмотках $W1$ магнитных систем $MC1$ и $MC2$;

θ_x - угол сдвига фаз между ЭДС E_1 , E_2 во вторичных обмотках $W2$ соответственно токами I_1 , I_2 в полупроводниковых пла-

стинах $X2$, $X1$ холлотронов.

На рисунке 2 приведена схема входных цепей измерительного преобразователя амплитуды однофазного напряжения в постоянную ЭДС и векторные диаграммы, соответствующие углу сдвига фаз θ между входными токами I_1 , I_2 равному $\theta = 7:12$, при котором согласно (1) ЭДС Холла максимальна. Углы $\theta_{u1} > \theta_{u2}$ одинаковых по абсолютному значению входных сопротивлений магнитных систем $MC1$, $MC2$ холлотронов за счет конденсатора C в цепи $MC2$ имеют разные знаки $\theta_{\llcorner} = \theta - \theta_{\llcorner} = \theta - \theta_{\llcorner} = \theta - \theta_{\llcorner}$.

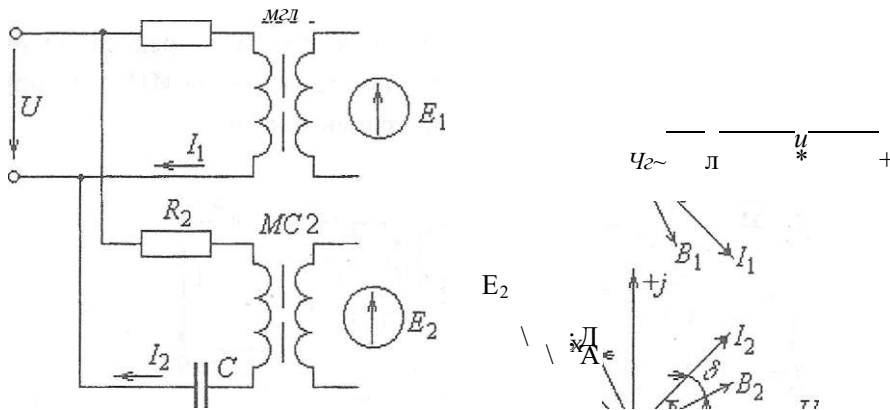


Рисунок 2. Схема входных цепей и векторные диаграммы измерительного преобразователя однофазного напряжения.

Быстродействие измерительного преобразователя ограничивается лишь постоянной времени входных цепей. При идентичных холлотронах трехфазного измерительного преобразователя

$$h = 2 \cdot \tau = 2 \cdot \tau_{ex} \cdot m_n = 2 \cdot \tau_{ex} \cdot n \cdot U$$

и при $\tau_{\llcorner} < \tau_{ex} < \tau_{114}$ постоянная времени составляет

$1,83 < \tau < 3,18$ мс.

Время t_y установления выходного сигнала на уровне 0,95 при нулевых начальных условиях апериодических переходных процессов в холлotronах составляет $TJ4 < t_y < TJ2$.

Инерционность однофазного измерительного преобразователя определяется колебательным переходным процессом во входной цепи MC2 (с конденсатором C), постоянная времени которой в два раза больше. Поэтому целесообразны углы $\alpha_x = |-\alpha_2| = 7Z/6$, при которых постоянные времени входных цепей холлotronов составляют $\tau = 1,83\mu\text{с}$ и $m = 3,66$ мс, а время установления сигнала $t_y = T_n / 2$. Уменьшение угла Q сдвига фаз между токами I_1, I_2 до $\theta = \pi/3$ лишь несколько снижает согласно (1) постоянную ЭДС Холла.

Постоянная ЭДС Холла од-

$$AU \ll (1 \pm \Delta\epsilon V)^2 - 1 = \pm 2-AU, -AU? \ll 2-\Delta\epsilon/. \quad (3)$$

Для обеспечения постоянной времени $\tau = \tau_2 = 1,83\mu\text{с}$ (при отключенном конденсаторе C), соответствующей углу входного сопротивления $\arg Z_{\text{вх}} = \pi/6$, при входных сопротивлениях нагруженных

нофазного и трехфазного измерительных преобразователей при симметричной системе напряжений согласно (1) является квадратичной функцией амплитуды напряжения. Такая характеристика целесообразна для измерительных преобразователей устройств телеизмерения [1].

Она допустима и для измерительного органа напряжения автоматического регулятора возбуждения синхронного генератора. Напряжение на выходе измерительного органа определяется как отклонение ΔU от установленного значения. В симметричном режиме ЭДС Холла определяется по выражению:

$$E \ll (\pi/3/2) - (1 \pm \Delta\epsilon U)^2, (2)$$

где AU , - относительное отклонение напряжения.

При относительном отклонении $AU^* < 0,1$ напряжение AU практически пропорционально AU_i :

трансформаторов T1 или T2 $Z_{r1} = 3400 \cdot e^{-m/4} = 2400 + j2400$ Ом установлен балластный резистор $R1 = R2 = 1800$ Ом. Балластный резистор в цепи MC2 состоит из постоянного сопротивления

$R'_2 = 1 \text{ КОМ}$ и переменного $R'' = 0,15 \text{ КОМ}$ позволяющего в указанных пределах изменять угол сопротивления первичной цепи трансформатора Т2 при настройке измерительного преобразователя. Входное сопротивление нагруженных трансформаторов Т1 или Т2 с учетом балластного резистора составляет $Z_a = 4200 + j2400 = 4800 \cdot e^{j29^\circ}$.

Согласующие трансформаторы Т1 и Т2 выполнены на магнитопроводе из пермаллоя трансформатора тока от ИПМПОЗО.1 (Ш16 х 20) и при номинальных напряжениях $u_{\text{вном}} = u_{2\text{шии}} = ШВ$ имеют количество витков первичной обмотки $W1 = 3600$, а вторичной $W2 = 13$. Емкость конденсатора С в цепи трансформатора Т2, соответствующая сопротивлению $X_c = -j2 \cdot 2400 \text{ Ом}$, равна $C = 0,65 \text{ мкФ}$.

Постоянная времени входной цепи МС2 однофазного измерительного преобразователя, как указывалось, составляет $t_2 = 3,6 \text{ мс}$.

Номинальная выходная ЭДС $E_{\text{хнои}} = 50 \text{ мВ}$ устанавливается при $U \setminus U_2 = U_{\text{шп}}$: переменным резистором $R_3 = 22 \text{ Ом}$, изменяющими ток в полупроводниковых пластинах холлотронов. При этом посто-

янные составляющие ЭДС e_{x1}, e_{x2} каждого холлотрона должна составлять $E_{\text{хшии}} / 2$. Для полной компенсации их гармонических составляющих удвоенной промышленной частоты резистором R_2 выравниваются углы входных сопротивлений холлотронов. Резисторы R_m используются в соответствии с инструкцией завода для устранения на выходе составляющей промышленной частоты. Терморезистор R_s с резистором R_l переменного сопротивления служит для термокомпенсации выходного напряжения нагруженного преобразователя.

Входные цепи измерительного преобразователя выведены на клеммы передних панелей ИПМ1, ИПМ2 типа П030.1, механически соединенных между собой, в соответствии с заводскими обозначениями, указанными на рисунке 1. Цепи ЭДС e_{x1}, e_{x2} и выходной ЭДС E_x подключены к клеммам задних панелей с обозначениями X\ 1, X12.

При изготовлении холлотронов для описанных измерительных преобразователей напряжения без согласующих трансформаторов Т1 и Т2 первичные обмотки магнитных систем МС1 и МС2 должны выполняться с числом витков

W1 - 5500 проводом диаметра 0,12 мм, а вторичные W2 = 80 проводом диаметра 0,28 мм. При этом магнитопроводы магнитных систем MC1 и MC2 целесообразно изготавливать из пермаллоя, как это делается в ИПМ П030.1, поскольку магнитное сопротивление определяется практически воздушным зазором.

Благодаря преобразованию амплитуды напряжения в «чистую»

постоянную ЭДС и быстродействию и в связи с разработкой миниатюрных и термостабильных полупроводниковых элементов Холла [3], описанный измерительный преобразователь амплитуды напряжения рационально сопрягается с интегральными операционными усилителями в схемах измерительных органов, особенно автоматических регуляторов возбуждения синхронных генераторов сильного действия [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. Овчаренко Н. И. Автоматика электрических станций и электроэнергетических систем,- М.: Изд-во НЦ ЭНАС, 2000,- 504 с.

2. Аушев А. И., Овчаренко Н.И., Леньков Ю. А., Овчаренко И. Н. Сдвоенный гальваномагнитный

измерительный преобразователь мощности // Промышленная энергетика,- 1987,-№1,-С. 40-42.

3. Хомерики О.К. Гальваномагнитные элементы и устройства автоматики и вычислительной техники,- М.: Энергия, 1975,- 176 с.

УДК 681.3.06(075.8)

ОЦЕНКА УСТОЙЧИВОСТИ ЛИНЕЙНОЙ СИСТЕМЫ ПО КРИТЕРИЮ РАУСА В СРЕДЕ MATLAB 5.X

В.А. Бороденко

*Павлодарский государственный университет
им. С. Торайгырова*

Раус тұрақтылығы негізінің мысалында MatLAB математикалық есептеулер жүйесінде бағдарламалау ережеліктері қарастырылады.

Рассматриваются особенности программирования в системе математических расчетов MatLAB на примере критерия устойчивости Рауса.

Special methods of Routh stability criterion programming in mathematic calculation system MatLAB are investigated.

Анализ устойчивости линейных систем автоматического регулирования (САР) может производиться прямыми методами (по корням характеристического уравнения) и косвенными (по его коэффициентам). В последнем случае используют критерии устойчивости, в том числе критерий Рауса.

Для анализа формируют таблицу Рауса [1-3] из p строк, где p - количество коэффициентов характеристического полинома. Первую строку таблицы заполняют последовательно коэффициентами с четными индексами, вторую - с нечетными, незаполненные ячейки содержат ноль. Остальные строки заполняют по правилу

$$r_{ij} = \frac{r_{i-2,j+1} \cdot r_{i-1,j+1} - r_{i-1,j} \cdot r_{i-2,j}}{r_{i-1,j+1}} \quad (1)$$

где i, j - соответственно номер строки и столбца. Система устойчива, если все элементы первого столбца таблицы положительны, и неустой-

чива, если хотя бы один элемент первого столбца отрицателен, причем число правых корней характеристического уравнения (корней с поло-

жительной действительной частью) равно числу перемен знака в первом столбце.

Система математических расчетов MatLAB [4] включает большинство необходимых для исследо-

вания САР функций. Например, для оценки устойчивости по корням достаточно ввести вектор коэффициентов характеристического полинома и воспользоваться встроенной функцией *roots()*. Если задан полином

$$P(x) = x^6 + 2x^5 + 3x^4 + 4x^3 + 5x^2 + 6x + 7$$

то, используя систему MatLAB в режиме непосредственных вычислений, можем найти его корни

```
» p=[1 2 3 4 5 6 7];
» roots(p)
ans =
-1.3079 + 0.5933i
-1.3079 - 0.5933i
 0.7104 + 1.Ю68i
 0.7104- 1.Ю68i
-0.4025 + 1.3417i
-0.4025- 1.3417i
```

и сделать вывод, что система неустойчива, так как имеет два правых корня. Однако встроенной функции расчета критерия Рауса программа не имеет, хотя ее наличие при использовании программы в учебном процессе желательно.

Создадим пользовательскую функцию *routh()*, формирующую из p коэффициентов полинома матрицу g размером $n \times m$, где $m=n/2$ при четном n и $m=(n+1)/2$ при нечетном n . Функция будет записана в виде файла с расширением m , первые

строки комментария, начинающиеся символом `%` обычно выводятся на экран при запросе справки по функции *help routh*. Операторы в одной строке разделяются символом `;`, этот же символ в конце строки отменяет немедленный вывод результата на экран.

Функция *length()* позволяет найти длину вектора (количество коэффициентов полинома) p , которая и определит число строк в таблице. Число столбцов t получим с помощью функции округления *round()*. Применив функцию *zeros()*, создадим нулевую матрицу размером p на t . Символ двоеточия в MatLAB позволяет указывать целиком строку, столбец матрицы, задавать числовой вектор его начальным, конечным значением и шагом (если величина шага не указана, по умолчанию она равна единице), либо крайними индексами элементов и шагом. Учитывая изложенное, запишем первую и вторую строки таблицы.

```
n=length(p);
m=round(n/2);
r=zeros(n,m);
r(1,:)=p(1:2:n);
r(2,1:fix(n/2))=p(2:2:n);
```

Функция *fix()*, отбрасывающая дробную часть числа, позволяет соблюсти требования равенства размеров присваиваемого и читаемого векторов для четного и нечет-

```
for i=3:n
    j=1:m;
    r(i,j)=r(i-2,j+1)-r(i-1,j+1)*r(i-2,1)/r(i-1,1);
end
```

Цикл в MatLAB начинается словом *for* и заканчивается словом *end*, аналогично формируется блок проверки условия *if... end* (без слова *then*).

Осталось предусмотреть случай, когда в первом столбце оказывается нулевой элемент $r(i-1,1)$, на который делить нельзя. Рекомендуется [1] вместо нуля принять очень маленькую положительную величину и продолжать вычисления. Воспользуемся для этого имеющейся в MatLAB константой *realmin*, которая и является минимально возможным действительным числом $2.2251e-308$.

```
den=r(i-1,1);
if den " 0
den=realmin;
end
```

ного p при формировании второй строки таблицы Рауса.

Задача программирования расчета остальных элементов таблицы в соответствии с (1) облегчается в MatLAB тем, что векторная форма задания изменения переменной освобождает порой даже от необходимости записывать сам цикл (например, как это сделано для переменной j).

Обратите внимание на то, что в MatLAB символ «= \Rightarrow » соответствует присвоению, а равенство записывается двойным таким символом.

Результат, полученный при использовании созданной функции *routh()* для того же полинома p , нельзя считать удовлетворительным

```
» routh(p)
ans =
    1     3     5     7
    2     4     6     0
    1     2     7     0
    0    -8     0     0
   Inf     7     0     0
   -8     0     0     0
   NaN  NaN  NaN     0
```

Здесь *Inf*- обозначение бесконечности, эта величина может иметь знак и не мешает анализу устойчи-

ности, тогда как $NaN(m$ число, неопределенность), величина, получающаяся при операциях вида умножения бесконечности на ноль, отношения двух нулей и т.д., не способствует правильности анализа.

В силу этого введем вторую проверку - если элемент $r(i-2,l)$ равен бесконечности **Inf**, что и ведет к появлению NaN , заменяем его на очень большое число $realmax$, равное $1.7977e+308$, сохраняя знак бесконечности

```
nom=r(i-2,l);
if abs(nom)==Inf
    nom=realmax*sign(nom);
end
```

Повторим расчет для полинома p

```
» routh(p)
ans =
    1    3    5    7
    2    4    6    0
    1    2    7    0
    0   -8    0    0
   Inf    7    0    0
   -8    0    0    0
    7    0    0    0
```

Для большинства полиномов работа функции в таком виде будет удовлетворительной. Однако следует учесть и специальный случай, вызываемый наличием пар комплекс-

ных корней, одинаковых по величине, но разных по знаку. Найдем корни такого полинома [2] и применим созданную функцию

```
»p=[1 3 8 18 37 75 50];
» roots(p)
ans =
    1.0000 + 2.0000i
    1.0000 - 2.0000i
   -1.0000 + 2.0000i
   -1.0000 - 2.0000i
   -2.0000
   -1.0000
» routh(p)
ans =
    1    8   37   50
    3   18   75    0
    2   12   50    0
    0    0    0    0
   12   50    0    0
    0    0    0    0
   50    0    0    0
```

У системы имеется два правых корня $l \pm j2$, однако в первом столбце полученной таблицы Рауса отсутствуют отрицательные элементы, что приводит к неверному выводу. Признаком рассматриваемого случая является строка, в которой все элементы нулевые (четвертая сверху).

Предложено [1] заменять нулевой ряд производной полинома, составленного из коэффициентов предшествующей строки, в частности, по следующим формулам [3]

$$\begin{aligned} r_{i+1,1} &= (i - / + !) \% ; \\ r_{i+1,2} &= (n - i - 1) * r_{i,2} \\ r_{i+1,3} &: \{P \sim I - 3\} * r_{i,3} \dots \end{aligned}$$

Дополним данные формулы условием, что количество значащих коэффициентов в ряду должно быть больше одного, иначе возможна ошибка при наличии нулевого коэффициента в последней или предпоследней строке

```

if r(i,:)==0 & i<n-1
    ni=n+1-i;
    for j=1:m
        r(i,j)=r(i-1j)*ni;
        ni=ni-2;
    end
end
end

```

Теперь для того же полино-

ма созданная функция возвращает таблицу с отрицательным коэффициентом в первом столбце, что правильно указывает на неустойчивую систему с двумя правыми корнями
» routhfp)

```

ans =
1.0000      8.0000    37.0000    50.0000
3.0000     18.0000    75.0000      0
2.0000     12.0000    50.0000      0
8.0000     24.0000      0          0
6.0000     50.0000      0          0
-42.6667      0          0          0
50.0000      0          0          0

```

Ниже приводится текст окончательно записанного файла *routh.m*, который соответствует функции пользователя, допускающей применение наряду со стандартными функциями системы MatLAB.

```

function r = routh(p)
% Расчет таблицы Рауса для оценки устойчивости линейной системы
% входной параметр - полином p, выходной параметр - матрица r

% Бороденко В.А. 1.03.2001

n=length(p);
m=round(n/2);
r=zeros(n,m);
r(1,:)=p(1:2:n);           % заполнение первых двух строк таблицы
r(2,1:fix(n/2))=p(2:2:n);
m=m-1;
for i=3:n                   % заполнение остальных строк таблицы
    den=r(i-1,1);
    if den==0                % если знаменатель равен нулю
        den=realmin;

```

```

end
nom=r(i-2,1);
if abs(nom)==Inf          % если числитель равен бесконечности
    nom=realmax*sign(nom);
end
j=1:m;
r(i,j)=r(i-2,j+1)-r(i-1,j+1)*nom/den;
if r(i,:)==0 & i<n-1      % если ряд (более одного члена) равен нулю
    ni=n+1-i;
    for j=1:m
        r(i,j)=r(i-1,j)*ni;
        ni=ni-2;
    end
end
end
end

```

ЛИТЕРАТУРА

1. Справочная книга по технике автоматического регулирования: Под общей ред. Дж. Дж. Тракссела. - М.-Л.: ГЭИ, 1962. - 784 с.
2. Луи де Пиан. Теория линейных активных цепей: Пер. с англ. - М.-Л.: Энергия, 1967. - 536 с.
3. Электрические системы. Математические задачи электроэнергетики: Под ред. В.А. Веникова. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Высш. школа, 1981. - 288 с.
4. Лазарев Ю.Ф. MatLAB 5.x. - К: Издательская группа ВНУ, 2000. - 384 с.

УДК 621.316:3

МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ИЗОЛЯЦИИ Ш ТОКА ОДНОФАЗНОГО ЗАМЫКАНИЯ НА ЗЕМЛЮ В СЕТЯХ С ИЗОЛИРОВАННОЙ НЕЙТРАЛЬЮ

Д. Б. Утегулова

**Павлодарский государственный университет
им. С. Торайгырова**

Осы жумыста оқишуланган бейтараптама тораптарындағы бірфазаалық тоқтың жерге түйықталу және оқишулану параметрлерін анықтау әдістері қарастырылған. Тоца қосудың қосымша өлііемі мен залалсыздандыру реттілігі зерттелінеді.

Разработаны методы определения параметров изоляции и тока однофазного замыкания на землю и его емкостной и активной составляющих в сетях с изолированной нейтралью напряжением до и выше 1000 В на основе подключения дополнительной емкостной проводимости между одной из фаз электрической сети и землей, и измерения величины модуля напряжения этой фазы относительно земли, измерения величины линейного напряжения и напряжения одной из фаз относительно земли, где подключена дополнительная проводимость.

The methods of definition of parameters of isolation and current of single-phase short circuit on ground both his (its) capacitor and active making in networks with isolated нейтралью by a pressure (voltage) up to and above 1000 V In are developed on the basis of connection of additional capacitor conductivity between one of phases of an electrical network both ground, and measurement of size of the module of a pressure (voltage) of this phase concerning ground, measurement of size of a linear pressure (voltage) and pressure (voltage) of one of phases concerning ground, where the additional conductivity is connected.

Разработаны новые методы определения параметров изоляции, тока однофазного замыкания на землю и его емкостной и активной составляющих в сетях с изолированной нейтралью напряжением до и выше

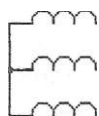
1 000 В на основе подключения дополнительной емкостной проводимости между одной из фаз электрической сети и землей, и измерения величин линейного напряжения и напряжения одной из фаз относительно земли, где

не подключена дополнительная емкостная проводимость.

Разработанные методы поясняются схемой (рисунок 1) принципиальной электрической содержащей: трехфазную электрическую сеть с фазами А, В и С; вольтметр PV1, измеряющий величину линейного напряжения U_{AB} между фазами А и В электрической сети; вольтметр PV2, измеряющий величину напряжения фазы А относительно земли U_A , при подключении между ней и землей дополнительной емкостной проводимости; вольтметр PV3, измеряющий величину модуля напряжения фазы В относительно земли U_B ; коммутирующий аппарат QF, подключающий дополнительную емкостную проводимость между фазой А электрической сети и землей; дополнительная емкостная про-

водимость B_0 ; емкостные проводимости изоляции сети B_A, B_B, B_C ; активные проводимости изоляции сети G_A, G_B, G_C .

Для определения параметров изоляции и тока однофазного замыкания на землю, а также его емкостной и активной составляющих в сетях с изолированной нейтралью коммутирующим аппаратом QF подключается дополнительная емкостная проводимость B_0 между фазой А электрической сети и землей. При подключенной дополнительной емкостной проводимости B_0 между фазой А электрической сети и землей, вольтметром PV1 измеряется величина линейного напряжения между фазами А и В, вольтметрами PV2, PV3 измеряются величины напряжений фаз А и В относительно земли.



(PV1r

QF

ГЧ¹А

Рисунок 1. Схема принципиальная электрическая методов определения параметров изоляции, тока однофазного замыкания на землю и его емкостной и активной составляющих в сетях с изолированной нейтралью

После регистрации величин модулей U_{λ} - линейного напряжения между фазами А и В электрической сети, напряжений U_A и U_B - фаз А и В электрической сети, напряжений U_A и U_B - фаз А и В относительно земли производится коммутирующим аппаратом QF отключение дополнительной емкостной проводимости B_0 .

По полученным данным измерений величины модуля U_{λ} - линейного напряжения между фазами А и В электрической сети и величин модулей U_A и U_B напряжений фаз А и В относительно земли, а также с учетом величины дополнительной емкостной проводимости B_0 , которая подключается между фазой А и землей, определяются параметры изоляции и ток однофазного замыкания на землю с его емкостной и активной составляющими по математическим формулам:

- полная проводимость изоляции сети

$$Y = \frac{\sqrt{3} \cdot U_A - B_0}{U^2 + 2U^2 - U^2} \quad (1)$$

- емкостная проводимость изоляции сети

$$B = \frac{U_A^2 - 2U^2 - U_B^2}{U^2 + 2U^2 - U^2} \quad (2)$$

- емкость фаз сети относительно земли

$$C = \frac{U_A^2 - 2U^2 - U_B^2}{U^2 + 2U^2 - U^2}$$

$$C = \frac{U_A^2 - 2U^2 - U_B^2}{U^2 + 2U^2 - U^2}$$

где C_0 - дополнительная емкость, которая вводится между фазой А электрической сети и землей;
 I_{ϕ} - ток однофазного замыкания на землю

$$L = \frac{B \cdot U \cdot M \cdot a \cdot A}{V \cdot U \cdot T \cdot U \cdot T} \quad (4)$$

- емкостной ток однофазного замыкания на землю

$$I_{\phi} = \frac{U^2 - 2U^2 - U_B^2}{\sqrt{3} \cdot (U_A + 2U_B - U^2)} \quad (5)$$

Активная проводимость изоляции и активный ток однофазного замыкания на землю определяются как геометрические разности полных и емкостных составляющих искомых величин.

Разработанные методы определения параметров изоляции и тока однофазного замыкания на землю в сетях с изолированной нейтралью не требуют изготовления какого-либо макетного образца, так как коммутирующий аппарат, дополнительная емкостная проводимость и измерительные приборы имеются в службе энергохозяйства. Внедрение методов позволит повысить уровень электробезопасности при эксплуатации электроустановок и надежность электроснабжения электроприемников предприятия.

Проведем анализ погрешности разработанного метода определения тока однофазного замыкания на землю с целью определения ее

точности в зависимости от значений изменений величин модулей измеряемых напряжений при подключении дополнительной емкостной проводимости между одной из фаз электрической сети и землей.

Анализ погрешности производим с применением основных по-

ложений математического анализа теории ошибок, теоретических основ электротехники [1,2].

Относительная среднеквадратичная погрешность метода определения тока однофазного замыкания на землю определяется из выражения:

$$\Delta I_0 = \frac{1}{I} \sqrt{\left(\frac{\partial I}{\partial U_A} \Delta U_A \right)^2 + \left(\frac{\partial I}{\partial U_B} \Delta U_B \right)^2 + \left(\frac{\partial I}{\partial b_0} \Delta b_0 \right)^2} \quad (6)$$

где $\frac{\partial I}{\partial U_A}$, $\frac{\partial I}{\partial U_B}$, $\frac{\partial I}{\partial b_0}$ - частные производные функции

$$I_0 = f(U_A; U_B; b_0).$$

Здесь ΔU_A , ΔU_B , Δb_0 , - абсолютные погрешности прямых измерений величин U_A , U_B , b_0 , которые определяются следующими выражениями:

$$\Delta U_A = U_A \cdot \Delta U_A, \quad \Delta U_B = U_B \cdot \Delta U_B, \quad \Delta b_0 = b_0 \cdot \Delta b_0 \quad (7)$$

Для определения погрешности измерительных приборов принимаем, что $\Delta U_A = \Delta U_B = \Delta b_0 = \Delta U$; $\Delta U_A = \Delta U_B = \Delta U$;

где ΔU , - относительная погрешность измерительных цепей напряжений;

Δb_0 , - относительная погрешность измерительного прибора, измеряющего величину вводимой дополнительной емкостной проводимости.

Определяем частные производные функции $I_0 = f(U_A; U_B; b_0)$ по переменным U_A , U_B , b_0

$$\frac{\partial I_0}{\partial U_A} = \frac{I_0}{U_A} \left(\frac{\Delta U_A}{U_A} + \frac{\Delta U_B}{U_B} + \frac{\Delta b_0}{b_0} \right) \quad (8)$$

$$\frac{\partial I_0}{\partial U_B} = \frac{I_0}{U_B} \left(\frac{\Delta U_A}{U_A} + \frac{\Delta U_B}{U_B} + \frac{\Delta b_0}{b_0} \right)$$

Для определения среднеквадратичной относительной погрешности

решаем совместно уравнения (4) и (6), подставив в последнее значения частных производных (8) и значения абсолютных погрешностей (7), при этом, полагая $\Delta I_{\text{д}} = \Delta I_{\text{в}} = \Delta I$, в результате получим

$$\frac{\Delta I_{\text{д}}}{I} = \frac{\sqrt{(U_{\text{г}} + 2U_{\text{д}} - U_{\text{л}})^2 + 4U_{\text{л}}^2 + (U_{\text{а}} + 2U_{\text{л}})^2 + (2U_{\text{в}} - U^2)^2}}{U_{\text{г}} + 2U^2 - U^2} \quad (9)$$

Полученное уравнение (9) выразим в относительных единицах

$$\frac{\Delta I_{\text{д}}}{I} = \frac{\sqrt{(K_{\text{г}} + 2\sqrt{I_{\text{г}}} - I)^2 + 4U_{\text{л}}^2 + (2U_{\text{а}} - I)^2 + (2U_{\text{в}} - I)^2}}{U^* + 2U^2 - I} \quad (10)$$

где $U_{\text{а}}^*$ $U_{\text{в}}^*$ $U_{\text{л}}$

На основе полученного результата случайной относительной среднеквадратичной погрешности определения тока однофазного замыкания на землю строим оценку искажения ее погрешности

$$C_{\Delta I_{\text{д}}}$$

Уравнение функции $F(U_{\text{а}}, U_{\text{в}})$ изображено на рисунке 2.

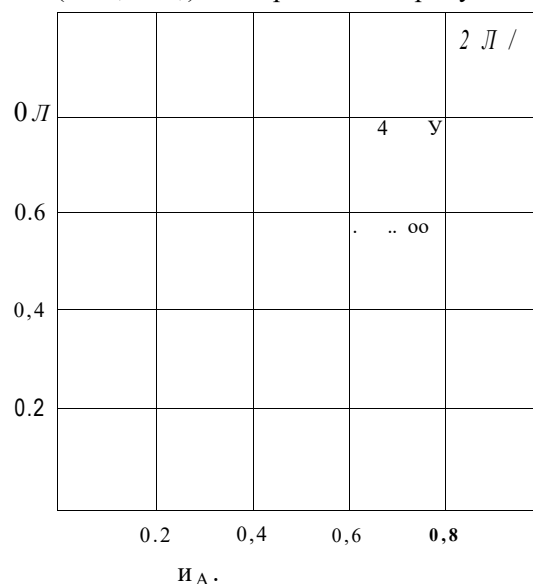


Рисунок 2. Погрешность $\Delta I_{\text{д}} = F(U_{\text{а}}; U_{\text{в}}^*)$ определения тока однофазного замыкания на землю в сетях с изолированной нейтралью

Функция $F(U_{A<}; и_{в.})$ определена в плоской области переменных $U_{A.}, U_{B<}$ изображено на рисунке 2.

Область S ограничена прямыми $U_{A^*} = 0; и_{л,} = U_{B,}; U_{B.} = 1$ и эллипсом $U_{A<} + 2U_{B,} = 1$.

$F(U_{A,}, U_{B,}) \rightarrow$ при стремлении точки $M(U_{A,}, U_{B,})$ к эллипсу. Наименьшее значение функции $F(U_{A,}, U_{B,})$ равно 2,1 и достигается в точке $M(1;1)$.

Анализ погрешности показал, что при использовании измерительных приборов классом точности 1,0 минимальные погрешности находятся в области кривых зависимости $\xi =$ - (3, 4, 5 и 10), а при использовании измерительных приборов, например, классом точности

0,5 точность определения искомых величин в данном случае увеличится в два раза.

Графоаналитические исследования относительной среднеквадратичной погрешности показали, что использование разработанных методов обеспечивает точность, простоту и безопасность при производстве измерений. Кроме того, не требуется создания специальных измерительных устройств, так как измерительные приборы установлены в общепромышленном исполнении, а для введения дополнительной проводимости используется резервная ячейка с выключателем нагрузки комплектно-распределительного устройства.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зайдель А.Н. Элементарные оценки ошибок измерений. - 3-е изд., испр. и доп. - Л., 1968. - 97 с.

2. Круг К.А. Основы электротехники. - В 2-х томах. - Т. 2.: Учебник для втузов. - 6-е изд., перераб. - М. -Л.: Госэнергоиздат, 1946. - 634 с.

УДК 539.3:534.1

ишм,

ПРИМЕНЕНИЕ МАТРИЧНОЙ ФОРМЫ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ К РАСЧЕТУ ГИБКИХ ПОЛОГИХ ОРТОТРОПНЫХ ОБОЛОЧЕК НА ПРОЧНОСТЬ, УСТОЙЧИВОСТЬ И ДИНАМИКУ

С.К. Ельмуратов

*Павлодарский государственный университет
им.С.Торайгырова*

Мақалада біртуғас матрицалық алгоритмнің негізінде иілгіш көлбеу қабықтардың беріктілігін, тұрақтылығын және динамикасын есептеу әдісі берілген.

В работе изложен метод расчета гибких пологих оболочек на прочность, устойчивость и динамику на основе единого матричного алгоритма.

The article deals with the calculation method of resistance, stability and dynamics of flexible casings on the basis of common matrix algorithm.

Исследуются гибкие ортотропные оболочки и пластики переменной толщины при продольно-поперечном нагружении. Основные соотношения получены на основе принципа Остроградского-Гамильтона:

$$\int (\dot{X} - (\dot{J} + S\dot{w}') dt = 0 \quad (1)$$

где X - кинетическая энергия элементарного элемента оболочки;

J - потенциальная энергия деформации; W - элементарная работа внешних сил.

Подставляя в (1) вариации этих

величин и используя гипотезы Кирхгофа-Лява, получаем следующие дифференциальные уравнения движения и совместности деформации для гибкой ортотропной оболочки переменной толщины [1]

$$+ 6/2 (*) \cdot /, (x) \cdot (\text{ЦЖ, и} + rxw_m) = L\{0, W\} + *, \Phi_{.22} + \kappa_2 \Phi_{.n} + q - \wedge f(x) w_n ; \quad (2)$$

$$\wedge (c_1 \Phi_{.т1} + 2C_3 \Phi_{.1122} + C_2 \Phi_{.2222}) - \wedge \|(2C_1 \Phi_{.ш} + C_3 \Phi_{;122}) + C \frac{2f(x)}{W^3} \quad \frac{2f_n^2(x)}{W^2} \quad (3)$$

Здесь

$$L\{W, W\} = \{w_n\}^2 \quad (4)$$

ϕ - функция напряжений; $f(x)$ - функция, учитывающая изменение толщины оболочки; h_c - толщина оболочки, принятая за постоянную; κ_1, κ_2 - кривизны оболочки в направлении осей x и y соответственно, Черточки над цилиндрическими жесткостями означают, что они выражены через h_c и C_1, C_2, C_3 - коэффициенты, зависящие от упругих характеристик материала. Закон изменения толщины $f(x)$ задается по квадратной параболе, в частном случае предполагается линейное изменение толщины или по-

стоянное ее значение.

Необходимо отметить, что полученные уравнения позволяют решать широкий класс задач, таких, как устойчивость, собственные колебания, вынужденные колебания, изгиб. Причем, нагрузка может быть как поперечная, так и в срединной плоскости пластин и оболочек. Схема нагруженности в плане приведена на рис. 1

Для решения задач применен метод конечных разностей. Уравнения (2) и (3) в конечных разностях имеют вид [2]

$$\langle P \rangle + \langle P_2 \rangle + \langle P_3 \rangle + \langle P_4 \rangle + \langle P_5 \rangle + \langle P_6 \rangle + \langle P_7 \rangle + \langle P_8 \rangle + \langle P_9 \rangle + \langle P_{10} \rangle + \langle P_{11} \rangle + \langle P_{12} \rangle = \dots \quad (5)$$

$$\langle P \rangle + \langle P_2 \rangle + \langle P_3 \rangle + \langle P_4 \rangle + \langle P_5 \rangle + \langle P_6 \rangle + \langle P_7 \rangle + \langle P_8 \rangle + \langle P_9 \rangle + \langle P_{10} \rangle + \langle P_{11} \rangle + \langle P_{12} \rangle = \dots \quad (6)$$

Коэффициенты $\langle P \rangle$ определяют характер и направление внешних на-

грузок и параметры оболочки. В уравнениях (5) и (6) введены безразмерные обозначения.

$$\frac{P a}{gD_3} - \frac{2}{A} - \frac{AY}{gD_3} \quad (7)$$

$$\kappa_1 = La_1, \quad \kappa_2 = \frac{2}{a} \text{ и } K = \frac{Y}{D \cdot S^3} \cdot K^a$$

Здесь S - шаг сетки, a - размер оболочки в направлении оси x :

Покрываем поверхность оболочки регулярной сеткой. Системы конечно разностных уравнений с учетом граничных условий запишем в матричной форме:

$$D\theta = P(W) - C W \quad (8)$$

$$(A-KB)W = R + C\theta \quad (9),$$

где w и ϕ - векторы прогибов и функций напряжений, составленные из значений W и ϕ в узлах сетки; $p(w)$ - вектор, соответствующий оператору $L^{\wedge}V^{\wedge}W$ и составленный из значений W в узлах на контуре и внутренней области оболочки; C - квадратная матрица, составленная из значений κ_1 и κ_2 в узлах сетки; I и Γ - квадратные матрицы, составленные из коэффициентов при значениях W и ϕ с учетом граничных условий; B - квадратная матрица, определяющая тип задачи (устойчивость или колебания); R - вектор, составленный из значений возмущающей нагрузки, приложенной в произвольных узлах сеточной области пластины или оболочки. Более подробно структура матриц изложена в работе [2].

Система матричных уравнений (8) и (9) решается на первом этапе при $p(w)=0$.

Из уравнений (8) имеем:

$$\theta = D^{-1}(-CW) \quad (10)$$

В результате находим значения функций ϕ во всех узлах сетки, Подставив ϕ в (9) получим:

$$\{A^* - KB\}W = R \quad (11)$$

где

$$A^* = A + CD^{-1}C \quad (12)$$

Из уравнения (11) находим значения прогибов W_0 .

На втором этапе из выражения (8) находим ϕ , с учетом W_0 , затем из (9) значения W_x с учетом Φ , т.е. решается нелинейная задача. Второй этап зацикливается. Процесс продолжается до тех пор, пока не будет выполняться условие

$$\begin{aligned} |W'' - W''^j| < \epsilon \\ |\Phi'' - \Phi''^j| < e \end{aligned} \quad (13)$$

где s - малое, наперед заданное число (точность решения).

Если на контуре оболочки приложены силы, то значение Φ_0 определяется из условия:

$$\Phi = D^{-1}P(q_0) \quad (14)$$

где $P(q_0)$ - вектор, порожденный контурными силами.

В зависимости от наличия или отсутствия возмущающей поперечной нагрузки R будет решаться соответственно система неоднородных (11) или однородных уравнений

$$\{ A' - KB \} W = 0 \quad (15)$$

Некоторые частные случаи матричных уравнений (8) и (9):

1. Если $\kappa_l = \kappa_7 = 0$, то матрица C будет нулевой, в результате имеем матричное уравнение для гибких ортотропных пластин переменной толщины

$$D\theta = P(W) \quad (16)$$

$$(A-KB)W = R \quad (17)$$

2. Если в уравнениях (16) и (17) принять $R = 0 > \theta = W$, то получим уравнения собственных колебаний гибких пластин

$$D\theta = P(W) \quad (18)$$

$$[A-KB]W = 0 \quad (19)$$

3. Если на контуре пластины действуют внешние силы, то при

$R = 0, \theta = 0$, получим уравнения напряженно-деформированного состояния гибкой пластины

$$O\Phi = P(w) + P(q_0) \quad (20)$$

$$(A-KB)W = 0 \quad (21)$$

Для формирования всех матриц (A, B, C и D) была разработана программа на ЭВМ. При формировании той или иной матрицы в ЭВМ вводились исходные данные и в зависимости от того, какая матрица формируется, перед обращением к подпрограмме вычисляются соответствующие коэффициенты ($p^i, c_{p_1}, \dots, c_{p_n}$). Аналогичная подпрограмма разработана и для формирования векторов. В качестве исходных данных вводятся: упругие характеристики материала; отношение сторон оболочки; отношение конечных толщин; коэффициенты кривизны оболочки и изменения толщины; главные кривизны оболочки; параметры задач устойчивости и колебаний; граничные условия; параметры внешних нагрузок; число делений сеточной области и другие величины. На основе составленной программы были решены различные задачи гибких пластин и оболочек.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ельмуратов С.К. Устойчивость и колебания пластин и полых оболочек, прямоугольных в плане. М.: Деп. в ВИНТИ № 2119-ДЕП, 1979 г.

2. Ельмуратов С.К. Численные методы расчета оболочек на ЭВМ.

Караганда, КарПТИ, 1986.

3. Ельмуратов С.К., Ельмуратова А.Ф. Оптимальное проектирование тонкостенных конструкций. - Материалы республиканской конференции «Наука и образование в стратегии регионального развития», Павлодар, ПГУ, 1999 г.

УДК 666.97.015

СОВРЕМЕННЫЙ ОПЫТ И ПЕРСПЕКТИВЫ УТИЛИЗАЦИИ ОТВАЛЬНЫХ ШЛАНОВ ГЛИНОЗЁМНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Ш.К. Торпищев, М.К. Бейсембаев, Ф.Ш. Торпищев
Павлодарский государственный университет
им.С. Торайгырова

Мақалада глинозем өндірісінің нәтижесінде пайда болатын қолдық (қызыл) ішамдарды қайтадан іске жаратудың отандық және иіетелдік тәжірибесі сөз етілді. Атап айтқанда, қызыл ішамдарды осы заманғы технологиясы оңайланған, қуны арзандатылған және физика-техникалық қасиеттерінің жоғары сапалылығымен сипатталатын бетондар мен құрылыстық ертінділердің жаңа легін жасауға пайдалану мүмкіндіктері қарастырылған.

В статье рассматриваются отечественный и зарубежный опыт утилизации отвальных («красных») шламов-отходов производства глинозема, возможность применения их в бетонах и строительных растворах нового поколения, отличающихся высокими физико-техническими и эксплуатационными характеристиками, упрощенной технологией производства и относительной дешевизной.

The article deals with foreign and home experience of red slimes utilization of alumina production, possibility of application in the new generation concrete and building mortars, determined by high physico-technical and exploiting characteristics, simplified production technology and relative cheapness.

Введение наполнителей в цементы можно рассматривать как необходимое условие снижения материал- и энергоемкости бетонов и улучшения их физико-технических свойств. При этом особенно перспективно использование в качестве наполнителей побочных продуктов и отходов различных отраслей промышленности, что позволяет решать задачи утилизации отходов и охраны окружающей

шей среды. Резко повысить эффективность применения промышленных отходов в таком качестве можно при наличии у последних химической активности или способности к гидратационному твердению.

Одним из наиболее перспективных видов таких отходов (по комплексу потенциальных строительно-технических свойств и количеству, накопленному в отвалах) являются шламы глиноземного производства: нефелиновые и бокситовые. Известные ныне способы производства глинозема можно разделить на 3 группы: электротермические, кислотные и щелочные. Электротермические способы заключаются в плавке бокситовой руды с углем в электропечах с целью восстановления примесей и получения плавленного глинозема. При кислотном способе сырье обрабатывается раствором кислоты или же сернистым газом; в результате образуется растворимая соль алюминия, из которой затем выделяется глинозем. Следует отметить, что ни электротермические, ни кислотные способы не получили распространения. Наиболее широко применяются щелочные способы производства, заключающиеся в обработке руды растворами щелочей для превращения глинозема в растворимый алюминат натрия. Фильтрованием

последний отделяется от остатка, носящего название «шлам». Из раствора алюмината осаждают и отфильтровывают гидрат окиси алюминия. Щелочной фильтрат в зависимости от исходного сырья или возвращается обратно в процесс при использовании бокситов, или же частично выпаривается для извлечения из него щелочей (в случае применения нефелинов). Полученный гидрат окиси алюминия прокаливается с целью превращения его в окись, пригодную для производства металлического алюминия. Превратить содержащийся в сырье глинозем в алюминат натрия можно различными способами. Наибольшее распространение за рубежом получил гидрохимический способ Байера, при котором первоначальную обработку боксита осуществляют непосредственно раствором едкой щелочи («мокрый» способ). По «сухому» способу производства руду с солями щелочных и щелочноземельных металлов спекают во вращающихся печах (способ Мюллера - Яковина) или плавят в электропечах. Затем алюминат выщелачивают, а полученный водный раствор подвергают разложению. «Сухой» способ или способ «спекания» обладает большей универсальностью и позволяет получить глинозем из самого различного сырья, в том числе и из высоко-

кремнистого.

Исследование нефелиновых шламов, получающихся при извлечении глинозема из нефелинов методом спекания, было начато в 30-е годы в лаборатории вяжущих веществ Ленинградского отделения ВИСМ и получил дальнейшее развитие в работах Гипроцемента, НИИ-Цемент, ВАМИ, ЛТИ им. Ленсовета, ЛИСИ и др. На сегодняшний день они достаточно хорошо изучены, накоплен значительный экспериментальный материал и практический опыт утилизации нефелиновых шламов.

Исследование бокситовых шламов (БШ), образующихся при извлечении глинозема из бокситов методом спекания, осуществлялось в тот же период, что и нефелиновых. Бокситовыми шламами как сырьем для производства портландцемента и местных вяжущих веществ занимались П.И.Боженков, П.П.Будников, Р.В.Бейшер, А.Д.Ершова, В.Н.Ковалерова, В.Н.Кинд, Ю.М.Слободянюк, В.С.Корнеев, Н.С.Шморгуненко, Б.П.Паримбетов, А.А.Пашченко, Е.А.Старчевская и др.[5,6,7,10]

Работами по изучению тихвинских БШ установлено, что использование их для производства портландцемента не очень эффективно, т.к. требуется такое количество известняка и глины, которое снижает содержание шлама в составе цементной сырьевой смеси до 15-20%

и делает его, таким образом, не основным, а добавочным сырьевым компонентом [10].

Значительная часть исследований сводилась к получению смешанного шламового цемента [16]; например, на базе тихвинских БШ был получен смешанный цемент состава: 70% шлама + 17% портландцемента + 13% гипса. Предел прочности при сжатии образцов из бокситового цемента в возрасте 28 сут. составляет 20,0 - 30,0 МПа и при растяжении 1,8 - 2,4 МПа (раствор состава 1:3 на Вольском песке). При исследовании БШ Волховского алюминиевого завода от переработки различных бокситов установлен следующий средний оптимальный состав бокситового цемента: 70-80% шлама + 30-20% портландцемента + 3% гипса. Активность такого шламового цемента составляет 12,0-14,0 МПа. Предполагалось, что твердение цемента из БШ происходит, главным образом, за счет активизации двухкальциевого силиката, наличие которого было установлено в составе бокситового шлама, но в меньшем количестве, чем в нефелиновом.

На основании исследований БШ, полученного в разное время, установлено, что свойства его непостоянны вследствие изменений качества сырья и технологических условий получения глинозема. Однако можно однозначно сказать, что

для БШ, получаемого при переработке бокситов методом «спекания», характерна достаточно высокая гидравлическая активность. Недостатком его, по мнению многих исследователей, является повышенное количество щелочей и вследствие этого большие «высолы» при твердении [6,7,10]. Способность шлама к гидратационному твердению послужила стимулом для разработки на его основе различных вяжущих систем. В настоящее время накоплен определенный экспериментальный материал по использованию бокситовых шламов как самостоятельных вяжущих, в совокупности с различными активизаторами твердения [14,15] или в составе смешанных вяжущих в качестве гидравлически активного наполнителя [1,2]. Имеется практический опыт применения «спекательных» шламов. Они используются в качестве вяжущего для закладки горных выработок [12], в дорожном строительстве в составе бетонов оснований и нижних слоев дорожных одежд [13], в качестве корректирующей добавки к цементной шихте [6], для изготовления изделий автоклавного твердения [10], в качестве связующего для производства изделий с древесным наполнителем [15] и т.д.

Главной отличительной особенностью БШ, образующихся

при переработке бокситов способом Байера, является высокое содержание соединений железа в их составе и значительно более высокая по сравнению со «спекательными» дисперсность (фракций размером менее 5 мкм ~ 55-75%).

Эти обстоятельства в основном и определили направление исследований по утилизации указанных шламов. Их применяют при окисковывании железных руд и концентратов, для очистки промышленных и сточных вод, в качестве плавней или железисто-алюминатной корректирующей добавки к сырьевым смесям портландцементного клинкера. Байеровский бокситовый шлам применяют в качестве добавки к керамическим массам, при изготовлении строительного кирпича, в производстве легких заполнителей, труб, черепицы, как тонкодисперсный наполнитель в композиционных материалах. По данным [9], шлам может использоваться для производства огнеупоров, цветных глазурей, легких фасонных изделий, красок. Исследования показывают, что байеровский шлам можно применять для десульфуризации газов, как катализатор при гидрогенезации углей, в качестве микронаполнителя для асфальтобетонов и т.д.

«Байеровские» шламы достаточно широко применяются за рубежом: во Франции, Германии, Австралии, Индии, Венгрии. Однако вяжущие свойства этих шламов слабы

и потенциальная возможность их проявления относительно невелика. Напротив, «спекательные» БШ, к которым относится и шлак Павлодарского алюминиевого завода (ПАЗа), всегда рассматривались как материал с высокой гидравлической активностью. Поэтому многочисленные работы по исследованию «спекательных» шламов носят более или менее выраженный прикладной характер, т.е. направлены на реализацию собственно вяжущих свойств шлама, обусловленных его химико-минералогическим составом. В разработках большинства исследователей муссируется идея о возможности получения достаточно плотного и прочного цементного камня за счет гидратации $/\text{?}-\text{C}_2\text{S}$ основной фазы шлама. Имеются отдельные работы, касающиеся не только физико-механических характеристик шламосодержащих материалов, но и их долговечности, стойкости к действию некоторых видов агрессивных сред, влияния технологических факторов и т.д. Таким образом, следует признать, что некоторая тенденциозность в подходах к БШ сугубо как к материалу способному к гидратационному твердению, без учета его возможной структурирующей роли в составе бетона или раствора, без учета определенных особенностей фазового состава, микроструктуры БШ и влияния их на свойства синтезированных композитов, отсутствие ком-

плексного подхода в оценке свойств как самого шлама, так и материалов на его основе, некоторым образом сказались на общей направленности проводимых исследований. Например, недостаточно изучены физико-химические аспекты твердения вяжущих и бетонов, наполненных добавкой БШ, практически не рассматривалось влияние БШ на теплофизические характеристики материалов, на пассивирующие свойства бетонов по отношению к стальной арматуре. Хотя здесь есть на что обратить внимание. Ведь известно, что бокситовый шлак содержит остаточные соединения, образовавшиеся в процессе производства, которые могут и, по всей вероятности, должны так или иначе влиять на свойства, в том числе и на гидравлическую активность и потенциальные гидратационные возможности БШ. Кроме того, наличие щелочей в бетоне - это всегда изменение физико-химической картины гидратации и твердения вяжущего, повышение доли гелевидной фазы в цементном камне, а следовательно, обусловленные этим повышенная сорбция материала, склонность к карбонизации, пониженная проницаемость и т.д.

Требуют изучения вопросы технологии смешанных вяжущих на основе шлама и бетонов на них, вопросы поведения бетонов под воздействием длительно действующих нагрузок, вопросы влияния

№ 2, 2001 г.

природы, количества и состояния заполнителей на свойства бетонов, вопросы долговечности наполненных БШ бетонов.

Таким образом, можно констатировать, что имеющиеся на сегодняшний день разработки смешанного вяжущего или бетонов, где БШ применяют в качестве наполнителя как в естественном, так и тонкомолотом состоянии, не связаны общим направлением, недостаточно систе-

магезированы. згспй противоречивы Б.;;
настоятельнее -: : ' : лив г»
ведения целенаг.гп-t--: шшт~
лексных исследований,;; _ -
шлама, так и матернілгз зі sn
основе. В экономическом г^ззтг
утилизация БШ наиболее пгрсгг? -
тивна в легких бетонах для сте:-:-
вого ограждения зданий - одном
из наиболее массовых по объему
видов бетона, выпускаемого в на-
стоящее время.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.С. 962247 СССР, МЮР С 04 В 7/32 Битумно-минеральная смесь.
2. А.С. 587118 СССР, МЮР С 04 В 7/32 Способ получения цементного клинкера.
3. Баррер Р., Уайт Е. Синтетический кристаллический алюминат. - М. 1965 г.
4. Бейшер Р. В., Тараканова А. А. К оценке вяжущих свойств бокситового шлама. - Материалы XXVII научной конференции. МИСИ.-М., 1969 г.
5. Бейшер Р. В. Технологические особенности получения смешанного вяжущего на основе бокситового шлама. - МИСИ-1977. т2, с-30-35.
6. Бураев М., Чагай В. И., Кошелев В. А. Влияние бокситового шлама на прочность и долговечность бетонов, используемых в алюминиевой промышленности. // Комплексного использования минерального сырья. - Т. 10, с - 66 - 69.
7. Журавлева В. Т. Химия вяжущих веществ.-Киев: Госхимиздат, 1952.
8. Ларионова З. М., Никитина Л. В., Гарашин В. П. Фазовый состав, микроструктура и прочность цементного камня и бетона.-М.: Стройиздат, 1977.
9. Лукьянова О. М., Уварова И. Ю. К использованию взаимодействия высокоосновных силикатов кальция и высококремниевых силикатов. // ДАН СССР-1967г.-Т. 172. -С.3.
10. Паримбетов Б. П., Требухина Н. А. Бокситовый шлам - сырье для производства автоклавных бетонов.-М.: Стройиздат-1980.
- И. Патент 1469953, Франция, 1961.
12. Патент 3280672, Япония, 1961.
13. Патент 4589274, Япония, 1972.
14. Патент 536710, Япония, 1983.
15. Патент 5743075, Япония, 1985.
16. Пашенко А. А., Мясник Е. А., Старчевская Е. А. Использование красного шлама в качестве сырья для производства цемента// Цемент- 1977-w10.

ИНФОРМАЦИЯ

НАШИ АВТОРЫ

1. Алиферов Александр Иванович - профессор кафедры автоматизированных электротехнологических установок Новосибирского государственного технического университета, д-р техн. наук.
2. Арынгазин Кағіар Шакимович - доцент кафедры промышленного и гражданского строительства ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук.
3. Аяпбергенов Коялы Аяпбергенович - профессор кафедры органической химии и полимеров КарГУ им. Е.А. Букетова, д-р хим. наук.
4. Алдабергенов Майлыби Капанович - директор ОНП по химическим проблемам КарГУ им. Е.А. Букетова.
5. Акубаева Макежан Аубакировна - вед. инженер Института фитохимии МОН РК.
6. Бектуров Есен Абикенович - член-корр НАН РК, Институт химических наук им. А.Б. Бектурова МОН РК.
7. Бектенова Г.А. - Институт химических наук им. А.Б. Бектурова МОН РК.
8. Бороденко Виталий Анатольевич - доцент кафедры электрических станций и автоматизация систем ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук.
9. Бейсембаев Мурат Кулханович - зам директора Института дистанционного обучения, канд. техн. наук, доцент.
10. Волгин Михаил Евграфович - ст. преподаватель кафедры электроснабжения промышленных предприятий ПГУ им. С. Торайгырова.
11. Гирнис Светлана Римон-тасовна - ст. преподаватель кафедры промышленного и гражданского строительства ПГУ им. С. Торайгырова.
12. Еркасов Рахметулла Шарипиденович. - первый проректор Кокшетауского государственного университета им. Ш. Уалиханова, д-р хим. наук, профессор.
13. Ельмуратов Сембай Кайкенович - зав. кафедрой промышленного и гражданского строительства ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук, доцент.
14. Ефремова Светлана Владимировна - ст. преподаватель химического факультета КазНУ им. аль-Фараби, канд. хим. наук.

15. Ефремов С.А. - Центр физико-химических методов анализа КазНУ им. аль-Фараби.
16. Жармагамбетова Алима Кайникеевна - зам директора Института органического катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского, д-р техн. наук, профессор.
17. Жапаргазинова Кульшат Хайруллаевна - доцент кафедры химических технологий ПГУ им. С. Торайгырова, канд. хим. наук.
18. Зайцева Наталья Михайловна - доцент кафедры компьютерные системы ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук.
19. Иманбеков Кылыш Иманбекович - доцент кафедры неорганической химии КазНУ им. Аль-Фараби, канд. хим. наук.
20. Кислов Александр Петрович - директор Института энергетики и автоматизации ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук доцент.
21. Касенов Булат Кунурович - зам директора по научной работе Института фитохимии МОН РК, д-р техн. наук, профессор.
22. Касенова Шуга Булатовна - с. н. с. Института фитохимии МОН РК, канд. хим. наук.
23. Лебедева О.Е. - Центр физико-химических методов анализа КазНУ им. аль-Фараби.
24. Леньков Юрий Аркадьевич - зав. кафедрой электрические станции и автоматизация систем ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук, доцент.
25. Муратбекова Айгуль Акижановна - аспирант кафедры органической химии и полимеров КарГУ им. Е.А. Букетова.
26. Мухамеджанова Ф.М. - Институт органического катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского МОН РК.
27. Масалимов Абай Сабиржанович - проректор по научной работе КарГУ им. Е. А. Букетова. д-р техн. наук, профессор.
28. Мингалеева Альфия Фаридовна - аспирант химического факультета КарГУ им. Е.А. Букетова.
29. Мустафин Едиге Суиндинович - в.н.с. Института фитохимии МОН РК, канд. хим. наук
30. Мансуров Зульхаир Айтмухаметович - первый проректор КазНУ им. аль-Фараби, д-р хим. наук, профессор.
31. Мансурова Раушан Магзумовна - КазНУ им. Аль-Фараби, д-р хим. наук.
32. Матаев Мухаметкали Мусагалиевич - зав. кафедрой неорганической химии КарГУ им. Е.А. Букетова, канд. хим. наук.
33. Новицкая Надежда Ана-

тольевна - начальник отдела информационно-технического обеспечения Павлодарского представительства государственного пенсионного выплатного центра.

34. Овчаренко Николай Ильич - профессор Московского энергетического института, д-р техн. наук.

35. Оскембеков Ильяс Маликович - н. с. Института фитохимии МОН РК.

36. Онгарбаева Л. - Центр физико-химических методов анализа КазНУ им. Аль-Фараби.

37. Полатбекова Гульшат Пархатбековна - доцент кафедры физической химии КазНУ им. аль-Фараби, канд. хим. наук.

38. Пивень Геннадий Георгиевич - ректор Карагандинского государственного технического университета, д-р техн. наук, профессор.

39. Падиарова И.П. - директор НИЦ ПМ МЭТ РК, канд. техн. наук, доцент.

40. Проскуряков Анатолий Федорович - зав. кафедрой технологии и оборудования машиностроения ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук, доцент.

41. Рындин Владимир Витальевич - доцент кафедры транспортного машиностроения ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн.

наук.

42. Сагинтаева Женисгуль Имангалиевна - аспирант КарГУ им. Е.А. Букетова.

43. Сулеев Досым Касымович - ректор Казахского национального технического университета им. К. Сатпаева, д-р техн. наук, профессор.

44. Серов Игорь Анатольевич - аспирант кафедры компьютерные системы ПГУ им. С. Торайгырова.

45. Токтабаева Ф.М. - Институт органического катализа и электрохимии им Д.В.Сокольского МОН РК.

46. Тажкенова Г.К. - Евразийский государственный университет им. Л. Н. Гумилева

47. Тайсереква Ж.А. - Центр физико-химических методов анализа КазНУ им. Аль-Фараби

48. Тусупбаев Самат Несипбаевич - магистрант химического факультета КазНУ им, аль-Фараби

49. Торпищев Шамиль Камильевич - доцент кафедры промышленного и гражданского строительства ПГУ им. С. Трайгырова, канд. техн. наук.

50. Торпищев Фарид Шамильевич - студент 1 курса Гуманитарного института ПГУ им. С. Торайгырова.

51. Утегулов Болатбек Бахитович - зав. кафедрой электроснабжения промышленных предприятий ПГУ им. С. Торайгырова, д-р техн. наук, профессор.

52. Утегулова Дана Болатбековна - аспирант кафедры электроснабжения промышленных предприятий ПГУ им. С. Торайгырова.

53. Хацевский Константин Владимирович - ст. преподаватель кафедры автоматизации технологических процессов и электропривода ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук.

54. Хацевская Татьяна Владимировна - аспирант кафедры автоматизации технологических процессов и электропривода ПГУ им. С. Торайгырова.

55. Чередниченко Владимир Семенович - зав. кафедрой автоматизированных электротехнологических установок Новосибирского государственного технического университета, д-р техн. наук, профессор.

56. Чередниченко Алексей Владимирович преподаватель кафедры автоматизированные электротехнологические установки Новосибирского государственного технического университета, канд. техн. наук.

57. Шагиева Роза Абдуллаевна - доцент кафедры компьютерные системы ПГУ им. С. Торайгырова, канд. техн. наук.

58. Шелудяков Ю.Л. - Институт органического катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского МОН РК.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

1. В журнал принимаются рукописи статей по всем научным направлениям в двух экземплярах, набранных на компьютере, напечатанных на одной стороне листа с полусторонним межстрочным интервалом, с полями 3 см со всех сторон листа и дискета со всеми материалами в текстовом редакторе "Word 7,0 ("97, 2000) для Windows".

ВНИМАНИЕ!!! РУКОПИСИ И ДИСКЕТЫ НЕ ВОЗВРАЩА-

ЮТСЯ!!!

2. Статья подписывается всеми авторами. Общий объем рукописи, включая аннотацию, литературу, таблицы и рисунки, не должен превышать 8-10 страниц.

3. Статья должна сопровождаться рецензией доктора или кандидата наук для авторов, не имеющих ученой степени.

4. Статьи должны быть оформлены в строгом соответствии со

следующими правилами:

- УДК по таблицам универсальной десятичной классификации;

- название статьи: кегль -14 пунктов, гарнитура - Times New Roman Суг (для русского, английского и немецкого языков), KZ Times New Roman (для казахского языка), заглавные, жирные, абзац центрованный;

ВНИМАНИЕ!!! Шрифты, упомянутые в данных правилах, можно взять в Редакционно-издательском отделе (А 118) или в Центре информационных технологий (А 120) ПГУ им. С. Торайгырова.

- инициалы и фамилия(-и) автора(-ов), полное название учреждения: кегль - 12 пунктов, гарнитура - Arial (для русского, английского и немецкого языков), KZ Arial (для казахского языка), абзац центрованный;

- аннотация на казахском, русском и английском языках: кегль -10 пунктов, гарнитура-Times New Roman (для русского, английского и немецкого языков), KZ Times New Roman (для казахского языка), курсив, отступ слева-справа - 1 см, одинарный межстрочный интервал;

- текст статьи: кегль -12 пунктов, гарнитура - Times New Roman (для русского, английского и немецкого языков), KZ Times New Roman

(для казахского языка), полуторный межстрочный интервал;

- список использованной литературы (ссылки и примечания в рукописи обозначаются сквозной нумерацией и заключаются в квадратные скобки). Список литературы должен быть оформлен в соответствии с ГОСТ 7.1-84.- например:

ЛИТЕРАТУРА

1. Автор. Название статьи // Название журнала. Год издания. Том (например, Т.26.) номер (например, № 3.) страница (например С. 34. или С. 15-24.)

2. Андреева С.А. Название книги. Место издания (например, М.:) Издательство (например, Наука,) год издания. Общее число страниц в книге (например, 239 с.) или конкретная страница (например, С. 67.)

3. Петров И.И. Название диссертации: дис. канд. биолог, наук. М.: Название института, год. Число страниц.

4. С.Christopoulos, The transmisson-Line Modelling (TML) Metod, Piscataway, NJ: IEEE Press, 1995.

На отдельной странице (в бумажном и электронном варианте) приводятся сведения об авторе:

- Ф.И.О. полностью, ученая

степень и ученое звание, место работы (для публикации в разделе «Наши авторы»);

- полные почтовые адреса, номера служебного и домашнего телефонов, E-mail (для связи редакции с авторами, не публикуются);

- название статьи и фамилия (-и) автора(-ов) на казахском, русском и английском языках (для «Содержания»),

4. Иллюстрации. Перечень рисунков и подрисуночные надписи к ним представляют отдельно и в общий текст статьи не включают. На обратной стороне каждого рисунка следует указать его номер, название рисунка, фамилию автора, название статьи. На дискете рисунки и иллюстрации в формате TIF или JPG с разрешением не менее 300 dpi (файлы с названием «Рис.1», «Рис. 2», «Рис. 3» и т.д.).

5. Математические формулы должны быть набраны как Microsoft Equation (каждая формула - один

объект). Нумеровать следует лишь те формулы, на которые имеются ссылки.

6. Автор просматривает и визирует гранки статьи и несет ответственность за содержание статьи.

7. Редакция не занимается литературной и стилистической обработкой статьи. Рукописи и дискеты не возвращаются. Статьи, оформленные с нарушением требований, к публикации не принимаются и возвращаются авторам.

8. Рукопись и дискету с материалами следует направлять по адресу:

637034, Республика Казахстан, г. Павлодар, ул. Ломова, 64,
Павлодарский государственный университет им. С. Торайгырова, редакция журнала «Наука и техника Казахстана».

Тел. (8 3182) 45-38-60

45-11-43

факс: (8 3182) 45-11-23

E-mail: publish@psu.pvl.kz

Сдано в набор 20.09.2001 г. Подписано в печать 28.10.2001 г.
Формат 297x420/2. Бумага книжно-журнальная.
Объем 12.1 уч.-изд. л. Тираж 300 экз.
Заказ Н-14.

Редакционно-издательский отдел
Павлодарского государственного университета
им. С. Торайгырова.