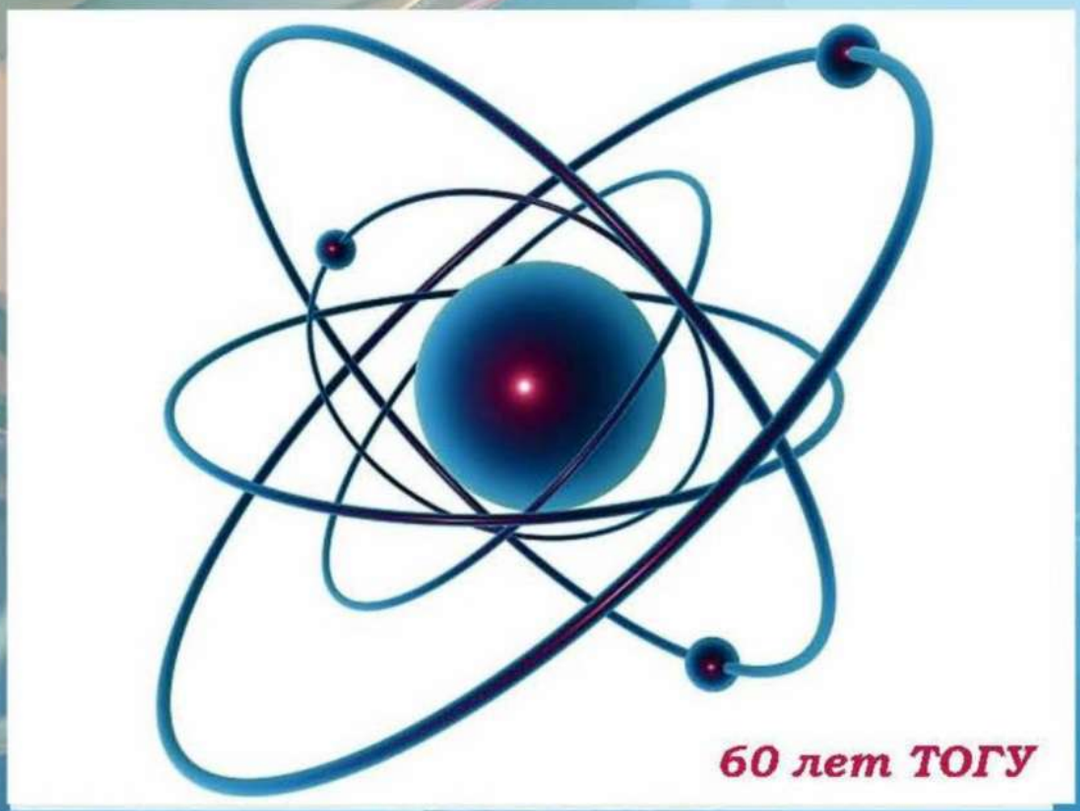
ФИЗИКА: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, ОБРАЗОВАНИЕ



Хабаровск 2018

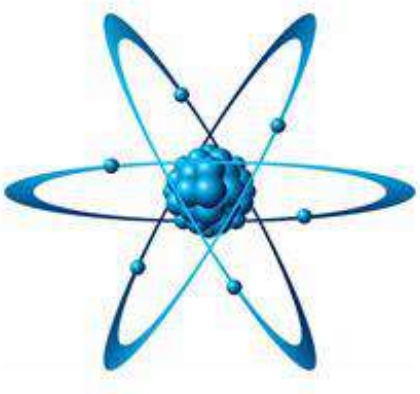
Правительство Хабаровского края
Министерство образования и науки Хабаровского края
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тихоокеанский государственный университет»

ФИЗИКА: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, ОБРАЗОВАНИЕ

Материалы XVI региональной научной конференции

(Хабаровск, 1–4 октября 2018 г.)

Под редакцией канд. физ.-мат. наук, доц. А. И. Мазура



Хабаровск
Издательство ТОГУ
2018

УДК 53:37.061.3
ББК В 3л0
Ф503

Ф503 **Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование** : материалы XVI региональной научной конференции, Хабаровск, 1–4 октября 2018 г. / под ред. А. И. Мазура. – Хабаровск : Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, 2018. – 288 с.

ISBN 978-5-7389-2685-3

В сборнике представлены материалы докладов шестнадцатой региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование», проведенной в октябре 2018 года. В них отражены результаты работы академических институтов, преподавателей вузов Дальневосточного региона и учителей школ Хабаровского края в области физики и физического образования.

Сборник предназначен для научных работников и аспирантов, преподавателей и студентов вузов, а также для специалистов предприятий и организаций.

УДК 53:37.061.3
ББК В 3л0

ISBN 978-5-7389-2685-3

© Тихоокеанский государственный университет, 2018

Секция «Общая и техническая физика. Оптика»

МАГНИТНОЕ ЗЕРКАЛО В МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ОПТИКИ

Б. Б. Авербух, Е. Е. Новикова, М. С. Пономарева

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: ekaterina.novikova.9494@mail.ru

В модели молекулярной оптики получено условие реализации оптического магнитного зеркала на границе раздела вакуум – среда из электрических диполей (или из электрических и магнитных диполей).

При отражении нормально падающей плоской электромагнитной волны от проводящей поверхности (металлического зеркала) напряженности электрического поля падающей и отраженной волн противоположны друг другу. Полное (падающее плюс отраженное) тангенциальное электрическое поле на отражающей поверхности равно нулю (узел стоячей волны). Направления магнитных полей этих волн совпадают. Магнитных проводников в природе нет. Поэтому считается, что подобный отклик для магнитного поля (когда магнитные поля падающей и отраженной волн противоположны, а электрические по направлению совпадают) возможен только при отражении от “искусственной магнитной поверхности” или от “магнитного зеркала” [1, 2]. Создать это зеркало можно, только используя метаматериалы. Экспериментально это наблюдалось для рельефной металлической поверхности [3], металл-диэлектрической структуры [1, 2, 4] и диэлектрической поверхности [5,6]. Оптическое магнитное зеркало рассматривается как новый эффект, демонстрирующий необычные граничные условия.

Опубликованные работы – в основном экспериментальные. В них исследуются метаматериалы с различными формами (куб, диск…) резонаторов, параметры которых определяются рабочей частотой. При теоретическом анализе среды характеризуются диэлектрической ε и магнитной μ проницаемостями или показателем преломления. Широко используются численные методы. Обычно считается, что эффект магнитного зеркала обусловлен магнитным откликом среды на падающее электромагнитное поле, хотя в работе [7] было показано, что роль магнитного дипольного и других магнитных откликов могут играть электрические резонансы более высоких порядков.

Но макроскопический подход и численные методы оставляют скрытыми многие детали физического механизма явления, которые при таком подходе не могут быть исследованы. Каково общее условие наблюдения явления? Действительно ли магнитное зеркало возможно только на границе искусственной среды? Можно ли его наблюдать на границе среды, состоящей только из электрических диполей? Почему можно наблюдать явление на границе слоя с квазинулевым показателем преломления и будет ли оно наблюдаться на границе среды с отрицательным показателем преломления? Общий ответ на эти вопросы, как и микроскопическая модель явления отсутствует. Не исследовалась также связь с законом отражения и формулами Френеля.

В данной работе на основании анализа, проведенного ранее [8] показано, что в случае плоской поверхности существование магнитного зеркала следует из формул Френеля. Получено общее микроскопическое условие реализации магнитных зеркал для случаев диэлектрических сред, скомпонованных только из электрических диполей (т.е. без магнитного отклика и без учета мультипольных моментов). Отсюда следует, что это явление может наблюдаться и на границе раздела материалов, существующих в природе. Полученное условие справедливо также для сред из электрических и магнитных диполей (т.е. с магнитным откликом). В частности, это могут быть среды с почти нулевым показателем преломления ($n \approx 0$)[2], Или среды с отрицательным показателем преломления (такие эксперименты нам не известны).

© Авербух Б. Б., Новикова Е. Е., Пономарева М. С., 2018

Рассмотрим отражение поляризованной вдоль оси x плоской электромагнитной волны

$$\boldsymbol{E}_0 = E_0\boldsymbol{e}_0 \exp(i\omega t - i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r}) \quad (1)$$

$$\boldsymbol{H}_0 = (\cos\alpha\boldsymbol{e}_y - \sin\alpha\boldsymbol{e}_z)E_0 \exp(i\omega t - i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r}) \quad (2)$$

с частотой ω, волновым вектором $\boldsymbol{k}_0 = (0, k_{0y}, k_{0z})$ и вектором поляризации $\boldsymbol{e}_0$ от границы раздела вакуум – среда из электрических диполей. Здесь $\boldsymbol{e}_y$ и $\boldsymbol{e}_z$ - единичные векторы вдоль соответствующих осей. Среда состоит из плоскопараллельных монослоев электрических диполей, характеризующихся поляризуемостью $A_d = A_d' - iA_d''$. Поля диполей учитываются полностью. Дипольные монослои лежат в плоскостях xy, пересекающих ось z в точках $z_1, z_2, z_3 \ldots$. Расстояния между монослоями равны a и $a << \lambda$, где λ - длина волны излучения. Диполи в монослоях расположены неупорядоченно (с плотностью N_d) и не взаимодействуют между собой. Размеры диполей много меньше расстояний между диполями, а также величин a и λ.

В работе[8] показано, что отраженная от среды волна определяется следующими выражениями для электрического и магнитного полей соответственно.

$$\boldsymbol{E}_R(x, y, z < z_1) = -iP_dB\boldsymbol{e}_0E_0 \exp(i\omega t - ik_{0y}y + ik_{0z}z - 2ik_{0z}z_1), \quad (3)$$

$$\boldsymbol{H}_R(x, y, z < z_1) = iP_dBE_0(\cos\alpha\boldsymbol{e}_y + \sin\alpha\boldsymbol{e}_z)\exp(i\omega t - ik_{0y}y + ik_{0z}z - 2ik_{0z}z_1), \quad (4)$$

где $P_d = 2\pi N_d A_d k^2 / k_{0z}$, $k = \omega / c$, $B = [1 - (1 - iP_d)\exp(-2ik_{0z}a)]^{-1}$. Величина $(-iP_dB)$ определяет коэффициент отражения. В оптическом диапазоне длин волн ($k_{0z}a << 1$), раскладывая в ряд функцию $\exp(-2ik_{0z}a)$ и учитывая член первого порядка малости, при $|P_d| << 1$ получаем,

$$\boldsymbol{E}_R(x, y.z < z_1) = R_s\boldsymbol{e}_0E_0 \exp(i\omega t - ik_{0y}y + ik_{0z}z - 2ik_{0z}z_1) \ , \quad (5)$$

$$\boldsymbol{H}_R(x, y, z < z_1) = -R_sE_0(\cos\alpha\boldsymbol{e}_y + \sin\alpha\boldsymbol{e}_z)\exp(i\omega t - ik_{0y}y + ik_{0z}z - 2ik_{0z}z_1) \ , \quad (6)$$

где $R_s = (k_{0z} - k_{2z})/(k_{2z} + k_{0z})$ - коэффициент отражения Френеля. Здесь выражения

$$k_{2z} = k_{0z} + \varphi_d / a \ , \quad \varphi_d = arctg[P_d' / (1 - P_d'')] \quad (7)$$

определяют z компоненту волнового вектора k_2 волны в среде и изменение фазы волны, обусловленное излучением дипольного монослоя [8]. Совокупность полей (5) и (6) определяет поперечную отраженную волну.

При нормальном падении $\alpha = 0$ и z компонента магнитного поля и в падающей и в отраженной волнах исчезает. Если $\varphi_d < 0$, то $0 < k_{2z} < k_{0z}$ и $R_s > 0$. Это соответствует условиям $2\pi N_d A_d' k^2 / k_{0z} << 1$, $k_{0z}a << 1$ и $A_d' < 0$. Электрические поля падающей и отраженной волн параллельны друг другу. Магнитные поля этих волн направлены противоположно друг другу. Это соответствует магнитному зеркалу. При наклонном падении, как видно из соотношений (5), (6), при $0 < k_{2z} < k_{0z}$ электрические поля падающей и отраженной волн по-прежнему параллельны.

Представим k_2 в виде $k_0 n_d$ [9], где $n_d = \left(1 + 2\xi\cos\alpha + \xi^2\right)^{1/2}$ описывает реальную часть показателя преломления, а $\xi = \varphi_d / ak_0$. Условие $0 < k_{2z} < k_{0z}$ означает $0 < n_d < 1$ и в определенных областях частот может выполняться и для обычных сред.

Рассмотрим теперь среду из периодически чередующихся электрических и магнитных дипольных монослоев. При падении полей (1), (2) на такой метаматериал z компонента волнового вектора $\boldsymbol{K} = (0, k_{0y}, K_z)$ волны в среде дается выражением [9]

$$K_z = k_{0z} + (\varphi_d + \varphi_m) / 2a, \quad (8)$$

где $\varphi_m = arctg[P_m' / (1 - P_m'')]$ определяет изменение фазы волны, обусловленное излучением

магнитного дипольного монослоя, $P_m = 2\pi N_m A_m k^2 / k_{0z}$, N_m - плотность распределения магнитных диполей в монослое, а $A_m = A_m' - iA_m''$ - поляризуемость магнитного диполя. Коэффициент отражения Френеля теперь дается выражением $R_{s1} = (k_{0z} - K_z)/(K_z + k_{0z})$. Следовательно, среда из чередующихся электрических и магнитных дипольных монослоев будет представлять собой магнитное зеркало при $k_{0z} > K_z$, т. е. при $(\varphi_d + \varphi_m) < 0$. В частности, при $k_{0z} = |(\varphi_d + \varphi_m)|/2a$ и $k_{0y} = 0$ из (8) следует, что показатель преломления n среды равен нулю ($n = 0$), т.к. $K_z = K = 0$. При распространении в среде обратных волн (т.е. при $K_z < 0$) магнитное зеркало реализуется при $2ak_{0z} < |\varphi_d + \varphi_m| < 4ak_{0z}$.

Таким образом, магнитное зеркало возможно, если z компонента волнового вектора волны в среде меньше z компоненты волнового вектора падающей волны. Условие реализации $0 \le k_{2z} < k_{0z}$ (или $k_{0z} > K_z$) переходит в $0 \le n_d < 1$(или $|n| < 1$). Если $n_d = 0$ (или $n = 0$), то $R_s = R_{s1} = 1$, что соответствует результату работы [2]. Эффект возможен в средах с только электрическим дипольным откликом на внешнее поле и значит, в частности, на границе с естественными материалами [10] в частотных областях, где $0 < n_d < 1$. Эффект возможен и на границе среды с отрицательным преломлением. Экспериментальные работы в этом случае нам не известны.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Schwanecke A.S., Fedotov V.A., Khardikov V.V., Prosvirnin S.L., Chen Y., Zheludev N.I. Optical magnetic mirrors // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 2007. V. 9. P. L1-L2.
2. Choi. S.B., Park D.J., Byun S.J., Kyoung J.Jisoo, Hwang S.W. Near-Zero Index: Optical Magnetic Mirror for Field Enhancement Imaging Applications // Adv. Optical Mater. 2015. V. 3, P.1719 - 1725.
3. J. Zhang, J-Y Ou, K F. MacDonald, N. I. Zheludev. Optical response of plasmonic relief meta-surfaces // J. Opt. 2012. V. 14. 114002 (6pp).
4. Fedonov V.A., Rogacheva A.V., Zheludev N.I., Mladyonov P.L., Prosvirnin S.L. Mirror that does not change the phase of reflected waves // Applied Physics Letters. 2006. V. 88, P. 091119-1 – 091119-3.
5. Liu S., Sinclair M.B., Manony T.S., Jun Y.C., Campione S., Ginn J., Bender D.A., Wendt J.R., Ihlefeld J.F., Glem P.G., Wright J.B., Brener I. Optical magnetic mirrors without metals // Optica. 2014. V.1. №4. P. 250-256.
6. L. Lin, Z.H. Jiang, D. Ma, Z. Liu, D.H. Werner, T.S. Mayer. Dielectric nanoresonator based lossless optical perfect magnetic mirror with near-zero reflection phase // Applied Physics Letters. 2016. V.108. P. 171902-1 – 171902-5.
7. Liu W. Generalized magnetic mirrors // Phys. Rev. Lett. 2017.119, P.123902-1 – 123902-6.
8. Авербух Б. Б., Авербух И. Б. Формирование отраженной и преломленной s – поляризованных электромагнитных волн в задаче Френеля с точки зрения молекулярной оптики // Изв. вузов: Физика. 2015. V. 58, №12. С 83-88.
9. Авербух Б.Б., Авербух И.Б. Формирование отраженной и преломленной s-поляризованных электромагнитных волн на плоской границе раздела вакуум-среда из электрических и магнитных диполей // Изв. вузов: Физика, 2016. V.59, №5. С. 117-122.
10. Драчев К. А., Римлянд В. И., Кондратьев А. И., Старикова В. Н. Динамика дисперсионных зависимостей акустических параметров и оптических свойств в процессе полимеризации // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, физическое образование: материалы XI региональной научной конференции. Хабаровск: изд-во ТОГУ. 2010. С.103-104.

ВЫХОД ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ ОБРАТНЫХ ВОЛН ЗА ПРЕДЕЛЫ МЕТАМАТЕРИАЛА КАК ОДНА ИЗ ПРИЧИН НЕВОЗМОЖНОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ИДЕАЛЬНОЙ СУПЕРЛИНЗЫ

Б. Б. Авербух, М. С. Пономарева

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: aviwork@rambler.ru

Рассмотрено преломление плоской s - поляризованной электромагнитной волны на границе раздела метаматериал-вакуум. Показано, что область существования обратных волн выходит за пределы метаматериала. Это приводит к нарушению условий функционирования суперлинзы.

Особенности распространения электромагнитных волн в метаматериале являются предметом многих исследований [1] в связи с их возможными применениями. Например, при использовании плоскопараллельного слоя метаматериала с отрицательной вещественной частью показателя преломления в качестве суперлинзы [2]. Дело в том, что плоскопараллельный слой материала с отрицательными значениями диэлектрической ε и магнитной μ проницаемостей может фокусировать излучение точечного источника [3]. Пусть источник расположен перед слоем на расстоянии d_1 (меньшем длины волны) от него. И пусть толщина слоя d, а изображение источника формируется на расстоянии d_3 позади слоя. Утверждается, что при $\varepsilon = \mu = -1$ (если слой расположен в вакууме) и при $d_1 + d_3 = d$ изображение источника идеальное [4]. Эффект основан на том, что слой с $\varepsilon < 0$ и $\mu < 0$ усиливает неоднородные волны в излучении источника и при $\varepsilon = \mu = -1$ это усиление точно компенсирует затухание этих волн в областях перед слоем и после него. При тех же условиях отрицательный набег фазы бегущих волн при распространении в пределах слоя точно компенсирует положительный набег фазы этих волн в областях перед слоем и после него.

Анализ и критика концепции суперлинзы [1,5,6] связаны в основном с усилением неоднородных волн. Цель настоящей работы - анализ другой проблемы, возникающей при реализации суперлинзы, и связанной с распространяющимися в метаматериале обратными волнами. В работе в рамках молекулярной оптики показано, что область существования обратных волн выходит за пределы среды. Значит отрицательный набег фазы при распространении обратных волн увеличивается, а положительный при распространении обычных волн за метаматериалом уменьшается и их компенсации уже не происходит. Значит нарушается одно из условий функционирования суперлинзы.

Постановка задачи аналогична рассмотренной в [7]. Рассмотрим распространение s – поляризованного электромагнитного излучения в среде в модели молекулярной оптики. Метаматериал состоит из периодически расположенных плоскопараллельных монослоев (dm), составленных из точечных элементов Гюйгенса. Под элементами Гюйгенса понимаются частицы с электрической ($A_d = A_d' - iA_d''$) и магнитной ($A_m = A_m' - iA_m''$) поляризуемостями. Индуцированные электрические $\boldsymbol{d}$ и магнитные $\boldsymbol{m}$ дипольные моменты взаимно перпендикулярны и колеблются в фазе. Они предполагаются пропорциональными падающему на них электрическому и магнитному полям соответственно. Все монослои лежат в плоскостях xy, пересекающих ось z в точках $z_1, z_2 \ldots$. Расстояния между монослоями равны a и $a << \lambda$, где λ - длина волны излучения. Элементы в монослое расположены неупорядоченно с плотностью N. Поскольку внешнее поле распространяется вперед, то рассматривается рассеяние последовательными монослоями элементов Гюйгенса. Учитывается, что каждый монослой находится в поле излучения всех других монослоев. Под действием внешнего поля элементы становятся источниками вторичных когерентных электромагнитных волн. Интерференция этих волн определяет структуру электромагнитного поля в среде и за ее пределами.

© Авербух Б. Б., Пономарева М. С., 2018

На первый монослой со стороны $z < z_1$ под углом α падает поляризованное вдоль x монохроматическое поле $\boldsymbol{E}_0 = E_0 \boldsymbol{e}_0 \exp(i\omega_0 t - i\boldsymbol{k}_0 \boldsymbol{r})$ с частотой ω, волновым вектором $\boldsymbol{k}_0 = (0, k_{0y}, k_{0z})$ и вектором поляризации $\boldsymbol{e}_0$. Магнитное поле падающего излучения равно $\boldsymbol{H}_0 = E_0(\cos\alpha \boldsymbol{e}_y - \sin\alpha \boldsymbol{e}_z)\exp(i\omega t - i\boldsymbol{k}_0 \boldsymbol{r})$, где $\boldsymbol{e}_y$ и $\boldsymbol{e}_z$ - единичные векторы вдоль соответствующих осей. Индуцированные полем электрический дипольный момент $\boldsymbol{d}_p = A_d \boldsymbol{E}_0$ и магнитный дипольный момент $\boldsymbol{m}_p = A_m \boldsymbol{H}_0$ p-го элемента Гюйгенса (с радиус-вектором $\boldsymbol{r_p} = (x_1, y_1, z_1)$) первого монослоя излучают.

Вычисление полей $\boldsymbol{E_1}_{0dm}$ и $\boldsymbol{H_1}_{0dm}$, рассеянных этими элементами в точке наблюдения (x_2, y_2, z_2), подобно проведенному в [7], и дает

$$\boldsymbol{E_1}_{0dm}(x_2, y_2, z_2 > z_1) = -iP_{dm} E_0 \boldsymbol{e}_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y_2 - ik_{0z} z_2), \qquad P_{dm} = P_d + P_m, \tag{1}$$

$$\boldsymbol{H_1}_{0dm}(x_2, y_2, z_2 > z_1) = -iP_{dm} E_0 (\cos\alpha \boldsymbol{e_y} - \sin\alpha \boldsymbol{e_z}) \exp(i\omega t - ik_{0y} y_2 - ik_{0z} z_2), \tag{2}$$

где $P_d = P_d' - iP_d'' = NA_d k^2 / 2k_{0z}$, $P_m = P_m' - iP_m'' = NA_m k^2 / 2k_{0z}$.

На второй монослой элементов Гюйгенса падают поля $(\boldsymbol{E}_0, \boldsymbol{H}_0)$ и поля (1), (2), рассеянные первым монослоем, т.е. $\boldsymbol{E}_0 + \boldsymbol{E_1}_{0dm}$ и $\boldsymbol{H}_0 + \boldsymbol{H_1}_{0dm}$. Представим $1 - iP_{dm}$ в виде $F_{dm}\exp(-i\varphi_{dm})$. Тогда поле преломленной первым монослоем волны имеет вид

$$(1 - iP_{dm})\boldsymbol{E}_0(x_2, y_2, z_2) = F_{dm} E_0 \boldsymbol{e}_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y_2 - ik_{0z} z_1 - ik_{2z} a), \tag{3}$$

где $F_{dm} = \sqrt{(1 - P_{dm}'')^2 + P_{dm}'^2}$ и $\varphi_{dm} = arctg[P_{dm}'/(1 - P_{dm}'')]$ описывают изменения амплитуды и фазы волны, обусловленные излучением монослоя, а

$$k_{2z} = k_{0z} + \varphi_{dm} / a. \tag{4}$$

Значит элемент Гюйгенса второго монослоя "чувствует" поле (3) с волновым вектором $\boldsymbol{k}_2 = (0, k_{0y}, k_{2z})$. И так далее. Распространяющееся вперед поле в точке нахождения элемента Гюйгенса n-го монослоя описывается выражением

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}(x_n, y_n, z_n) &= (1 - iP_{dm})^{n-1} E_0 \boldsymbol{e}_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y_n - ik_{0z} z_n) = \\ &= F_{dm}^{n-1} E_0 \boldsymbol{e}_0 \exp[i\omega t - ik_{0y} y_n - ik_{0z} z_1 - ik_{2z} a(n-1)] \end{aligned} \tag{5}$$

и пребдставдяет собой волну с волновым вектором $\boldsymbol{k}_2$. Представив модуль вектора $\boldsymbol{k}_2$ в виде $k_0 n_{dm}$, введем показатель преломления среды n_{dm}.

$$n_{dm} = (1 + 2\xi \cos\alpha + \xi^2)^{1/2}, \qquad \xi = \varphi_{dm} / ak_0. \tag{6}$$

Анализ различных возможных ситуаций, возникающих при преломлении на границе вакуум – метаматериал и описываемых соотношениями (4), (6), аналогичен проведенному в [7,8]. Отметим еще одно следствие из (4), (6), не рассматривавшееся в [7,8]. Равенство $n_{dm}^2 = 1$ справедливо как при $\xi = 0$ (что соответствует $n_{dm} = 1$ и рассмотрено в [7]), так и при $\xi = -2\cos\alpha$. В последнем случае из (6) следует, что $\varphi_{dm} = -2ak_{0z}$, т.е. отрицательный набег фазы φ_{dm} волны, обусловленный излучением монослоя, в два раза больше положительного набега фазы, обусловленного распространением вперед на периоде структуры. При этом из (4) следует, что $k_{2z} = -k_{0z}$. Показателю преломления среды при этом обычно приписывают значение $n_{dm} = -1$, что соответствует суперлинзе. Рассмотрим ситуацию подробно. Пусть метаматериал толщиной $l = a(n-1)$ содержит n монослоев элементов Гюйгенса. Излучение последнего n-го монослоя, "чувствующего" поле (5), приводит к отрицательному сдвигу фазы ($\varphi_{dm} < 0$) распространяющегося вперед поля

$$\boldsymbol{E}(x, y, z_n + b) = (1 - iP_{dm})^n E_0 \boldsymbol{e}_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y - ik_{0z} l - ik_{0z} b) =$$
$$= F_{dm}^n E_0 \boldsymbol{e}_0 \exp[i\omega t - ik_{0y} y - ik_{0z} z_1 - ik_{2z} l - ik_{3z} b],$$

у которого z компонента волнового вектора равна $k_{3z} = k_{0z} + \varphi_{dm} / b$ и зависит от расстояния b от среды до точки наблюдения. Если $\varphi_{dm} < 0$, то при $b < |\varphi_{dm}| / k_{0z}$ величина k_{3z} отрицательна, что соответствует обратной волне. Для суперлинзы $\varphi_{dm} = -2ak_{0z}$ и получаем, что $k_{3z} < 0$ при $b < 2a$. С увеличением b отрицательный сдвиг фазы постепенно компенсируется положительным при распространении вперед.

Выход области существования обратных волн за пределы метаматериала был ранее получен в результате численных вычислений в работе [9]. Физический механизм этого явления при таком подходе не мог быть исследован.

Поле в среде и за ней формируется при сложении падающего поля и полей, рассеянных элементами Гюйгенса метаматериала. Выход области существования обратных волн за пределы среды обусловлен интерференцией электромагнитных волн и должен наблюдаться как при неупорядоченном (рассматриваемом в данной работе), так и при упорядоченном распределении элементов в монослое.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Шевченко В. В. Локализация стационарного электромагнитного поля при помощи плоской границы метаматериала // УФН. 2011. Т.181. №11. С.1172-1172.
2. Miron'chev A.S., Yakubov V.P. Multiple Re-Reflections and Focusing of Waves by a Metamaterial Layer // Russ. Phys. J. 2016. V.59. №8. P.1261-1267.
3. Веселаго В.Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ε и μ // УФН. 1967. Т.92. С.517-526.
4. Pendry J.B. Negative Refraction Makes a Perfect Lens // Phys. Rev. Lett. 2000. V.85. P.3966-3969.
5. Раутиан. С. Г. О некоторых свойствах эталона Фабри-Перо с отрицательными проницаемостями среды // Опт. и спектр. 2008. Т.105**.** С.103-113.
6. Петрин А. Б. О распространении электромагнитной волны в среде с отрицательным преломлением от точечного источника, расположенного в воздухе // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т.87. №9. С.550-555.
7. Авербух Б. Б. Среда с единичным показателем преломления на данной частоте // Письма в ЖТФ. 2015. Т.41. №10. С. 50-56.
8. Авербух Б. Б. Среды с нулевым показателем преломления на данной частоте // Письма в ЖТФ.-2015. Т.41. №24. С. 64-69.
9. Kissel V. N., Lagarkov A.N. Superresolution in left-hand composite structure: From homogenization to a detailed electrodynamic description // Phys. Rev. 2005. B72. P.085111-1 - 085111-8.

ПРИЕМНИК ИМПУЛЬСОВ УЛЬТРАКОРОТКОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

Г. А. Аникеев, П. С. Гончарова, А. В. Сюй

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
г. Хабаровск, e-mail: alsyuy271@gmail.com

Создан приемник импульсов ультракороткой длительности, работающий на основе автокоррелятора. Автокоррелятор позволяет измерять импульсы лазерного излучения длительностью порядка фемтосекунд.

Измерение импульсов ультракороткой длительности является достаточно сложной задачей, и в течение достаточно долгого периода времени их умели генерировать, но не могли измерять.

© Аникеев Г. А., Гончарова П. С., Сюй А. В., 2018

Полное определение характеристик импульсов ультракороткой длительности необходимо для всестороннего учета условий экспериментов и исследований. Измерения могут проводиться для нахождения мощности, формы и спектра импульса. Измерение параметров ультракоротких импульсов затруднено тем, что фотодетекторы, использующиеся для приема длинных импульсов, слишком медленны для регистрации ультракоротких импульсов [1].

Данная статья посвящена автокорреляционной методике приема оптических ультракоротких импульсов и разработанной на ее основе экспериментальной установке.

Информацию о временных ультракоротких импульсов (УКИ) можно получить, измеряя автокорреляционную функцию интенсивности. График автокорреляционной функции получатся путем построения по оси ординат коэффициента корреляции двух функций (основной и функции сдвинутой на величину τ) и величины τ по оси абсцисс. В качестве приборов для измерения автокорреляционной функции применяются интерферометры различных конструкций. Исследование ультракоротких лазерных импульсов основывается на принципе разделения лазерного пучка, интерференции двух этих пучков с изменяемой задержкой вторичного импульса относительно первоначального и последующего получения автокорреляционной функции [2].

В данной работе для реализации экспериментальной установки измерения характеристик УКИ используется схема автокорреляционного приемника на основе интерферометра Майкельсона [3]. Автокорреляционный приемник можно разделить на две части:

– оптико-механическая часть (конструкция интерферометра Майкельсона, рис. 1);

– электронная часть, в которую входят фотоприемный модуль, блок управления и обработки данных с усилителем динамика, персональный компьютер (рис. 2).

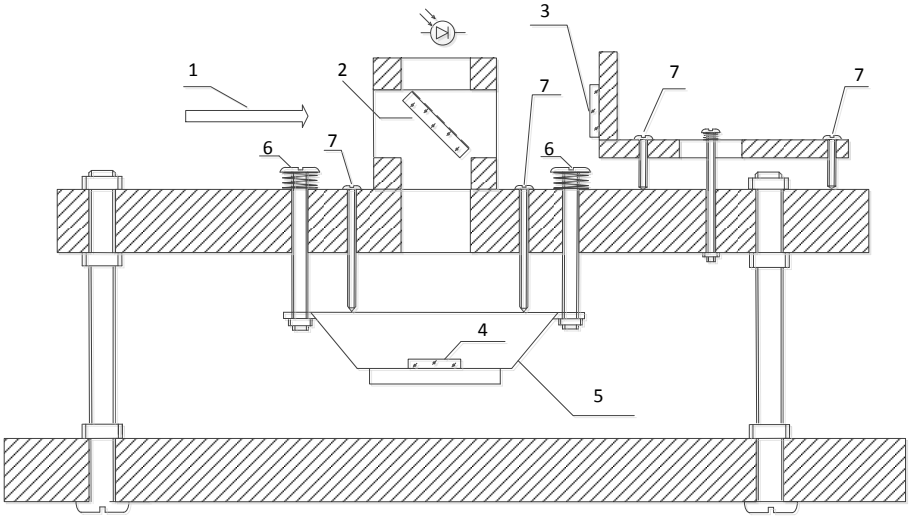


Рис. 1. Схема оптико-механической части автокоррелятора: 1 – входящий световой поток; 2 – полупрозрачное диагональное зеркало; 3 – неподвижное зеркало, которое можно перемещать вдоль оси для изменения разности хода между двумя плечами интерферометра; 4 – подвижное зеркало; 5 – мембрана динамика; 6, 7 – юстировочные винты

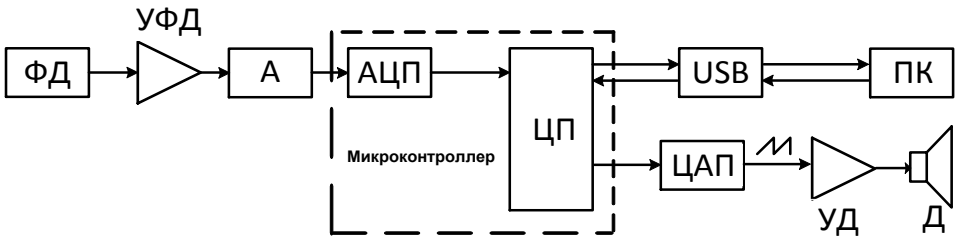


Рис. 2. Схема электронной части установки: ФД – фотодиод; УФД – усилитель фотодиода; А – аттенюатор; АЦП – аналогово-цифровой преобразователь; ЦАП – внешний цифро-аналоговый преобразователь; УД – усилитель динамика; Д – динамик; USB – порт подключения к персональному компьютеру; ПК – персональный компьютер

Крайне важным элементом в работе автокоррелятора на основе интерферометра Майкельсона является система, обеспечивающая смещение подвижного зеркала относительно полупрозрачного зеркала для изменения разности хода между опорным и информационными импульсами. При изменении разности хода межу этими импульсами происходит их интерференция, что приводит к изменению показаний фотоприемника. В данной установке подвижное зеркало расположено на мембране динамика. На плате управления расположен микроконтроллер со встроенным аналогово-цифровым преобразователем. Микроконтроллер при помощи внешнего цифро-аналогового преобразователя генерирует пилообразный сигнал, который усиливается усилителем динамика и поступает на динамик. При подаче напряжения на динамик происходит смещение мембраны, а вместе с ней и зеркала, на уровень, соответствующий приложенному напряжению. В результате движения динамика меняется разность плеч и возникает интерференционная картина, фиксируемая фотоприемным модулем. Затем оцифрованные данные передаются на персональный компьютер в специальное программное обеспечение.

Разработанная установка позволяет проводить различные эксперименты, связанные с исследованием характеристик оптических ультракоротких импульсов, таких как длительность и энергетический спектр.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Беспалов В. Г., Козлов С. А., Крылов В. Н., Путилин С. Э. Фемтосекундная оптика и фемтотехнологии. СПб: СПбГУ ИТМО, 2010.234 с.
2. Головань Л. А., Заботнов С. В. Измерение длительности фемтосекундных лазерных импульсов. М. 2014. 32 с.
3. Аникеев Г. А., Гончарова П. С. Автокорреляционный приемник оптических ультракоротких импульсов // Фундаментальные исследования. 2017. № 6. С. 15-20.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ИНТЕГРАЛЬНОЙ СВЕТИМОСТИ ЕВЧР В НЕОНЕ В РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

Т. В. Бондарева, И. Н. Егоршин, М. С. Круглов

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: tanchotep@bk.ru

В данном исследовании представлен анализ интегральной светимости ассиметричного емкостного высокочастотного разряда (АЕВЧР) низкого давления в неоне. Рассмотрено пространственное распределение свечения столба плазмы неона в области активного электрода при различных частотах и напряжениях внешнего электромагнитного поля.

Современный научно–технический прогресс во многом определяется быстро развивающимся комплексом высоких технологий, в котором ведущую роль играет использование газоразрядной плазмы. В качестве примера важнейших применений ионизованных газов достаточно назвать плазменную технологию, лазеры и плазмохимию.

В данной работе исследовался ассиметричный емкостной высокочастотный разряд в неоне при давлении 0,1 Тор. Разряд зажигался в газоразрядной трубке диаметром 60 мм. Высокочастотное напряжение подавалось на электроды разного диаметра. Диаметр активного (высокопотенциального) электрода равен 5 мм. Диаметр заземленного электрода равен 60 мм. Для получения пространственного распределения интегральной светимости АЕВЧР использовался ФЭУ-100 с последовательно включенным микроамперметром. ФЭУ передвигался вдоль оси разрядной трубки от активного электрода в сторону заземленного. В работе представлены интегральная светимость вблизи активного электрода, так как вблизи заземленного электрода проходят те же физические процессы, только они в меньшей степени выражены по сравнению с

© Бондарева Т. В., Егоршин И. Н., Круглов М. С., 2018

процессами у активного электрода.

На рис. 1 представлены графики пространственного распределения интегральной светимости при следующих частотах: 4 МГц, 7 МГц и 11 МГц и напряжении внешнего поля 500 В.

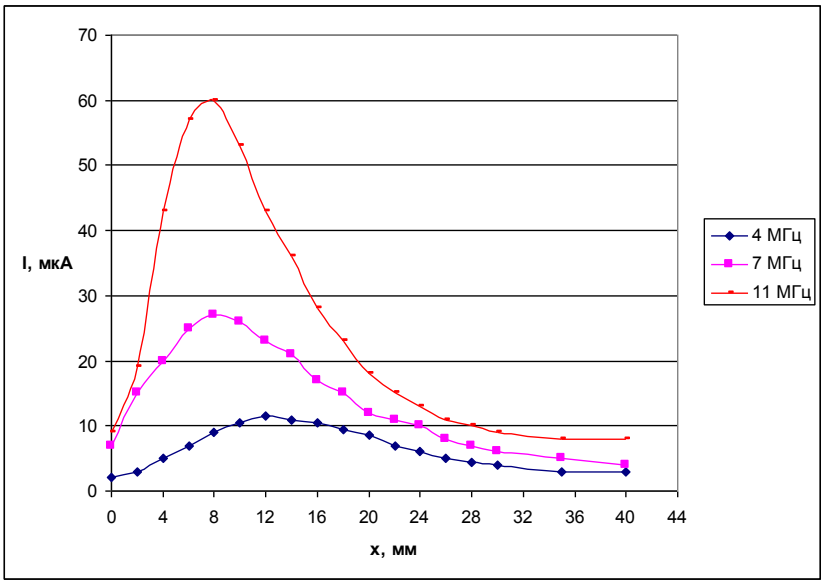


Рис. 1. Пространственное распределение интегральной светимости ЕВЧР вблизи активного электрода при напряжении внешнего поля 500 В. Активный электрод слева

Из графиков видно, что максимальная интенсивность свечения приходится на приэлектродную область. Расположение максимума на частоте 4 МГц смещается к центру столба плазмы.

При чем, интенсивность свечения приэлектродной области при переходе от частоты 4 МГц к частоте 7 МГц возрастает примерно в 2,5 раза, а при переходе от частоты 7 МГц к частоте 11 МГц возрастает примерно в 2,2 раза. Отсюда очевидно, что максимальная интенсивность излучения прямо пропорциональна квадрату частоты внешнего поля.

На рис. 2 представлены графики пространственного распределения интегральной светимости при тех же условиях, но при напряжении внешнего поля 2000 В.

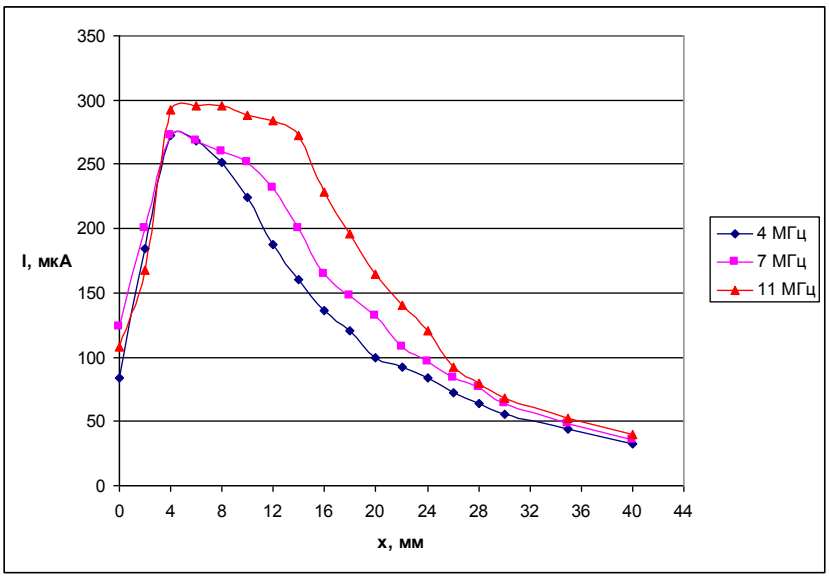


Рис. 2. Пространственное распределение интегральной светимости ЕВЧР вблизи активного электрода при напряжении внешнего поля 2000 В. Активный электрод слева.

Как и на рис.1, на представленных графиках максимальная интенсивность свечения также приходится на приэлектродную область. Однако пространственное расположение максимумов свечения практически не зависит от частоты.

Представляет интерес, что максимальная интенсивность свечения при всех трех частотах практически совпадает, что кардинально отличается от случая при более низком напряжении.

Также при данном напряжении наблюдается изменение формы максимума свечения в зависимости от частоты, а именно происходит размытие пика интенсивности свечения в пространстве на частотах 7 МГц и 11МГц. Возможно, это объясняется тем, что пучки при данных условиях возникновения приобретают максимальную интенсивность, а в приэлектродной области возникает эффект насыщения ионизованными атомами, то есть достигается максимальная концентрация заряженных частиц при данном давлении. Это также объясняет отсутствие роста интенсивности свечения.

Из выше сказанного можно сделать вывод, что процессы, протекающие в плазме емкостного высокочастотного разряда, существенно отличаются при различном напряжении внешнего поля. Это обусловлено тем, что есть два режима существования разряда. При напряжении 500 В разряд находится в α-режиме, а значит он возникает и поддерживается только за счет внешнего электромагнитного поля, следовательно, все процессы, протекающие в плазме, зависят только от характеристик внешнего поля, что и прослеживается в рисунке 1. При напряжении 2000 В разряд находится в γ-режиме, а значит основной вклад в существование столба плазмы вносят приэлектродные электронные пучки [1,2]. Видно, что максимальная интенсивность свечения в α-режиме в 5 раз меньше средней максимальной интенсивности свечения в γ-режиме, то есть вклад пучков в рождение плазмы существенно превышает вклад поля. Следовательно, характеристики плазмы будут слабо зависеть от характеристик внешнего поля.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Райзер Ю.П., Шнейдер М.Н., Яценко Н.А. Высокочастотный емкостной разряд: Физика. Техника эксперимента. Приложения: Учеб. Пособие: Для вузов. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1995. 320 с.
2. Савинов В. П. Физика высокочастотного емкостного разряда. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. 308 с.

ФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДЛЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА ПРИБРЕЖНОГО УГОЛЬНОГО ТЕРМИНАЛА

Д. В. Вегера, К. А. Шиманчук, В. П. Писаренко, А. А. Евтушенко

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: k.a.shimanchuk@gmail.com

Быстрое развитие научно-технического прогресса в настоящее время приводит к обострению проблемы экологической безопасности в мире. Особенно остро поднимается вопрос о влияние угольной пыли на окружающую среду и здоровье людей. Большинство морских портов, занимающихся открытой перегрузкой и хранением угля, находятся в непосредственной близости с населенными пунктами, поэтому такие зоны особенно нуждаются в постоянном мониторинге окружающей среды. В данной статье представлена структура системы экологического мониторинга прибрежного угольного терминала с использованием современных инструментов измерительной и вычислительной техники. Также описаны физические свойства и методы измерения оборудования, выбранного для системы экологического мониторинга.

Введение. Быстрый рост количества населения на Земле, а также быстро развивающийся научно-технический прогресс сильно воздействовали на экологическую обстановку. Влияние техногенных процессов значительно переросло тот объем, с которым справлялся природный кругооборот веществ.

© Вегера Д. В., Шиманчук К. А., Писаренко В. П., Евтушенко А. А., 2018

Возникла опасность невозвратимых изменений биосферы по причине сохранения привычных для людей способов ведения хозяйства. В настоящее время концентрация вредных веществ до такой степени высока, что представляет опасность жизни будущих поколений и здоровью нынешних.

Более 100 лет ведутся регулярные наблюдения за изменением окружающей среды, такие как метеорологические, фенологические, сейсмологические и другие виды наблюдений и измерений состояния природной среды.

Мониторинг – система контроля качества окружающей среды, оценки, прогнозирования. Этот термин был впервые введен ООН на Стокгольмской конференции в 1972 г. В 1974 г. в Кении в соответствии с программой ООН прошло I Межгосударственное совещание по проблемам окружающей среды (рис. 1) [1].

Основная цель – создание системы контроля качества окружающей среды. На совещании были определены цели и задачи системы мониторинга. Система мониторинга в первую очередь ставит перед собой задачу определения степени загрязнения окружающей среды на региональном, местном и мировом уровнях.

Рис. 1. Модель системы управления окружающей средой по стандарту ISO-14001:2004

Экологический мониторинг окружающей среды ранее проводился в ручном режиме, но с развитием вычислительной и измерительной техники активно начали использоваться современные средства, которые построены на базе современных микроконтроллеров и персональных компьютеров.

Постановка задачи. В последние годы отмечается значительное увеличение спроса на уголь в странах Азиатско-Тихоокеанского региона. Все это привело к тому, что в настоящее время все свободные мощности в портах заняты переработкой этого вида груза.

Такая ситуация спровоцировала резкое ухудшение экологической картины в портах и вокруг них. В результате открытого вида перегрузки и хранения угля происходит загрязнение атмосферного воздуха частицами угольной пыли.

Подавляющее большинство морских портов находится в черте населенных пунктов или в непосредственной близости от жилых кварталов, а многие их жители работают в самом порту. Загрязнение атмосферного воздуха в зоне влияния порта повышает потенциальный риск для здоровья населения из-за двойного воздействия вредных факторов – как на производстве, так и на жилой территории. Поэтому необходимо организовать систему экологического мониторинга окружающей среды, которая будет охватывать не локальные участки, а всю территорию терминала, а также его санитарную зону в 500 м., подвергаемую загрязнению, а также санитарную зону.

Для организации системы экологического мониторинга прибрежного угольного терминала потребуется использование набора датчиков-анализаторов, измеряющих следующие параметры:

- Концентрация угольной пыли
- Концентрация твердых металлов в воде
- Скорость и направление ветра

- Температура
- Атмосферное давление
- Относительная влажность

Угольная пыль – это частицы угольного вещества, которые образуются в результате разрушения массива пласта.

Угольная пыль относится к категории неядовитых, однако наличие пыли в воздухе приносит большой вред здоровью. Действие неядовитой пыли проявляется в нарушении жизнедеятельности верхних дыхательных путей, легких, кожи и глаз. Вредность неядовитой угольной и породной пыли обусловлена способностью вызывать профессиональные заболевания легких – пневмокониозы.

Предельно допустимые концентрации (ПДК) угольно-породной пыли нормируются в зависимости от содержания свободного диоксида кремния (SiO_2) [2]:

- пыль, содержание от 10 % до 70 % двуокиси кремния - 2 мг/м3
- пыль, содержание от 2% до 10 % двуокиси кремния - 4 мг/м3
- пыль, содержание менее 2% двуокиси кремния - 10 мг/м3

Несмотря на то, что сама по себе угольная пыль ядовитой не является, она способна адсорбировать из воздуха некоторые ядовитые вещества. Например, угольная пыль и сажа могут адсорбировать оксид углерода (угарный газ). Длительное пребывание в атмосфере угарного газа вызывает головную боль, головокружение, потерю сознания, а при больших концентрациях может наступить смерть. Предельно допустимая концентрация (ПДК) содержания оксида углерода (CO) в воздухе рабочей зоны - 20 мг/м^3.

Исходя из вышеизложенного, целесообразно выбрать следующие приборы, представленные в табл. 1.

Таблица 1

Оборудование для экологического мониторинга

	Газоанализатор	Пылемер	Анализатор воды	Метеостанция
Параметры измерения	Оксид углерода (CO), диоксид кремния (SiO_2), сажа	Концентрация пыли	Органические вещества, концентрация твердых металлов	Температура, скорость и направление ветра, относительная влажность, атмосферное давление
Метод измерения	Электрохимический, термокаталитический, оптический	Оптический	Спектрофотометрический	Первичные измерительные преобразователи метеорологических параметров
Интерфейс	RS-485	RS-485, RS-232	RS-485	RS-485

Физические свойства измерительного оборудования для экологического мониторинга. Принцип действия газоанализатора основан на следующих методах измерений:

- электрохимический
- термокаталитический
- оптический

Электрохимический метод основан на потенциостатической амперометрии, заключающейся в измерении тока при электрохимическом окислении вещества на рабочем электроде электрохимической ячейки. Сила тока пропорциональна массовой концентрации вещества в анализируемом газе.

Термокаталитический метод заключается в измерении изменения проводимости на платинопалладиевом электроде при термокаталитической реакции, пропорциональной концентрации определяемого вещества.

В оптических газоанализаторах концентрация определяемого компонента измеряется по изменению оптических свойств газовой смеси, к числу которых относятся показатели преломления, спектрального поглощения и излучения, спектральная плотность и т.п.

В оптических пылемерах, используемых преимущественно для анализа атмосферно-

го воздуха, массу пыли оценивают по интенсивности света, рассеянного (поглощенного) осадком на фильтре (обычно ленточном). Для контроля концентраций промышленной пыли наиболее распространены собственно оптические пылемеры, действие которых основано на поглощении или рассеянии светового пучка, пропущенного через слой запыленного газа в газоходе. В первом случае луч света от источника проходит через газовый поток и, будучи ослабленным за счет поглощения частицами пыли, попадает на один из двух фотоприемников. Одновременно на другой фотоприемник падает луч сравнения. При мостиковой схеме соединения обоих фотоприемников возникает сигнал рассогласования, который является функцией степени поглощения пучка света и, следовательно, площади поверхности частиц пыли в потоке.

Принцип действия метеостанций основан на измерении первичными измерительными преобразователями метеорологических параметров, указанных в табл. 2.

Таблица 2

Измерительные преобразователи метеорологических параметров

Параметр	Измерительный преобразователь
Температура воздуха	Термометр сопротивления
Относительная влажность воздуха	Ёмкостный преобразователь
Атмосферное давление	Ёмкостный преобразователь мембранного типа
Скорость и направление воздушного потока	Ультразвуковой преобразователь
Количество атмосферных осадков	Высокочастотный доплеровский преобразователь
Энергетическая освещенность	Пиранометр

Измеренные метеорологические параметры преобразуются в цифровой код преобразователями измерительными и передаются на ПК.

В основе работы анализатора воды лежит спектрофотометрический метод, в котором используется спектрально-избирательное поглощение монохроматического потока световой энергии при прохождении его через исследуемый раствор. Метод позволяет определять концентрации отдельных компонентов смесей окрашенных веществ, имеющих максимум поглощения при различных длинах волн. Спектрофотометрический метод анализа применим для измерения светопоглощения в различных областях видимого спектра, в ультрафиолетовой и инфракрасной областях спектра, что значительно расширяет аналитические возможности метода.

Структура системы экологического мониторинга. Структура разрабатываемой системы экологического мониторинга прибрежного угольного терминала представлена на рис. 2.

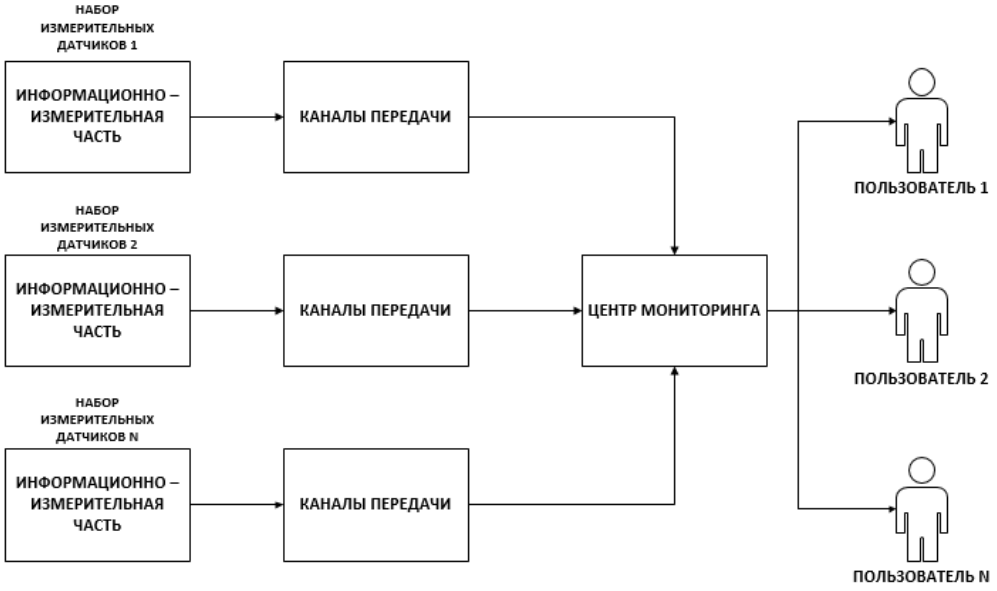


Рис. 2. Структура системы экологического мониторинга прибрежного угольного терминала

Система состоит из следующих частей:

- информационно-измерительная часть
- каналы передачи данных
- центр мониторинга

Информационно-измерительная часть включает в себя газоанализатор, пылемер для замера концентрации угольной пыли, анализатор воды и компактную метеостанцию для измерения скорости и направления ветра, а также температуры, влажности и атмосферного давления. Для сбора информации от датчиков и передачи в центр мониторинга используется сервер.

По каналам передачи данных обеспечивается передача измерительной информации от сервера в центр мониторинга для последующей обработки переданных измерений. Канал передачи данных может быть построен с использованием проводных технологий, например, оптическая линия связи или витая пара RJ-45. Также измерительная информация может передаваться с использованием беспроводных технологий.

Центр мониторинга представляет собой сервер, выполняющий функции приема, обработки, отображения, накопления и распределения полученной информации среди клиентов, решающих вопросы контроля экологической обстановки окружающей среды в любой момент времени. На базе центра мониторинга предлагается создать Web-сервис для удаленного мониторинга.

В перспективах развития описанной системы экологического мониторинга рассматривается увеличение числа субъектов мониторинга – угольных терминалов или аналогичных предприятий. В таком случае представляется целесообразной организация единого для всех субъектов центра мониторинга, который может быть интегрирован в Тихоокеанском Государственном Университете (ТОГУ).

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. ISO 14001:2004 Системы экологического менеджмента – Требования и руководство к применению. Международная организация по стандартизации. 2004. 30 с.
2. Федеральные нормы и правила в области промышленной безопасности «Инструкция по борьбе с пылью в угольных шахтах». Серия 05. Выпуск 44. М.: Закрытое акционерное общество «Научно-технический центр исследований проблем промышленной безопасности», 2015. 68 с.
3. Горюнкова А. А. Современное состояние и подходы к разработке систем мониторинга загрязнения атмосферы // Известия ТулГУ. Технические науки. 2013. №11. С.251-260.
4. Абросимов А. А. Экология переработки углеводородных систем. М: «Химия», 202. 608 с.

УСТРОЙСТВО ДЛЯ ПРОФИЛАКТИКИ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ СПЕЦИАЛИСТОВ IT-СФЕРЫ В БЫТОВЫХ УСЛОВИЯХ

К. А. Драчёв, **В. В. Савченко**

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»,
Хабаровск, E-mail: project1326@mail.ru

Приведен обзор по профессиональным заболеваниям специалистов IT-сфер. Предложена схема динамического электронейростимулятора для пользователя персональным компьютером. Проведена предварительная апробация устройства на операторах-добровольцах длительно работающих на персональных компьютерах.

Как и представители многих других профессий, специалисты IT-сферы тоже подвержены определенным профессиональным заболеваниям, напрямую связанным с их профессиональной деятельностью. Ушли в прошлое мониторы на основе электронно-лучевой трубки, стали историей огромные системные блоки с мощными, постоянно гудящими вентиляторами, вместе с ними забыты и опасности работы в непосредственной близости от таких устройств. Работа с

© Драчёв К. А., Савченко В. В., 2018

компьютером стала удобной и безопасной, и многие люди проводят весь свой рабочий день перед монитором персонального компьютера (ПК). Тем не менее, как не парадоксально, но наиболее опасным для человека является самое необходимое для него изобретение прошлого века и одно из самых используемых устройств в современном мире – персональный компьютер. И хотя компания Microsoft утверждает, что они благотворно влияют на здоровье и умственную деятельность человека, большинство ученых считают, что компьютер самое вредное устройство в его окружении.

Казалось бы, за компьютером человек сидит в расслабленной позе, однако она является для организма вынужденной и неприятной: напряжены шея, мышцы головы, руки и плечи, отсюда целый букет заболеваний пользователей ПК таких как:

- синдром сухого глаза
- компьютерный варикоз
- сколиоз и остеохондроз
- тромбоз
- неофобия

Появились и новые «профессиональные» болезни. Так в 2011 году ученые Британской Ассоциации физиотерапии заявили, что человеческое тело не рассчитано на длительную работу за компьютером и постоянное пользование мобильными устройствами, а поэтому следует причислить некоторые болезни к профессиональным заболеваниям. В зарубежной прессе о них пишут: «text neck» (текстовая шея), «smartphone finger» (смартфоновый палец). Есть и много других проблем, напрямую связанных с работой на ПК.

Еще лет десять назад на проблемы с запястьями жаловались в основном профессиональные музыканты и водители со стажем. Сегодня к ним присоединились программисты, веб-дизайнеры, системные администраторы, «геймеры» и офисные работники, проводящие большую часть рабочего времени за компьютером. Запястье прижато к столу, в ладони – мышь, пальцы часами совершают едва заметные глазу однообразные движения – правая кнопка, левая кнопка, скролл. Это прямой путь к синдрому запястного канала (СЗК). Суть его заключается в травме кисти руки, которой мы работаем с мышкой. Поскольку движения мышкой приблизительно одинаковы в течение долгого времени, кости немного «стягиваются», травмируя так называемый срединный нерв. В результате возникают крайне неприятные болевые ощущения в кисти руки: возникают боли в руке, вы чувствуете неудобство, пытаясь поднять предмет, сжатие кулака тоже может сопровождаться болями.

Тянущие боли в области шеи, частая головная боль, бессонница и раздражительность, - эти жалобы типичны для всех активных пользователей компьютеров. Длительное пребывание в статической позе с наклоном головы к монитору ведет к сдавливанию кровеносных сосудов и нервов в шейной области, при этом нарушается кровоток и страдает нервная система.

Работа на компьютере – это серьезная нагрузка на организм. Характерные особенности операций, выполняемых на компьютере, заключаются в однотипных постоянных движениях кистей и пальцев при нажатии на клавиши с целью ввода, поиска, печатания, построения, анализа необходимой информации, изображаемой в текстовой форме на экране монитора под контролем зрения. Следовательно, следующими компонентами трудового процесса при работе на компьютере служат однообразные многократно повторяющиеся нагрузки на руки и постоянное зрительное напряжение, а также нервно-эмоциональное напряжение, связанное с ответственностью за решение выполняемых задач. Постоянное сидячее положение связано со статическим напряжением опорно-двигательной системы пользователя ПК, в связи с поддержкой рабочей позы и пониженной общей двигательной активностью.

К главным проблемам здоровья, с которыми могут сталкиваться не только программисты, но и обыкновенные пользователи, можно отнести: проблемы с позвоночником, проблемы с сердечно-сосудистой системой.

В настоящее время одним из наиболее приоритетных направлений развития отечественного здравоохранения и медицинской науки является профилактическая медицина. Разработка научно обоснованных, эффективных не лекарственных методов коррекции метаболических нарушений, предупреждения, прогрессирования и развития осложнений наиболее распространенных хронических заболеваний является одной из приоритетных задач восстановительной медицины.

Восстановление и поддержание здоровья человека, повышение функциональных резер-

вов и адаптационного потенциала организма, улучшение качества жизни и работоспособности человека является актуальной задачей профилактического и реабилитационного направлений восстановительной медицины. В связи с этим приоритетным направлением является научное обоснование и разработка специальных технологий, применение которых в общей системе оздоровительных мероприятий должно способствовать устранению нарушений регулирующих систем, усилению работоспособности к саморегуляции и повышению защитных механизмов, наряду с целенаправленным воздействием на функциональные нарушения в различных системах организма [1].

Современные технические методы восстановительной терапии при своей реализации преследуют цель, возможность применения при довольно широком круге патологий и максимальную простоту и технологичность применения, особенно в домашних условиях. В настоящее время привлекательными среди населения являются методы электромеханического воздействия на кожную поверхность, в том числе и на рефлексогенные зоны – массаж, электростимуляция.

Электростимуляция мышц является одним из способов физиотерапевтического воздействия, направленного на восстановление функции тканей, особенно мышц и нервов [2].

Электростимуляция мышц – это процедура, в которой используется импульсный ток для того, чтобы восстановить работу тканей, органов и систем, в том числе нервной части мышц, которые утрачивают свое естественное функционирование после болезней или же длительного пребывания в неподвижном состоянии или неудобной позе. Приборы электростимуляции считаются особо важными и значимыми в лечении и профилактике для восстановления работы нервной системы до оптимального состояния, а также если есть заболевания, которые могут привести к ограниченному движению, понижению сил и гипотрофии мышцы. Стимуляция мышечной ткани проводится при помощи направленного возбуждения и сокращения определенной группы мышц, причем осуществляется это одновременно, чтобы усилить обменно-трофические процессы.

Электростимуляция считается отличным способом улучшить кровообращение, усилить синтез нуклеиновых кислот организма, что особо важно для нормального функционирования организма. При помощи электростимуляции восстанавливаются или улучшаются сниженные трофические функции нервных волокон, улучшается процесс иннервации мышц, их сократимость. Следует отметить очень хорошую эффективность электростимуляцию мышц спины при длительном неподвижном состоянии или длительной неудобной позе. Мышцы спины во время процедур восстанавливают бывшую силу, устойчивость к нагрузке [3].

Существует большая группа аппаратов для массажа и электростимуляции, которые можно использовать в домашних условиях. В данной статье мы остановимся на описании работы и основных принципах использования электромузыкального массажера для пользователя персональным компьютером.

Известно, что для людей длительно находящихся во время работы в фиксированных позах наиболее эффективным средством поддержания и восстановления здоровья является массаж. Среди различных видов массажа наиболее привлекательным является динамический электромассаж – динамическая электро-нейростимуляция (ДЭНС) [4].

В этом методе универсальным раздражителем является электрический ток, который возбуждает ткани организма и вызывает возникновение потенциалов действия в любых типах периферических нервных рецепторах и волокнах.

На сегодняшний день существует несколько модификаций аппаратов для ДЭНС, отличающиеся набором частотных характеристик и дополнительными возможностями электропунктурой диагностики. Однако все они характеризуются тем, что частота импульсного тока стимуляции выбирается априорно.

Предлагаемая нами идея предусматривает разработку устройства для динамической электростимуляции пользователя персональным компьютером в процессе работы и создания мелкосерийного производства этого устройства.

Отличительной особенностью этого устройства является то, что частота следования стимулирующих импульсов управляется звуковым сигналом видео музыкального произведения. Поэтому терапевтическое воздействие осуществляется одновременно по трем информационным рецепторным каналам – рефлексогенному, аудио и зрительному.

Динамический электронейростимулятор для пользователя персональным компьютером состоит из двух компонент – стандартной акустической стереофонической системы для персонального компьютера и вмонтированного в нее устройство для электростимуляции (рис. 1).

Рис. 1. Общий вид устройства

Устройство позволяет пользователю во время длительной работы на ПК периодически проводить восстановительную электронейростимуляцию, параметры которой определяются музыкальным произведением.

Блок-схема устройства для динамической электростимуляции представлена на рисунке 2. Сигнал звукового сопровождения преобразуется в электрические импульсы, частота следования которых меняется в соответствии с частотой сигнала звукового сопровождения. Амплитуда стимулирующих импульсов подбирается согласно субъективным ощущениям пользователя.

Электромузыкальный массажер для пользователя персональным компьютером состоит из двух компонент – стандартной акустической стереофонической системы для персонального компьютера и вмонтированного в нее устройством для электромузыкального массажа. Аудиосигнал с выхода персонального компьютера одновременно поступает на вход усилителя стереофонической акустической системы (1 на рис. 2) и на вход усилителя-формирователя 3 управляемого электростимулятора. Сформированный сигнал поступает на ждущий мультивибратор 4, который генерирует прямоугольные импульсы постоянной длительности ($2 \cdot 10^{-4}$ с) с частотой основных гармонических составляющих аудиосигнала. После усилителя мощности 5 сигнал поступает на импульсный трансформатор 6. Импульсы постоянной длительности - и амплитуды поступают на адгезивные самоклеящиеся электроды 7, закрепленные на кожной поверхности оператора. Вторичная обмотка импульсного трансформатора и импеданс кожи человека образуют RLC-цепь формирующую огибающую стимулирующего импульса.

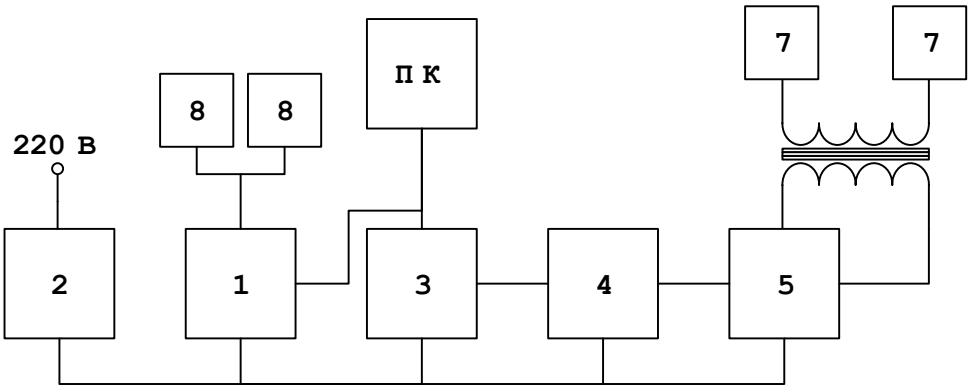


Рис. 2. Схема устройства для динамической электростимуляции [5]:
1 – стандартный усилитель акустической системы; 2 – блок питания акустической системы; 3 – усилитель-формирователь; 4 – ждущий мультивибратор; 5 – усилитель мощности; 6 – импульсный трансформатор; 7 – адгезивные электроды; 8 – акустические преобразователи (динамики)

Выходной сигнал поступает на стимулирующие адгезивные накожные электроды, которые располагаются в области рефлексогенных зон на теле человека – пользователя ПК. Применение устройства для проведения восстановительного электромассажа мышц шеи, спины, поясницы, рук и ног во время работы на персональном компьютере, значительно уменьшает вероятность возникновения профессиональных заболеваний «сидячего положения».

Предварительная апробация устройства на операторах-добровольцах длительно, работающих на персональных компьютерах и страдающих дегенеративно-дистрофическими и травматическими заболеваниям опорно-двигательного аппарата, показала не только его высокую эффективность (40-80%), но и значительное повышение психоэмоционального состояния сотрудников.

Следует отметить, что использование электронейростимулятора не требует специального обучения, заметно сокращает сроки реабилитации, сокращает материальные затраты на восстановительное лечение.

Подводя итоги вышеперечисленного, следует сказать, что электростимуляция является достаточно безопасным средством профилактики самых разных поражений органов, которые утрачивают свое естественное функционирование после болезней или же длительного пребывания в неподвижном состоянии или неудобной позе.

Одним из важнейших плюсов метода является и возможность использования в домашних условиях.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Диагностические и оздоровительные технологии восстановительной медицины. Многотомный каталог-справочник / Под ред. член-корр. РАМН А. Н. Разумова. М.: Альянс-Инвест, 2003, 304 с.
2. Васичкин И. Н. Васичкина Л. Н. Методика массажа. М.: ЭКСМО, 2004, 384 с.
3. Калакутский Л. И., Акулов С. А., Федотов А. А. Системы электростимуляции органов и тканей: учебное пособие. Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. ун-та, 2012, 91с.
4. Жукова В. Ю., Лобанов Ю.Ф. Применение динамической электронейростимуляции в медицине /Физиотерапия, бальнеология и реабилитация, №1, 2012, с.42-44.
5. Воропаев С. Ф., Драчев К. А. Электромузыкальный массажер для пользователя персональным компьютером: патент на полезную модель RUS 93280 от 20.08.2008.

ОРГАНИЗАЦИЯ ПЕРИОДИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА НА УСТРОЙСТВАХ АВТОМАТИКИ И ТЕЛЕМЕХАНИКИ С ПОМОЩЬЮ ТЕПЛОВИЗИОННОГО КОНТРОЛЯ

А. А. Жвикова[1], В. Н. Овчарук[2]

[1]ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
[2]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: ovaler@ya.ru

В статье рассмотрены результаты тепловизионного контроля устройств автоматики и телемеханики на ж.д. транспорте. описывается разработанная с помощью среды программирования LabVIEW программа обработки информации получаемой с помощью тепловизора. Определены опасные и часто подверженные отказам устройства автоматики и телемеханики. Проанализированы результаты постоянного и периодического мониторинга и его реализация на устройствах автоматики и телемеханики.

Тепловой контроль – является одним из методов неразрушающего контроля, основанный на анализе температурных характеристик без вывода из строя или демонтажа контролируемого устройства. В настоящее время тепловизионный контроль широко распространен в медицине, строительстве, промышленности и во многом другом, ведь, главным преимуществом является поэлементная и общая диагностика устройств без его выключения и демонтажа.

. Именно это и является главным преимуществом тепловизионного контроля. Средство, с помощью которого происходит сбор информации с объекта, является тепловизор.

Для определения температурных характеристик устройств автоматики и телемеханики на железнодорожном транспорте используется тепловизор Testo 881-1. Тепловизор внедрен взамен прибора «Кельвин» около 3 лет назад. В настоящее время персонал не знает всех преимуществ работы с тепловизор и пользуется им редко. Но если использовать все функции тепловизора и дополнить определенными программными обеспечениями и методами использования, то можно намного уменьшить отказы в устройствах и сократить время персонала на анализ и обработку термограмм. Для обработки и анализа разработана рабочая программа, которая облегчит работу персоналу и возможна мониторинга устройств.

Рабочая программа разработана в среде программирования NI LabVIEW 2013 для анализа и обработки информации получаемой с помощью тепловизора. Так же она может использоваться для постоянного мониторинга устройств автоматики и телемеханики. На рис. 1. представлена лицевая панель рабочей программы.

Лицевая панель состоит из 3 блоков и 2 графиков интенсивности. Блок параметров объекта состоит из данных, которые вводятся для каждого устройства исходя из технологической инструкции [1, 2] и тепловых характеристик исследуемого объекта. Такие данные как предельная температура, отклонение, которое можно характеризовать, как предотказное состояние объекта и ссылки на текстовый файл с термограммой и документ, куда идет запись отчета. Блок результатов обработки состоит из основных параметров, из которых формируется отчет о проведенных измерениях. Это максимальные значения на графиках интенсивности, индексы максимальных значений, массивы значений, размеры массивов, количество точек превышения и точек в норме. Индикация визуально показывает состояние исследуемого объекта. Зеленая лампочка в пределах нормы – есть какое то превышение, но оно находиться в пределах нормы и характеризуется как помеха или предотказное состояние. Красная лампочка выше нормы – характеризуется как неисправность и требует уже принятие мер по исправлению. Термограмма – это массив данных с тепловизора в виде массива. Усредненная термограмма – устраняет помехи и определяет область неисправных температур.

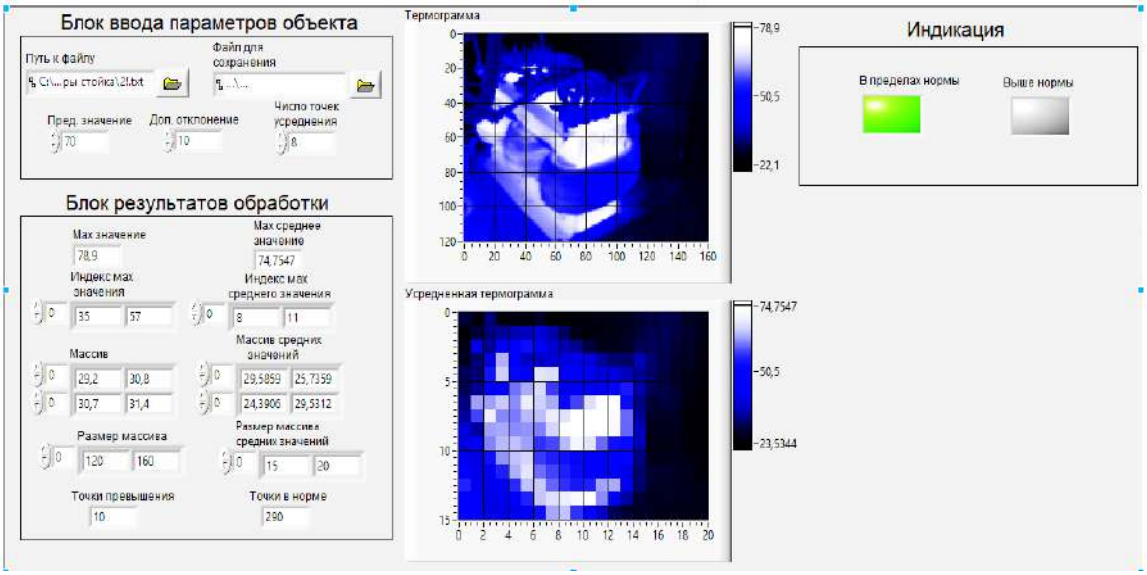


Рис. 1. Лицевая панель рабочей программы

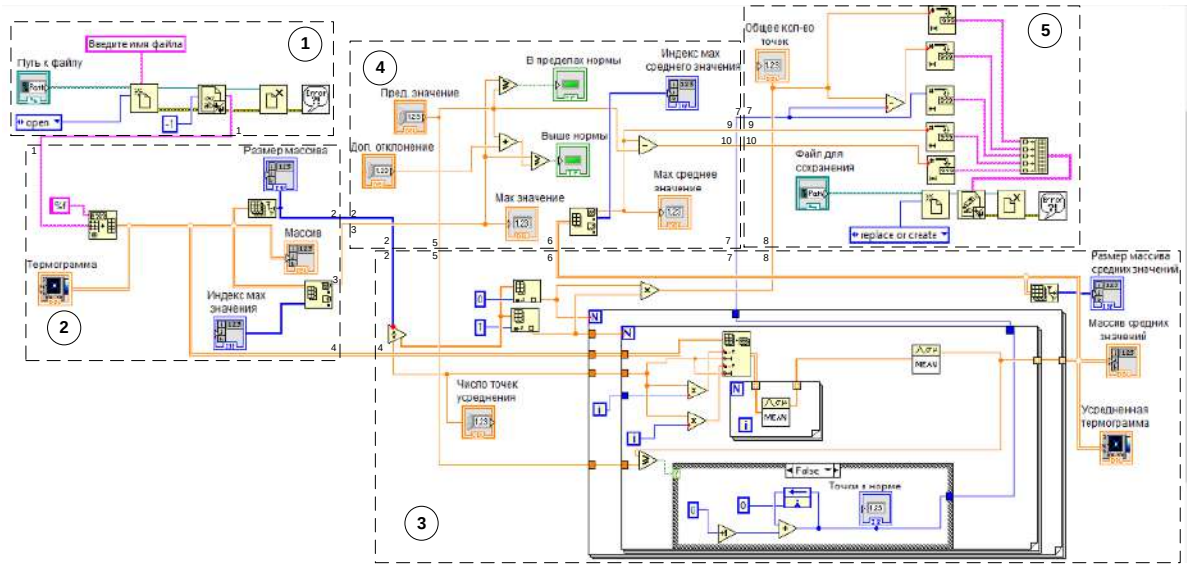


Рис. 2. Блок-диаграмма рабочей программы

Блок-диаграмма рабочей программы представлена на рис. 2., которая разделена на 5 частей:

1 – «считывание с файла», выполняет функции считывания с файла информации, в случае если данное значение пустое, то выдается ошибка;

2 – «преобразования», преобразовывает в массив файл термограммы. С массивом легче проводить, какие либо операции по обработке, потому что данные представлены более точно в каждой точке и видно любое превышение нормы;

3 – «усреднение» – выполняет функцию усреднения и создания усредненной термограммы;

4 – «индикация» – функция сравнения максимальных температур с предельными значениями температур и оповещение в случае ложного значения;

5 – «запись в файл» – формирование отчета, который состоит из максимальных температур, точек превышения и т. д.

Рабочая программа упрощает работу персоналу, сокращает время на обработку и анализ термограмм, получаемых с тепловизора. Среда программирования, в которой разработана программа, проста и легка в своем управлении, что дает еще одно преимущество, как то, что для работы в ней не требуется специальный человек, который специально обучен для работы с программой.

Перед началом работы проверяется температура окружающей среды в помещении, так как многие показатели сравниваются исходя из температуры в помещении. Работа выполняется бригадой, состоящей не менее чем из двух работников – старшим электромехаником и постовым электромехаником. Члены бригады должны быть проинструктированы в установленном порядке, а так же ознакомлены с инструкцией по работе с тепловизором. Место должно быть освещено или, при недостаточном свете, используются световые лампы. Измерения температуры объектов производятся на расстоянии от объекта измерений в пределах 0,3 – 2,5 метра, а исходя из марки тепловизора и его минимального фокусного расстояния, можно сократить до 0,1 м. Важно измерять собственное излучение обследуемого объекта, которое связано с наличием и степенью развития неисправности. При пользовании лазером для наведения на измеряемую поверхность категорически запрещается наводить лазерный целеуказатель на людей и на зеркальные поверхности во избежание попадания луча лазера в глаза.

Перед началом работы переводим (если это требует программа) термограммы в текстовый формат. Формат термограмм, так как использовался тепловизор Testo 881-1, то и термограммы получались в формате .bmt. Файл с расширением .bmt может быть запущен только некоторыми программами. Вполне возможно, что .bmt являются файлами данных, а не документы или средства массовой информации, что означает, что они не предназначены для просмотра на всех. В комплекте с тепловизор идет установочный диск с записанной на нем программой IRSoft позволяющий открыть термограммы такого расширения. Картинки термограмм можно

представить в виде тестового файла, как массив с температурными показателями в разных точках. В среде программирования LabVIEW с таким массивом легче производить обработку, поэтому из формата .bmt в программе IRSoft преобразуем в текстовый файл Excel, который считывается в рабочую программу и записывается в виде массива данных, а так же в виде строки и графика интенсивности. Массив обрабатывать намного легче, чем графики и поэтому нужно преобразование в массив, для точности анализа и обработки данных.

В Блок данных заносим значения проверяемого оборудования (элемента) и текстовый файл в который нужно записать отчет по проведенной работе и нажимаем запуск программы. Значение усреднения ставим от 5 до 10. Если индикация загорается, значит на усредненной термограмме находим точку превышения и ее местоположение на реальной картинке. Проанализировав превышение температуры и количество точек превышающих температуру, можно отнести к какой неисправности относится данное превышение:

- если превышение на 5 – 10°С и при усреднении равному 5 и более нет точек превышения, то данное превышение можно считать допустимым или помехой;
- если превышение на 10 – 20°С и при усреднении от 5 до 12 есть две или более точки превышения, то это предаварийное состояние объекта и требует осмотра постового электромеханика на наличие каких либо неисправностей;
- если превышение более 30°С и точки превышения есть от значения 10 и более, то это аварийное состояние и требует незамедлительного устранения проблемы.

О проведении и анализе делается запись в Журнал и прикладывается листок с текстовым документом с рабочей программы. С помощью данной программы уменьшается время обработки и анализа с 20 мин на 4 минуты, что является экономически эффективно и целесообразно. Так же нет сокращения штата, но сокращается рабочего времени и исключается человеческий фактор. Остается решить проблему с периодичностью измерений для каждого устройства и возможность внедрения постоянного мониторинга.

Применение постоянного мониторинга с помощью тепловизора целесообразно только на устройствах, которые чаще всего подвергаются перегреванию. К таким устройствам можно отнести обмотки трансформаторов, контактные соединения предохранителей, проволочных резисторов, зарядных устройств, межэлементные соединения аккумуляторных батарей и тд. Для того, что бы отследить динамику температур нужно проводить измерения в течение нескольких дней непрерывно. Не у многих тепловизоров есть столько заряда аккумулятора без сети. Поэтому нужно использовать тепловизор с меньшими характеристиками картинок и больше зарядом аккумулятора.

Для постоянного мониторинга требуется специальное оборудование, а именно тепловизионные камеры. Исследуя рынок данного оборудования можно выделить несколько камер, которые подходили бы как по характеристикам, а именно диапазоном температур и минимальным фокусным расстоянием. Если ставить такую камеру напротив стоек питания, то нужно учитывать, что они должны быть постоянно открытыми, что может сказаться на безопасности постовых электромехаников. А ставить камеру напротив каждого статива, очень дорогостояще, поэтому на данном этапе внедрения тепловизионного контроля не выгодно. Но рассмотрим варианты данного внедрения.

Постоянный мониторинг стоит проводить на устройствах, которые находятся в предаварийном состоянии и при устранении внешних факторов, влияющие на повышение температуры (к примеру, загрязнение контактных соединений) все равно находятся в данном состоянии. Так же постоянным мониторингом можно контролировать обмотки трансформатора, которые чаще всего подвержены перегреванию, но для этого нужно использовать тепловизор который может поместиться в стойку питания, потому что оставлять стойку открытой постоянно является нарушением охраны труда и может повлиять на работу персонала.

Для внедрения постоянного мониторинга на устройства автоматики и телемеханики нужно конструктивно менять расположение объектов контроля или внедрять на новых станциях на этапе отладки. Тогда затраты будут минимальными, а эффект от внедрения будет приносить пользу и сокращение отказов.

Вариант периодического мониторинга для наблюдения за динамикой повышения или уменьшения температуры является самым объективным и по экономическим характеристикам

подходит для внедрения на железнодорожной автоматике и телемеханике. На данный момент нет определенных временных норм для проведения периодического мониторинга, поэтому для каждого устройства СЦБ нужно определить разное время проведения измерений с помощью тепловизора. Для этого требуется больше информации по времени на нагревание и до отказа.

Если отойти от тепловизионного контроля и использовать тепловой контроль, то возможно применение термопар и датчиков тока для реле. Для этого варианта контроля не требуется конструктивных изменений и экономически намного дешевле, но напомню, что главное преимущество тепловизионного контроля – это наблюдение дистанционно, без выключения и выхода из строя исследуемых объектов.

У каждого варианта есть свои плюсы и минусы, но внедрение любого из тепловых методов контроля улучшит работу исследуемых устройств и сократит отказы на железнодорожном транспорте, а это главное преимущество внедрения.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Технико – нормировочной карте № ТНК ЦШ 0526-2016 «Установки электропитания. Проверка степени нагрева оборудования силовых электрических цепей». Разработал: Отделение автоматики и телемеханики ПКБ И. филиал ОАО РЖД. 2016. 8 с.
2. Технологическая инструкция «Измерение температурного режима работы аппаратуры железнодорожной автоматики и телемеханики с помощью тепловизора» (технологическая карта № 11.1.2.1). Сборник технологических карт Часть 1. ПКТБ ЦШ ОАО «РЖД». 2010 г.
3. Суранов А. Я. LabVIEW 7: справочник по функциям. М.: ДМК Пресс. 2005. 512 с.
4. Овчарук В. Н. Современные средства автоматизации физического эксперимента. Средства программирования LabView : учеб. пособие. Хабаровск: Изд-во ТОГУ. 2011. 255 с.
5. Жвикова А. А., Овчарук В. Н. Использование методов тепловизионного контроля устройств автоматики и телемеханики на железнодорожном транспорте: сборник научных трудов. Современные проблемы радиоэлектроники: Красноярск: СФУ. 2018. С 147-151.

АВТОМАТИЗАЦИЯ ИЗМЕРЕНИЯ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ПОРОШКОВЫХ ФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ С РАЗНОЙ СТЕПЕНЬЮ ДИСПЕРСНОСТИ

А. В. Зайцев, К. С. Макаревич, О. И. Каминский, Е. А. Кириченко

ФГБУН «Институт материаловедения» ДВО РАН,
Хабаровск, e-mail: alex-im@mail.ru

В представленном исследовании показаны технические и научные проблемы, возникающие при изучении гетерогенного фотокаталитического процесса порошковых композиций при стандартном фотокалориметрическом способе измерения оптической плотности модельного органического красителя. Описан способ их решения посредством разработки методики измерения фотокаталитического процесса при объединении реакционной и измерительной ячейки в рамках одного устройства. Разработанная автоматизированная установка и предложенная методика исследования опробованы на модельных и реальных фотокатализаторах имеющих различную степень дисперсности. Проведены сравнительные исследования со стандартным фотокалориметрическим методом.

Введение. В настоящее время фотокаталитические процессы вызывают большой научный и практический интерес, за счет возможности их использования для систем самоочистки от вредных органических загрязнителей в растворах и газовой фазе [1]. Исследование фотокаталитических процессов с применением водного раствора субстрата модельного органического загрязнителя и порошкообразного фотокатализатора основано на фотоколориметрических [2-4] или хроматографических [5-6] методах. Указанные методы подразумевают обязательное проведение определенных подготовительных и измерительных этапов, а именно: 1.

© Зайцев А. В., Макаревич К. С., Каминский О. И., Кириченко Е. А., 2018

Запуск, градуировка, подержание в рабочем состоянии анализирующего прибора; 2. Отбор пробы раствора субстрата с катализатором; 3. Отделение катализатора от раствора субстрата путем центрифугирования; 4. Анализ на фотоэлектрокалориметре оптической плотности раствора субстрата; 5. Возвращение раствора субстрата и катализатора в реакционную систему. Каждый из описанных этапов характеризуется определенным временным промежутком, сумма которых определяет минимальное время между экспериментальными точками на графиках кинетики исследуемого процесса. Известно, что для достоверного изучения работы фотокатализатора одновременно с исследованием фотокаталитического процесса (на свету) необходимо проводить параллельные исследования саморазложения исследуемого субстрата без фотокатализатора и исследования по химическому или сорбционному взаимодействию субстрата с фотокатализатором в условиях отсутствия фотостимулирующего излучения (в темноте). Таким образом, в условиях параллельных измерений относительно времени, общее время между экспериментальными точками при исследовании одного фотокатализатора увеличивается в три раза. Использование минимальной 3-х кратной повторности для проверки воспроизводимости исследуемых процессов фотокатализа, саморазложения субстрата и сорбции также троекратно увеличивает время приборного анализа в случае фотокалориметрического метода. Перспективным вариантом решения описанных технических и научных проблем является автоматизация процесса исследования путем совмещения реакционной и измерительных ячеек в рамках одного устройства.

Целью данной работы является автоматизация исследования фотокаталитического процесса и разработка методики исследования при объединении реакционной и измерительной ячеек.

Конструкционные особенности экспериментальной установки. Согласно обзору литературы наиболее распространенными субстратом для исследования процесса фотокатализа является органический краситель метиленовый синий [7] (МС). Наиболее распространенным методом анализа снижения концентрации окрашенного раствора субстрата под действием фотокатализатора является фотокалориметрический метод. На основе максимальной линии поглощения в спектре МС равной 670 нм в качестве источника света был выбран лазерный модуль HLM1230 с постоянной длинной волны 650 нм и выходной электрической мощностью 5 мВт. Данное значение мощности лазерного модуля было выбрано исходя из возможности просвечивать замутненный порошком фотокатализатора раствор с одной стороны и отсутствием влияния лазерного излучения большой мощности на разложение МС с другой стороны. Анализ изменения оптической плотности МС в процессе фотокатализа осуществлялся с помощью фоторезистора VT90N2. Равномерное и воспроизводимое поддержание порошка фотокатализатора в близи поверхности водного раствора является одной из главных задач в исследовании процесса гетерогенного фотокатализа. В тоже время каждый фотокатализатор характеризуется индивидуальными гранулометрическими характеристиками, плотностью, гидрофобностью, либо гидрофильностью, плавучестью. В условиях проведения измерения фотокаталитического процесса описанные физические свойства порошка начинают оказывать значительное влияние на достоверность и воспроизводимость научных результатов. Решением данной проблемы для гетерогенных условий в конструкционом плане стало использование колебательно поршневого механизма. Перемешивание водного раствора в условиях гомогенных процессов осуществляется с помощью магнитной мешалки посредством инертных фторопластовых магнитных якорьков. Одной из главных задач фотокатализа является превращение энергии солнечного излучения в полезную работу фотокатализатора по разрушению органических загрязнителей. В качестве источника фотостимулирующего излучения были использованы металлгалогеновые лампы наиболее приближенные по спектральным характеристикам к спектру солнечного света в видимой области. В связи с невозможностью быстрого старта металлгалогеновых ламп после выключения и необходимостью затемнения при измерени фотокалориметрическим методом, в конструкции экспериментальной установки реализована автоматическая светоизолирующая заслонка.

Методика исследования. Измерение фотокалориметрическим методом параметров фотокаталитического процесса имеет ряд особенностей, учет которых необходим перед проведением экспериментальных исследований (подготовительный этап). К там особенностям относятся:

• Поиск эффективных величин объема каталитической системы, массы фотокатализатора и концентрации субстрата.

• Достижение равновесия между скоростью оседания и перемешивания частиц фотокатализатора в растворе субстрата для мелкодисперсных (рис. 1а) и крупнодисперсных порошков (рис. 1, б)

Подготовительный этап

Важным моментом подготовительного этапа является выбор объема раствора, интервала масс навески фотокатализатора и концентрации МС в растворе позволяющих достоверно проводить измерения. Выбор данных параметров должен основываться на следующих положениях:

• **Объем раствора** не должен быть меньше (больше) величины необходимой на эффективное функционирование механических и измерительных частей прибора. Интервал возможных к применению объемов раствора для экспериментальной установки составил от 300 до 450 мл.

• **Масса навески фотокатализатора** внесенного в процессе перемешивания не должна быть более величины приводящей к затемнению фоторезистора VT90N2 на 30% от величины его максимального значения. Интервал возможных к применению навесок фотокатализатора в зависимости от его дисперсности плотности плавучести составил от 25 до 600 мг.

• **Концентрация субстрата (МС)** внесенного вместе с порошком фотокатализатора в процессе перемешивания не должна быть более величины приводящей к затемнению фоторезистора VT90N2 на 95% от величины его максимального значения. Минимальная концентрация субстрата не должна быть менее величины приводящей к затемнению фоторезистора VT90N2 на 40% от величины его максимального значения. Интервал возможных к применению концентраций МС составляет от 0,5 до 1,2 гр/л.

Этап градуировки

Градуировка каждой ИФЯ осуществляется в полуавтоматическом режиме перед каждым фотокаталитическим исследованием путем последовательного введения 6-ти доз раствора МС известной концентрации с последующим построением зависимости оптической плотности (1) водного раствора субстрата от концентрации МС.

Этап измерения

В соответствии с элементами интерфейса ПО выбирается дискретность измерения концентрации МС (от 0,5 до 10 минут) и общая продолжительность процесса фотокатализа (сорбции).

а)

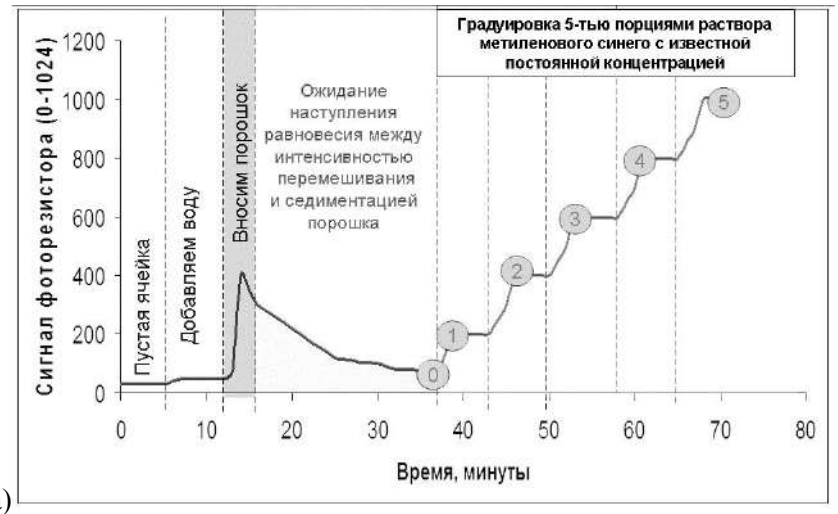
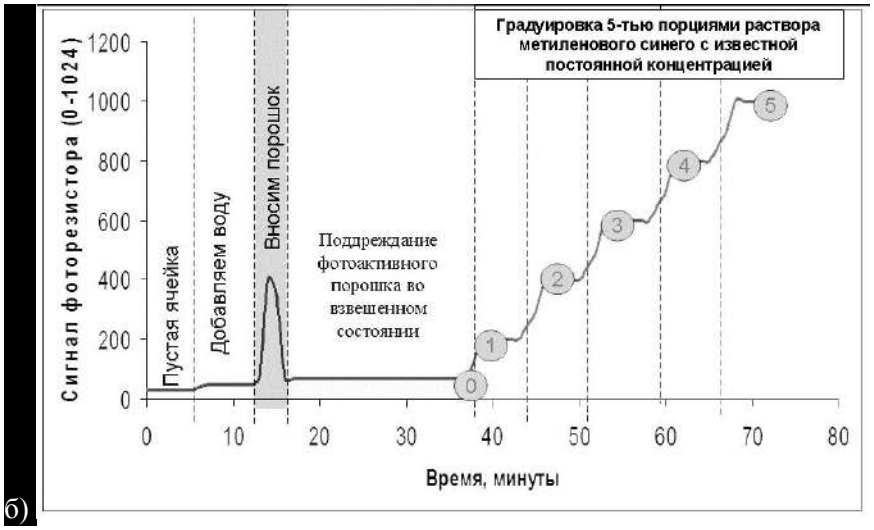


Рис. 1. Методика исследования фотокаталитического процесса с использованием экспериментальной установки при внесении пробы мелкодисперсного (а) и крупнодисперсного порошка (б)



Окончание рис. 1

Сравнение результатов исследования фотокаталитической активности оксида титана с использованием экспериментальной установки с аналогичным измерением проведенном с использованием центрифуги и фотоэлектрокалориметра приведены на рис. 2. Применение автоматизации при измерении оптической плотности модельного загрязнителя в условиях объединения реакционной и измерительной ячейки дает возможность получения высоко дискретной по времени кинетической кривой исследуемого процесса. Большая дискретность экспериментальных точек позволяет проследить отдельные стадии фотокаталитического процесса (рис. 1), которые не видны, либо слабо различимы при использовании стандартного фотокалориметрического метода. Точность измерения фотокаталитического процесса с использованием экспериментальной установки и предложенной методики не уступает аналогичным измерениям на фотоэлектрокалориметре (рис. 1).

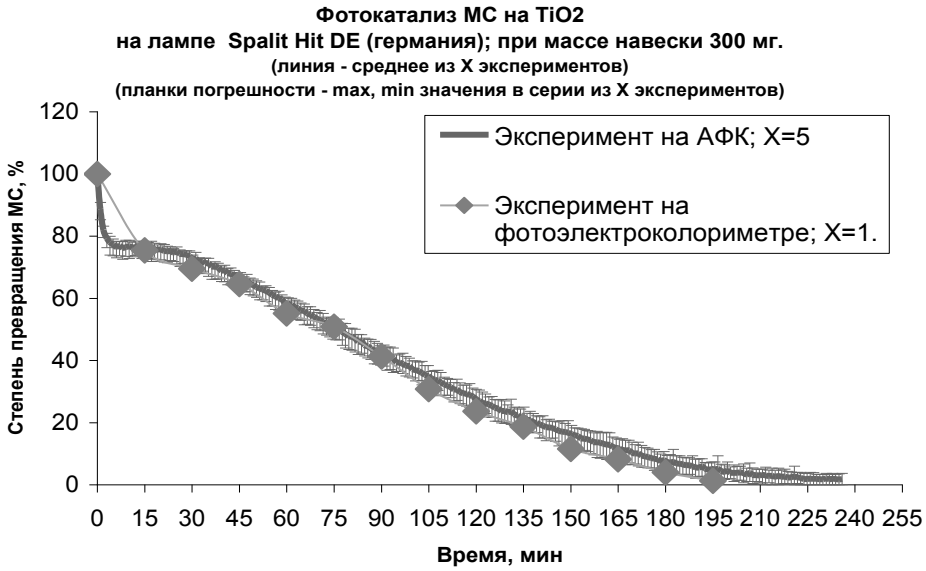


Рис. 2. Сравнение фотокаталитической активности оксида титана при использовании экспериментальной установки с аналогичным экспериментом на фотоэлектрокалориметре

Заключение. Автоматизация исследования гетерогенного фотокаталитического процесса в устройстве с объединенной реакционной и измерительной частями позволяет: получать кинетические зависимости фотокаталитических процессов с минимальными инструментальными погрешностями и трудозатратами исследовательского персонала; уменьшать временную дис-

кретность между экспериментальными точками кинетических кривых фотокатализа; использовать источники фотостимулирующего излучения с разными спектральными характеристиками; использовать порошки фотокатализаторов с различной степенью дисперсности; учитывать процессы сорбции и саморазложения субстрата; исследовать процессы не связанные с фотокаталитическими (осаждения порошков, растворения красителей, выделения или растворения осадков).

Благодарности. *Работа выполнена при поддержке гранта Правительства Хабаровского края - договор № 1191/2018Д от 28.06.2018г.*

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Артемьев Ю. М., Рябчук В. К. Введение в гетерогенный фотокатализ. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 1999. 304 с.
2. Xiaoming Gao , ZihangWang, Xiang Zhai, FengFu, Wenhong Li The synthesize of lanthanide doped BiVO4 and its enhanced photocatalytic activity //Journal of Molecular Liquids 211 (2015) 25-30.
3. Xueyan Li, Renjie Zheng, Qingzhi Luo, Desong Wang, Jing An, Rong Yin, Yanyan Liu, Di Wu, Xiaomin HanCyclized polyacrynitrile modified Ag3PO4 photocatalysts with enhanced photocatalytic activity under visible-light irradiation//Applied Surface Science 356 (2015) 941-950.
4. Rui Li, Xiaoya Gao, Caimei Fan, Xiaochao Zhang, Yawen Wang, Yunfang Wang facile approach for the tunable fabrication of BiOBr photocatalystswith high activity and stability//Applied Surface Science 355 (2015) 1075-1082.
5. Алексеев И. С., Миклис Н. И. Исследование свойств фотокаталитических нанопокрытй TiO2 по очистке воздуха от паров органических растворителей // Вестник Витебского государственного технологического университета . 2013. № 24.
6. Xin Liao, Jianjun Chen , Mingming Wang, Zhaoxiang Liu , Lijuan Ding , YeLi Enhanced photocatalytic and photoelectrochemical activities of SnO2/SiC nanowire heterostructure photocatalysts //Journal of Alloys and Compounds 658 (2016) 642-648.
7. Randeep Lamba, Ahmad Umar, S.K. Mehta, Sushil Kumar Kansal ZnO doped SnO2 nanoparticles heterojunction photo-catalyst forenvironmental remediation//Journal of Alloys and Compounds 653 (2015) 327-333.

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ВОДНОЙ СРЕДЫ НА СТРУКТУРУ ПРИНИМАЕМОГО СИГНАЛА В ГИДРОАКУСТИЧЕСКОМ КАНАЛЕ СВЯЗИ

И. С. Захаров, Г. В. Жиба, С. В. Сай

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»,
г. Хабаровск, e-mail: zakharovivansergeevich@gmail.com

В статье рассматривается влияние водной среды на распространение акустических волн. Приводятся закономерности изменения структуры сигнала для гидроакустического канала связи при распространении в водной среде.

Целесообразность использования акустических средств связи в водной среде обуславливается относительно малым поглощением в ней акустических волн в сравнении с другими технологиями связи, однако, одновременно с этим представляет определённые сложности, связанные с изменением структуры волн, что влечет непосредственное влияние на принимаемый сигнал.

Данная работа ставит целью анализ распространения акустических волн в водной среде, особенностей их поглощения и рассеивания в сочетании с рассмотрением свойств акустических шумов и помех, предполагается, что результаты проведенного анализа позволят повысить эффективность имеющихся у автора наработок в части конструкций помехоустойчивых кодов на основе кодов Рида-Соломона, применительно для гидроакустических каналов связи [1, 2, 3, 4].

© Захаров И. С., Жиба Г. В., Сай С. В., 2018

При распространении акустических волн в водной среде, полезный сигнал можно охарактеризовать сопутствующим ослаблением, задержкой по времени и искажением. На скорость распространения сигнала оказывают влияние показатели солености, температуры и гидростатического давления, напрямую зависящие от глубины водной среды, также данные факторы оказывают влияние на направление распространения волн. Проведенные во второй половине XX-века исследования показали, что коэффициент пространственного затухания на частотах менее 100 кГц в морской воде выше, чем в пресной в 2-3 раза.

Отражение акустических волн от границ морской среды с атмосферой и донной поверхностью приводит к потерям интенсивности волны. Величина потерь при отражении акустических волн от границ сред «вода-воздух» тем выше, чем сильнее искажение водной поверхности, акустические импедансы у морской воды и донных осадков существенно ниже, однако процесс отражения от морского дна значительно сложнее, ввиду сильно выраженной неоднородности донных поверхностей.

Как итог, представленные факторы оказывают непосредственное влияние на временные, спектральные, а также энергетические характеристики передаваемых сигналов.

В водной среде интенсивность распространяемой акустической волны убывает по мере удаления от источника сигнала по причине расширения ее фронта, убывание протекает по степенному закону, а также поглощения и последующего рассеивания ее энергии, в данном случае убывание происходит по экспоненциальному закону [5].

Потеря интенсивности акустической волны в дБ в зависимости от расстояния имеет вид:

$$\ddot{I} = 10\lg\left[\frac{I_0}{I(r)}\right] = 20\lg(r) + 10\lg\left(e^{br}\right) = 20\lg(r) + \alpha r/10^{-3}, \quad (1)$$

где r – расстояние между источником и приемником; b – коэффициент пространственного затухания; e – основание натурального логарифма.

Таким образом, можно говорить о том, что: 1) для увеличения дальности связи необходимо уменьшение средней частоты сигнала (в реальных условиях, когда распространение волны является цилиндрическим, потери стремятся к *10lg(r)*); 2) широкополосный сигнал получает сильные искажения при прохождении через морскую среду (высокочастотные составляющие имеют большее ослабление, чем низкочастотные) [6].

Как было отмечено выше неоднородности температуры и давления в морской воде на разных глубинах приводят к изменению значений распространения скорости звука. На рисунке 1 приводятся типовые профили распространения скорости звука в зависимости от глубины [5].

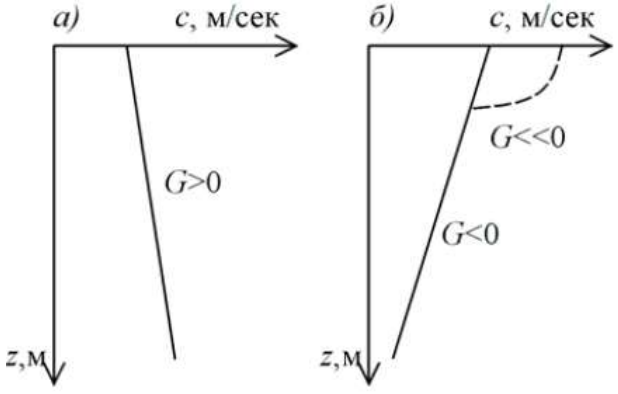


Рис. 1. Типовые профили скорости звука в зависимости от глубины

Рис. 1, а показывает профиль, характерный для высоких широт в зимнее время года. В данный период температура воды близка к нулю и не оказывает влияния на скорость звука при изменениях значений глубины распространения. Однако, наблюдается зависимость от давления: скорость звука повышается с увеличением глубины. Такой же профиль скорости звука характерен и для приповерхностных слоев во время или после шторма, когда вода в приповерхностном слое перемешивается, и он становится изотермическим.

Рис. 1, б представляет профиль скорости звука, характерный для мелких морей в летнее

время года, когда основной или сезонный термоклин простирается до дна. Значение градиента скорости звука отрицательное и способно достигать значений, до $G = -0{,}2^{-1}$с и более. При этом для некоторых прибрежных вод характерно появление в летнее время в приповерхностном слое водорослей и планктона. Данный факт приводит к скачкообразному увеличению значения градиента скорости звука до $G = -10^{-15}c$, пунктирная линия на рисунке, хотя в общем можно говорить о случайном характере данного фактора и рассматривать его влияние в частном порядке для каждого конкретного случая [5].

Рассмотрим затухание сигнала в водной среде с учетом показателей вязкости и теплопроводности. Затухание акустических волн в данном случае будет происходить по экспоненциальному закону. Плоская монохроматическая волна на частоте ω при распространении ее в водной среде имеет давление на дистанции r , уменьшающееся по закону [8]:

$$p(r, \omega, \psi) = p_0 \exp(-\delta_r(\omega, \psi) r), \quad (2)$$

где $\delta_r(\omega, \psi)$ – пространственный коэффициент затухания волны на частоте ω, показывающей удельное затухание по давлению для фиксированных параметров среды ψ, [м$^{-1}$]; p_0 – давления в исходной точке, где r=0.

Суммарный коэффициент поглощения, учитывающий вязкость и теплопроводность среды, на частоте ω описывается выражением [9] :

$$\delta_r(\psi) = \frac{\omega^2}{2\rho(\psi)(\mathrm{c}_v(\psi))^3}\left[\frac{4}{3}\eta(\psi) + \zeta(\psi) + \chi(\psi)\left(\frac{1}{\mathrm{C}_V(\psi)} - \frac{1}{\mathrm{C}_P(\psi)}\right)\right], \quad (3)$$

где $\rho(\psi)$ – плотность морской воды, является функцией температуры и давления [кг/м^3]; $\mathrm{c}_v(\psi)$ – скорость звука в воде, и определяется как $\mathrm{c}_v(\psi) = \sqrt{\frac{\mu}{\rho(\psi)}}$; μ- объёмный модуль упругости, [Па]; $\eta(\psi), \zeta(\psi)$ – сдвиговая и объёмная вязкости воды [Па×с]; $\chi(\psi)$ – коэффициент теплопроводности, [Вт/(м×$^\circ$ К)]; $\mathrm{C}_V(\psi), \mathrm{C}_P(\psi)$ – теплоёмкость при постоянном объёме и постоянном давлении, [Дж/(кг×$^\circ$ К)].

В целом, затухание акустических волн в морской воде из-за вязкости и теплопроводности приводит к существенному уменьшению мощности сигнала и, как следствие, дальности его распространения. Затухание увеличивается по мере увеличения несущей частоты сигнала. Частотная зависимость затухания акустических волн в морской воде приводит к соответствующим частотно-зависимым искажениям в спектре сигнала [8].

Возможны ситуации, когда водная поверхность будет быстро изменять свои отражающие свойства, например, в силу воздействия ветра, что в свою очередь придаст частоте отраженного колебания доплеровское смещение. В приповерхностном подводном канале акустическая волна распространяется согласно цилиндрического закона по нескольким лучам на многие километры, интенсивность и начальная фаза волны в данных лучах претерпевают довольно быстрые изменения (интервал корреляции процессов изменения насчитывает несколько десятков миллисекунд), а частота может иметь доплеровское смещение, даже в случае неподвижных приемника и передатчика. Задержка во времени прихода волны по различным лучам непостоянна, но составляет не более нескольких миллисекунд, а потому незначительна.

При движении как источника акустических волн, так и их приемника происходит изменение частоты колебаний, регистрируемых приемником [5], так называемый эффект Доплера. На рисунке 2 представлены векторы движения приемника и передатчика.

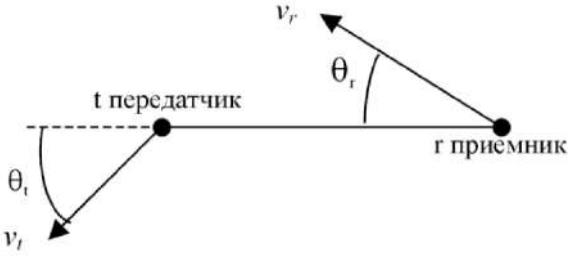


Рис. 2. Векторы движения приемника и передатчика для определения доплеровского смещения частоты

В системах гидроакустической связи тактовая частота формирования сигналов сопоставима с их несущей частотой, что отличает ее от аппаратуры радиосвязи, где ее значения, как правило, значительно меньше несущей. Тактовая частота подвержена доплеровским изменениям в той же мере, что и несущая частота. Данный факт приводит к тому, что при взаимном движении приемника и передатчика акустических сигналов происходит существенное изменение не только несущего колебания, но и длительности сигналов на приемной стороне. Поэтому необходимо отслеживать эти изменения для обеспечения надежной передачи информации по гидроакустическому каналу.

Приближенно значение доплеровского смещения частоты можно выразить следующим образом [5]:

$$\Delta f = f - f_0 = f_0 \frac{v_r cos\vartheta_r - v_t cos\vartheta_t}{c}, \quad (4)$$

где f_0 – частота акустического колебания, излучаемая передатчиком, с – скорость звука в воде, v_r и v_t – модули вектора скорости приемника и передатчика соответственно, ϑ_r и ϑ_t – углы между вектором, соединяющим приемник и передатчик в процессе движения, и векторами движения приемника и передатчика.

С увеличением глубины погружения антенны передатчика амплитуда траектории движения лучей уменьшается, при достижении глубины с минимальной скоростью звука амплитуда также становится минимальной, также минимальным будет затухание волны, вызванное ее рассеянием и поглощением. На данных глубинах образуется так называемый глубоководный подводный звуковой канал [7]. Распространение акустической волны будет происходить по цилиндрическому закону на десятки и стони километров по нескольким лучам, с чётко стабильной интенсивностью начальной фазы (корреляция превышает несколько секунд). Изменение временной задержки также будет являться достаточно медленным процессом, однако будет способно достигать нескольких сотен миллисекунд [5].

Таким образом, для широкополосных сигналов справедливо утверждение о стабильности селективных частотных искажений.

Необходимо отметить, что при разработке систем гидроакустической связи необходимо учитывать, что мультипликативные помехи естественного и техногенного происхождения ограничивают интервал когерентности сигналов, принимаемых аппаратурой.

Таким образом, анализ особенностей распространения сигналов в гидроакустическом канале связи показывает, что:

– для увеличения дальности связи необходимо уменьшение средней частоты сигнала, однако для повышения надежности передачи информации на малых дистанциях, при существующих низких значениях поглощения и рассеяния значение средней частоты необходимо повышать;

– широкополосный акустический сигнал ощутимо теряет свою интенсивность и подвергается частотным искажениям при отражении от границ море-воздух и море-морское дно;

– акустическая волна в приповерхностном слое распространяется по цилиндрическому закону по нескольким лучам, при этом отмечается быстрое изменение интенсивности и начальной фазы волны, временная задержка в приходе волны также носит непостоянный характер, однако величины данной задержки незначительны;

– при взаимном движении приемника и передатчика акустических сигналов, происходит существенное изменение как несущего колебания, так и длительности самих сигналов на стороне приемника.

Представленные выводы, по мнению автора, позволяют улучшить имеющиеся наработки RS-кодов в части повышения надежности и эффективности возложенных на них помехоустойчивых функций при передаче информации в гидроакустических каналах связи.

Л И Т Е Р А Т У Р А:

1. Захаров И. С., Сай С. В. Оценка помехоустойчивости циклического кода Рида-Соломона с использованием алгоритма Берлекэмпа-Месси // Ученые заметки ТОГУ. №4(6). 2015. с. 488-495.
2. Захаров И. С., Сай С. В. Анализ эффективности применения кодов Рида-Соломона в составе

каскадных кодов в канале с аддитивным белым гауссовским шумом // Информационные технологии XXI века. 2016. с. 95-100.
3. Захаров И. С., Жиба Г. В., Смоляков А. А., Сай С. В. Использование циклических кодов Рида-Соломона в гидроакустических каналах связи // Ученые заметки ТОГУ. №2(8). 2017.
4. Захаров И. С., Жиба Г. В., Смоляков А. А., Сай С. В. Коды Рида-Соломона в составе кодирующих конструкций для использования в гидроакустических каналах связи // Информационные технологии XXI века. 2017. с. 33-41.
5. Макаров А. И., Дворников В. Д., Конопелько В. К. Передача информации в гидроакустическом канале. Мн.: БГУИР, 2003. С. 103-118.
6. Росс Д. Шумы: источники, излучение и ослабление. Сб. Подводная акустика и обработка сигналов: Пер. с англ. / Под ред. Л. Бьёрньё, М.: Мир, 1985. 488с.
7. Бьёрньё Л. Неоднородности и нестабильность распространения звука под водой. Сб. Подводная акустика и обработка сигналов: Пер. с англ. / Под ред. Л. Бьёрньё. М.: Мир, 1985. 488с.
8. Гейстер С. Р., Чан Тай Чонг Влияние среды распространения гидроакустических волн на спектральную и временную структуры принятого локационного сигнала // Доклады БГУИР. №5(75). 2013.
9. Исакович М. А. Общая акустика. М., 1973.

ОСОБЕННОСТИ АППАРАТНО-ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА КАЛИБРОВКИ ФАЗОВОГО ИНТЕРПОЛЯТОРА ПРЕЦИЗИОННОГО ИЗМЕРИТЕЛЯ ВРЕМЕННЫХ ИНТЕРВАЛОВ НА ОСНОВЕ FPGA С УЧЕТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ

Д. Г. Калинов[1], В. И. Римлянд [2]

[1]Дальневосточный филиал ФГУП «ВНИИФТРИ»
[2] ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: kalinov.d.g@gmail.com

В статье описываются факторы, влияющие на результирующую погрешность при выполнении первичной калибровке ИВИ и необходимый для этого инструментарий. Рассмотрен аппаратно-программный комплекс первичной прецизионной калибровки фазового интерполятора с неравномерным шагом квантования на базе вторичного эталона времени и частоты ВЭТ 1-7.

К основным направлениям применения измерителя временных интервалов ИВИ прецизионного класса относятся такие области как радиолокация при сопровождении по дальности, оптическая связь, измерение интервалов времени и сдвигов по фазе при исследовании физических величин [1], фазовая синхронизация в микропроцессорах [2], время частотные измерения, связанные с поддержанием технического состояния ГЛОНАСС [3].

Измерение временных интервалов в целом основано на подсчете периодов опорного генератора, укладывающихся в измеряемом интервале, а также в долях периода, которые образуются в начале и конце измеряемого интервала. Способ, который основан на подсчете количества периодов опорной частоты в измеряемом интервале принято называть «coarse» т.е. грубый метод. Метод определения доли периода опорного генератора относится к точному методу, который именуется как «fine». Предельные возможности «coarse» ограничены быстродействием современной полупроводниковой техники. Частотные возможности ограничены диапазоном 5-20 ГГц. Однако применение высоких частот существенно влияете на работу fine-метода, особенно на границах периода опорной частоты в начале и конце периода. Поэтому совмещение двух методов оптимально для частот опорного генератора от 100 до 400 МГц для грубых измерений. «Fine» измерения основываются на разбиении периода опорного генератора от 1000 до 10000 субквантов времени. В конечном итоге разрешающая способность совмещенного метода может достигать единиц пс и менее.

Высокое разрешение с шагом квантования существенно меньше основного кванта времени – периода опорного тактового генератора, выполняется разбиением периода на

© Калинов Д. Г., Римлянд В. И., 2018

множество малых частей, каждая из которых является определенным субквантом времени. Различные процедуры разделения периода опорной частоты на N частей путем образования множества аппаратно-устойчивых фиксируемых фазовых состояний взаимного состояния фронта измеряемого сигнала и фронта опорного генератора подробно описаны в [2]. В настоящее время широкое распространение получила реализация фазового дискретного интерполятора интервала времен, соответствующего периоду опорной частоты на функциональных элементах FPGA. Фазовая (временная) интерполяция в нашем случае – это есть способ определения промежуточных значений линейной функции времени на интервале периода опорной частоты. Фактически это табличный метод временной оценки границ множества фазовых состояний. Данный метод часто называют "линейной интерполяцией".

Логические матрицы в своей основе предназначены для проектирования синхронного дизайна. Из этой постановки задачи истинное распространение сигналов между аппаратными элементами при реализации проекта не регламентируется, а компиляция разработанной программы на языке VHDL преобразуется в реальную схему на основе случайных преобразований. Поэтому каждая новая компиляция проекта VHDL формирует новую аппаратную реализацию, для которой характерны индивидуальные задержки распространения сигналов. Фактически на функциональных элементах FPGA формируется фазовые интерполяторы с неравномерным шагом квантования. Оценить на программном уровне значение времени распространения фронтов импульсных сигналов в современных микросхемах, например, Cyclone V типа 5CEFA5F23C7 не предоставляется возможным. Таким образом, требуется первичная калибровка фазовых интерполяторов, реализованных на FPGA, на основе специальных аппаратного состава и программных средств.

Необходимо отметить, что время распространения импульсных сигналов в функциональных элементах FPGA существенно зависит от температуры кристалла микросхемы [4]. Поэтому первичная калибровка фазового интерполятора с неравномерным шагом должна выполняться при стабильной температуре кристалла, в нашем случае Cyclone V типа 5CEFA5F23C7. Практика показала, что для достижения погрешности в 1-2 пс при калибровке необходимо поддерживать температуру кристалла в диапазоне ± 0,05°С. В результате проведенных экспериментов было установлено, что кристалл FPGA с увеличением температуры расширяется и вносит на 1 град. изменение последнего звена задержки на10 пс.

Создание калибровочного сигнала с временным квантовым разрешением в единицы *пс* и менее не предоставляется возможным из-за отсутствия технических средств. Единственным выходом для выполнения прецизионной первичной калибровки является применение метода статистической обработки испытательного сигнала с известными вероятностными параметрами. На базе вторичного эталона времени и частоты ВЭТ 1-7 был создан аппаратно-программный комплекс первичной прецизионной калибровки фазового интерполятора с неравномерным шагом квантования. Структурная схема вторичного эталона ВЭТ 1-7 представлена рис. 1.

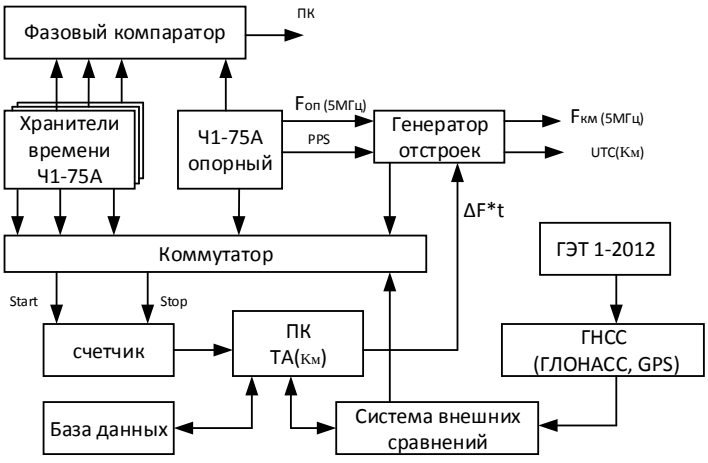


Рис. 1. Структурная схема ВЭТ 1-7

Функционирование эталона заключается в формировании на основе взаимных измерительных данных хранителей времени, выполненных на основе активных водородных стандартов частоты и времени Ч1-75А атомной шкалы времени метрологического пункта ТА(км), определении дрейфа частоты опорного генератора по отношению к атомной шкале времени ТА(SU) первичного эталона ГЭТ 1-2012.

Сравнение шкалы времени UTS(Km) (вторичного эталона ВЭТ 1-7) с национальной шкалой времени UTS(SU) (первичного эталона ГЭТ 1-2012) осуществляется по сигналам космических навигационных систем ГЛОНАСС и GPS.

Периодический ввод поправок по частоте к частоте опорного генератора позволяет сформировать шкалу времени и частоту максимально близкой к первичному эталону. Ниже приведены метрологические характеристики вторичного эталона ВЭТ 1-7:

- суммарная погрешность эталона $S_{\Sigma o} \le 1{,}0\times10^{-14}$, при $\tau_и = 10$ сут, $\tau_н = 1$ год;
- пределы допускаемых смещений шкалы координированного времени UTC(Kh_m) относительно национальной шкалы времени $\Delta T_{[UTC(SU)-UTC(Khm)]} \pm 30$ нс;
- относительная нестабильность единиц времени и частоты ТА(Kh_m) $\sigma_y(\tau) \le 5{,}0\times10^{-15}$, при при $\tau_и = 10$ - 30 сут, $\tau_н = 1$год;
- случайная погрешность (СКО) сравнения шкал времени UTC(SU) и UTC(Kh_m) по сигналам КНС ≤ 5нс, при $\tau_и = 1$ сут, $\tau_н = 30$ сут.
- пределы допускаемых смещений рабочей шкалы времени относительно шкалы координированного времени UTC(Kh_m): $\Delta T_{[UTC(Khm)-T(РЧ)]} \pm 10$ нс.

В действительности параметры ВЭТ 1-7 несколько выше приведенных характеристик. Так например, смещение рабочей шкалы времени относительно шкалы координированного времени UTC(Kh_m) не превышает 0,2-0,3 нс, а смещение шкалы координированного времени UTC(Kh_m) относительно национальной шкалы времени UTS(SU) в 2018 г не выходило за пределы ± 5 нс.

Для обеспечения калибровки фазового интерполятора методом статических испытаний необходима система, которая бы обеспечивала заданное смещение испытательного импульса относительно одного из фронтов сигнала опорной частоты *CLK*.

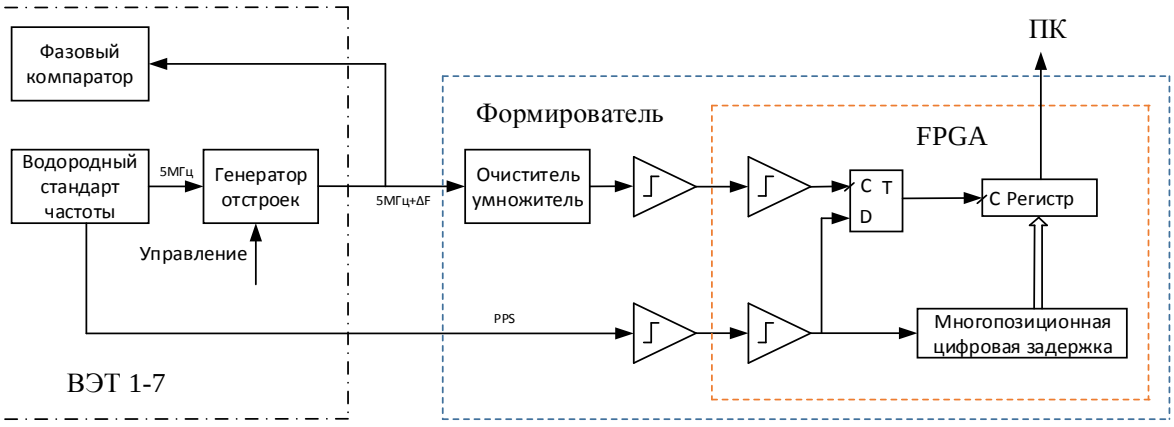


Рис. 2. Структура аппаратно-программного комплекса предварительной калибровки фазового интерполятора с применением вторичного эталона времени и частоты ВЭТ 1-7

На рис. 2 представлена структура аппаратно-программного комплекса предварительной калибровки фазового интерполятора с применением вторичного эталона времени и частоты ВЭТ 1-7. Импульсный сигнал PPS 1 Гц формируется на выходе водородного стандарта частоты и времени Ч1-75А и подается на высокочастотный компаратор формирователя. Сигнал 1 Гц вырабатывается синхронно с частотой 5 МГц.

Выводы. Первичную калибровку ИВИ необходимо выполнять при стабильной температуре кристалл FPGA в пределах ± 0,05 °С.

При проведении первичной калибровки предъявляются особые требования к

испытательным сигналам, как по длительности переднего фронта и стабильности, а также к спектру опорной частоты в части низкочастотных составляющих.

Наиболее оптимальным инструментом обладающим необходимыми параметрами для проведения первичной калибровки является Вторичный Государственный эталон времени и частоты ВЭТ 1-7.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Блинов И. Ю., Пасынок С. Л. и др. Деятельность ГМЦ ГСВЧ по определению параметров вращения Земли в 2017 году. Альманах современной метрологии, 2018, № 13, п/о Менделеево, ФГКП «ВНИИФТРИ».
2. Чулков В. А. Интерполирующие устройства синхронизации и преобразователи информации. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 324 с.
3. Калинов Д. Г., Римлянд В. И., д-р техн. наук, Г.А. Калинов канд. тех наук, А.П. Грунин, Мигунов Д.С. Оценка влияния основных параметров FPGA серии CYCLONE V при проектировании цифровых преобразователей ВРЕМЯ-КОД. Электронное научное издание «Ученые заметки ТОГУ» 2017, том 8, № 3, с. 372-377.
4. Weibin Pan, Guanghua Gong, Hongming Li, Jianmin Li, A 20-ps Temperature Compensated Time-to-Digital Converter (TDC) Implemented in FPGA, 978-1-4799-0534-8/13/$31.00 ©2013 IEEE.

АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ В КЛЕТОЧНЫХ СУСПЕНЗИЯХ

И. В. Красников, А. Ю. Сетейкин

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: ivkrasnikov@gmail.commailto:ivanov@mail.ru

В работе проведено исследование влияния свойств живых клеток на рассеяние света. Были измерены зависимость приведенного коэффициента рассеяния от длины волны μs'(λ) и угловая зависимость рассеяния P(θ). Сделаны выводы о распределении рассеивающих частиц по размерам. Кроме того, измерены угловые распределения рассеяния органелл, выделенных из клеток. Получена корреляция между направлением рассеяния и размером рассеивающих частиц.

Разработка оптических методов диагностики тканей и терапии, необходимо знать связь между оптическими и биологическими свойствами ткани. Существуют два основных процесса взаимодействия света с биологическими тканями: рассеяние и поглощение. Они могут предоставить важную информацию о физиологическом состоянии ткани. Особый интерес вызывает связь рассеяния и клеточной морфологии и вопрос о том, какие свойства клеток отвечают за рассеяния света.

Фундаментальное понимание происхождения рассеяния света биологическими клетками очень значимо для ряда неинвазивных медицинских диагностических методик при лечении рака и других патологий. Например, оптическая когерентная томография[1], спектроскопия упругого рассеяния[2,3] и транспорт фотонов - это методы, которые разрабатываются для неинвазивной оптической диагностики ткани и определенным образом зависят от рассеяния света тканями при возникновении измеряемого сигнала.

Рассеивающими центрами в клетках млекопитающих являются сами клетки, ядра, различные органеллы, и структуры внутри органелл. Клетки млекопитающих, как правило, диаметром порядка 10-30 мкм и ядром диаметром 3-10 мкм. Митохондрии имеют длину примерно 1-4 мкм и диаметр 0.3-0.7 мкм. Лизосомы и пероксисомы имеют сферическую форму с диаметром примерно 0.2-0.5 мкм. Другие органеллы, которые могут рассеивать свет — это аппарат Гольджи и эндоплазматический ретикулум, которые имеют сложную форму, и содержат большое количество липидных мембран.

Для решения вопроса о том, как функции клетки влияют на рассеяние света мы измеряли

© Красников И. В., Сетейкин А. Ю., 2018

зависимость приведенного коэффициента рассеяния от длины волны $\mu_s'(\lambda)$ и угловую зависимость рассеяния $P(\theta)$. Затем мы использовали эти измерения, для того чтобы сделать вывод о распределении рассеивающих частиц по размерам. Чтобы связать $P(\theta)$ и $\mu_s'(\lambda)$ с размером рассеивателей, мы определили соотношения между измерениями и распределением рассеивателей по размерам. Эти соотношения были получены путем расчетов по теории Ми для как монодисперсных, так и для полидисперсных растворов частиц. Было обнаружено, что параметр g используется при распределении крупных частиц, в то время как при распределении средних и малых размеров частиц более подходящим является использование $\mu_s'(\lambda)$. Информация о $\mu_s'(\lambda)$ в сочетании с измерениями $P(\theta)$ дает данные о распределение рассеивателей по размерам. Знания размеров клеточных структур дает представления о том, что морфологические характеристики ответственны за рассеяние света. Кроме того, были измерены угловые распределения рассеяния органелл, выделенных из клеток. Суммируя результаты измерений углового распределения рассеяния клеток, мы получили корреляцию между направлением рассеяния и размером рассеивающих частиц.

Рассеяние от отдельных сферических частиц было рассчитано по теории Ми, с использованием кода Борена и Хафмена. Для N типов частиц было определено, что

$$\mu_s(\lambda) = \sum_{i=1}^{N} \mu_{s,i}(\lambda), \tag{1}$$

$$P(\theta,\lambda) = \frac{\sum_{i=1}^{N} P_i(\theta,\lambda)\mu_{s,i}(\lambda)}{\sum_{i=1}^{N} \mu_{s,i}(\lambda)} \quad , \tag{2}$$

где $\mu_{si}(\lambda) = N_i C_i(\lambda)$, N_i – концентрация сферических частиц типа i, $C_i(\lambda)$ –сечение экстинкции сферических частиц типа I, вычисленное по теории Ми. Приведенный коэффициент рассеяния $\mu_s'(\lambda)$ и фактор анизотропии g можно вычислить, используя следующие уравнения:

$$g(\lambda) = \int P(\theta,\lambda)\cos\theta \, d\Omega, \tag{3}$$

$$\mu`_s = \mu_s(\lambda)[1 - g(\lambda)]. \tag{4}$$

Редуцированный коэффициент рассеяния суспензии биологических клеток был определен как зависимость от длины волны. Для расчета μs'(λ) были использованы сигналы упругого рассеяния клеточной суспензии. Эти сигналы упругого рассеяния измеряются как функции разделения источник-детектор.

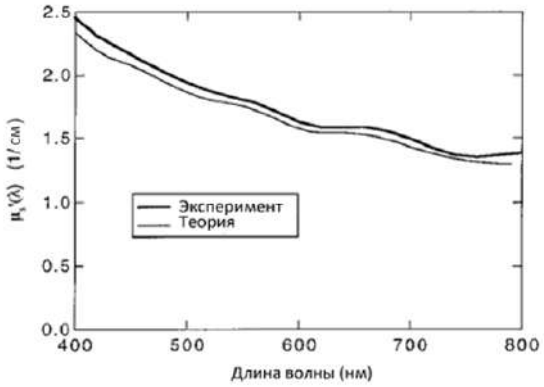


Рис. 1. Сравнение результатов экспериментов и теоретических расчетов $\mu_s'(\lambda)$ для полистироловых частиц, диаметром 0.895 мкм

Для получения дополнительной информации о рассеивающих центрах, измерялась угловая зависимость рассеяния $P(\theta)$, с помощью гониометра. Измерения для клеток и полистироловых сферических частиц были сделаны от 2° до 171° с использованием неполяризованного излучения гелий-неонового лазера (λ= 632.8 нм). Измерения для органелл были сделаны от 9° до 168°. В обоих случаях была сделана экстраполяция при 0° и 180° с

помощью линейной экстраполяции log[P(θ)].

Значения g полученные по расчетам теории Ми для сферических частиц, с показателем преломления 1.4 – 1.41, погруженными в среду с показателем преломления 1.35, для различных радиусов частиц приведены на рис. 2. При увеличении радиуса растет значение g. Эта связь между g и средним радиусом изменяется, когда есть распределение частиц по размерам.

Значение g для гауссова распределения сферических частиц не совпадает со средним распределением. На Рис. 3 показано, как значение g зависит от стандартного отклонения распределение Гаусса для сферических частиц четырех различных радиусов. При увеличении стандартного отклонения (при постоянном среднем значении), расчетное значение g также увеличивается. Наибольшее изменение для самых маленьких частиц, предположительно потому, что при увеличении радиуса увеличение g больше для меньших сфер (рис. 2).

Mourant и соавторы [5] предложили метод оценки размеров рассеивателей на основе зависимости $\mu_s'(\lambda)$ от длины волны. Редуцированный коэффициент рассеяния $\mu_s'(\lambda)$, суспензии сферических частиц одного размера описывался кривой $c\lambda^{-x}$ в диапазоне длин волн 400 - 800 нм. Зависимость радиуса от показателя степени x, показана на рис. 4. Как видно, нет сильной зависимости от показателя преломления рассеивателей 1.45 или 1.4 для среды с показателем преломления 1.35.

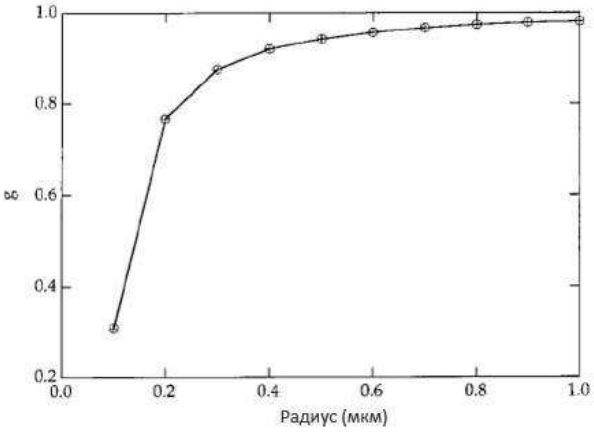


Рис. 2. Значения g для сферических частиц рассчитывались по теории Ми для длины волны 633 нм. Окружности соответствуют частицам с показателем преломления 1.4; крестики - частицам с показателем преломления 1.41. В обоих случаях показатель преломления среды считался 1.35

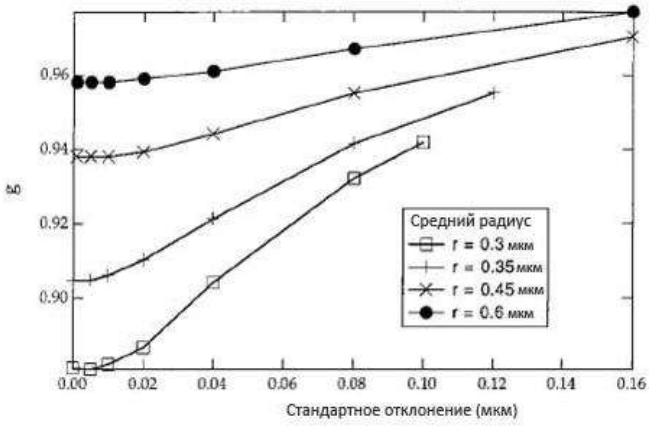


Рис. 3. Влияние стандартного отклонения на значение g для длины волны 633 нм для распределений рассеивателей по размерам. Распределение рассеивателей было гауссовым со средним радиусом, показанным на рис. Стандартное отклонение указано по оси x. Показатели преломления рассеивателей и среды составили соответственно 1.4 и 1.35.

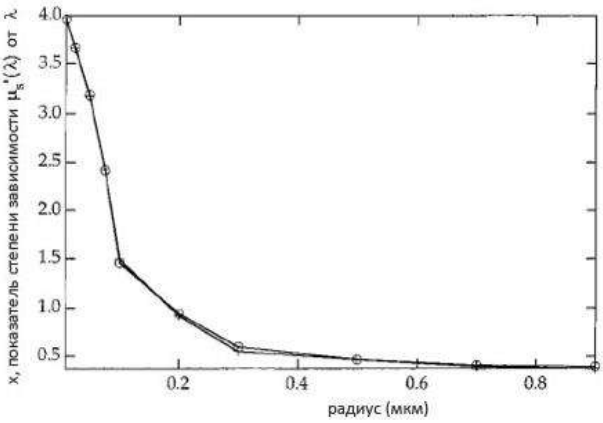


Рис. 4. Связь между радиусом рассеивающих частиц и $\mu_s'(\lambda)$.

Из спектральной зависимости $\mu_s'(\lambda)$ можно оценить, что размер рассеивателей в клетках составляет около 0.2 мкм. Однако, эта оценка справедлива только, если есть узкое распределение рассеивателей по размерам. Аналогичным образом, по измеренным значениям g – 0.98, и рис. 4 можно оценить, что размер рассеивателей составляет примерно 1.0 мкм, хотя эта оценка снова имеет место лишь при наличии узкого распределения рассеивателей по размерам. Это расхождение в оценке размеров рассеивателей, основывается на предположении о монодисперсном распределении указывающем, что есть и полидисперсное распределение по размерам.

Данные согласуются с тем, что должно быть при широком распределении размеров рассеивателей. Предполагая, что существует распределение рассеивателей со средним радиусом 0.6 мкм и стандартным отклонением 0.16 мкм. Измеренное значение g для этой суспензии составило 0.98 (рис.3).

Измерение g чувствительно к крупным рассеивателям, а измерение $\mu_s'(\lambda)$ чувствительно к частицам среднего и меньшего размера. Этот анализ также показывает, что распределение размеров рассеивателей достаточно широкое, имеет длинный хвост, или, возможно, бимодальное потому что гауссово распределение отцентрировано при 0,6 мкм со стандартным отклонением 0.16 мкм не было достаточно широким, чтобы иметь достаточно крутую зависимость длины волны (x = 0.51 по сравнению с x =1.0), хотя и имеют достаточно большие значения g.

Большинство процессов рассеяния в клетках млекопитающих происходят внутри клеточных структур. Существует широкое распределение рассеивателей по размерам в клетках фибробластов. Измерения спектральной зависимости $\mu_s'(\lambda)$ чувствительны к частицам меньших размеров в распределении и дают доказательства для сферических частиц радиусом 0.2 мкм. Измерения g чувствительны к более крупным частицам в распределении и дают доказательства для более крупных частиц (эквивалентных сферам с радиусом 1.0 мкм), которые являются рассеивателями вперед.

Как известно из данных проточной цитометрии, рассеяние при малых углах обусловлено самой клеткой. Измерения суспензии ядер и митохондрий показывают, что рассеяние света на малые углы, скорее всего обусловлено рассеянием на более крупных частицах, таких как ядра. Рассеяние на большие углы может быть за счет мелких органелл и структур внутри органелл. Поэтому можно сделать вывод, что существует корреляция между углами, на которые свет был рассеян и размером рассеивающих частиц.

Результат того, что большинство процессов рассеяния происходит от органелл в клетках означает, что форма клетки должна иметь незначительное влияние на рассеивающие свойства ткани. Независимость рассеивающих свойств от размеров клетки, имеет важные последствия, как с точки зрения научной основы для диагностики тканей с помощью рассеяния света и для дизайна оптических измерительных систем.

Было показано, что функция Хени-Гринштейна является плохим приближением рассеяния от клеток, она недооценивает рассеяния на большие углы. Фазовая функция, рассчитанная Данном и Ричардсом-Кортумом [6] для клеток, содержащих ядра и митохондрии, более схожа с измеряемой фазовой функцией, чем функция Хени-Гринштейна, хотя есть некоторые расхождения по форме и расчетное значение было значительно выше, чем

измеренная величина g.

В статье использованы материалы отчета НИОКТР №АААА-Б17-217032870037-6.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Tearney G. J., Brezinski M. E., Bouma B. E., Boppart S. E., Pitris C., Southern J. F., Fujimoto J. G. *In vivo* endoscopic optical biopsy with optical coherence tomography // Science. –1997. –V.276. –P.2037–2039.
2. Mourant J. R., Bigio I. Boyer J., J., Conn R. L., Johnson T., Shimada T. Spectroscopic diagnosis of bladder cancer with elastic light scattering // Lasers Surg. Med. 1995. V.17. P.350-357.
3. Mourant J. R., Bigio I. J., Boyer J., Johnson T., Lacey J. Detection of gastrointestinal cancer by elastic-scattering spectroscopy // J. Biomed. Opt. 1996. V.1. P.192-199.
4. LaRue K. E. A., Bradbury E. M., Freyer J. P. Differential regulation of cyclin-dependent kinase inhibitors in monolayers and spheroid cultures of tumorigenic and nontumorigenic fibroblasts // Cancer Res. 1998. V.58. P.1305-1314.
5. Mourant J. R., Fuselier T., Boyer J., Johnson T. M., Bigio I.J. Predictions and measurements of scattering and absorption over broad wavelength ranges in tissue phantoms // Appl. Opt. 1997. V.36. P.949–957.
6. Dunn A., Richards-Kortum R. Three-dimensional computation of light scattering from cells // IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron. 1996. V.2. P.898-905.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЛЩИНЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИНОК ПО ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОЙ КАРТИНЕ В БЕЛОМ СВЕТЕ

В. В. Криштоп, А. В. Попова, П. С. Гончарова, А. В. Сюй, М. Н. Палатников, В. А. Максименко, А. И. Ливашвили

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
г. Хабаровск, e-mail: paveinp@mail.ru

Статья посвящена анализу спектра широкополосного оптического излучения, прошедшего через двухступенчатый фильтр Шольца. Рассматривается решение аддитивной задачи, определения геометрической толщины анизотропных кристаллов по характерным особенностям профиля спектра проходящего излучения.

Известно, что в случае, если две анизотропные пластинки имеют одинаковое расположение оптической оси и ось пучка перпендикулярно оптическим осям пластинок, то одни ведут себя как одна пластинка с суммарной толщиной. Если оптические оси кристаллических пластинок перпендикулярны друг другу и оси светового пучка, то они ведут себя как пластинка с толщиной, равной разности толщин этих пластин [1].

Ранее авторы теоретически проанализировали спектральный состав немонохроматического излучения, прошедшего через две анизотропные пластинки, помещенные между скрещенными поляризаторами в скрещенном двухступенчатом фильтре Шольца. При этом теоретически была учтена и проанализирована дисперсия показателей преломления обыкновенного и необыкновенного лучей в системе на основе формул Селмейера [2].

Эмпирическими уравнениями Селмейера описываются температурные зависимости двулучепреломляющих свойств ниобата лития с учетом длины волны (в мкм) [3]. При этом во многих работах особое внимание отводилось изменению показателей преломления от температуры при использовании видимого диапазона длин волн.

$$n_o^2 = 4{,}913 + \frac{0{,}1173 + 1{,}65 \cdot 10^{-8} \cdot \mathrm{T}^2}{\lambda^2 - (0{,}212 + 2{,}7 \cdot 10^{-8}\mathrm{T}^2)^2} - 2{,}78 \cdot 10^{-2} \cdot \lambda^2 \qquad (1)$$

© Криштоп В. В., Попова А. В., Гончарова П. С., Сюй А. В., Палатников М. Н., Максименко В. А., Ливашвили А. И., 2018

$$n_e^2 = 4{,}5567 + 2{,}605 \cdot 10^{-7}\mathrm{T}^2 + \frac{0{,}097 + 2{,}7 \cdot 10^{-8} \cdot \mathrm{T}^2}{\lambda^2 - (0{,}201 + 5{,}4 \cdot 10^{-8}\mathrm{T}^2)^2} - 0{,}0224 \cdot \lambda^2 \quad (2)$$

Расчеты показывают, что при фиксированной температуре и изменении длины волны показатели преломления обыкновенного и необыкновенного лучей изменяются синхронно и их разность $\Delta n = n_o - n_e$ принимает значения от 0,111 до 0,082 при изменении λ от 0,4 мкм до 0,8 мкм. При прохождении через двухступенчатый фильтр Шольца широкополосного оптического излучения результирующий спектр так же примет периодический характер [4]. В этом случае при фиксированном значении толщин ортогональных анизотропных пластин максимумы и минимумы прошедшего излучения будут наблюдаться на различных длинах волн (Рис 1). Замеряя спектральный шаг между соседними экстремумами можно определить отличие в геометрических размерах двух исследуемых пластин. Каждой длине волны минимальной интенсивности соответствуют несколько возможных эффективным длин кристаллов. И, так же, одной эффективной длине кристалла соответствует несколько длин волн с минимальным значением интенсивности:

$$\Delta d = N * \frac{\lambda_i}{\Delta n(\lambda_i)}$$

$$\Delta d = (N-1) * \frac{\lambda_{i-1}}{\Delta n(\lambda_{i-1})}$$

где N – порядок минимума, λ_i, λ_{i-1} – соседние длины волн с минимальной интенсивностью, $\Delta n(\lambda_i)$ – разница показателей преломления обыкновенного и необыкновенного лучей на i-ой длине волны.

Таким образом определив длины волн соседних минимумов можно рассчитать порядок минимума, а соответственно значение эффективной толщины кристалла.

$$N = \frac{\frac{\lambda_i}{\Delta n(\lambda_i)}}{\frac{\lambda_{i-1}}{\Delta n(\lambda_{i-1})} - \frac{\lambda_i}{\Delta n(\lambda_i)}} \quad (3)$$

При расчетах значение N округляется до ближайшего меньшего целого.

Подобный способ определения эффективной длины кристалла демонстрирует высокую точность при использовании спектрометров с высоким разрешением. Для получения значения эффективной длины кристалла необходимо полученное значение N умножить на минимальное значение эффективной длины кристалла, соответствующее первому максимуму для i-ой длины волны с учетом дисперсии показателей преломления материала. Графически значения для первого минимума демонстрируются на линии N=1, рис. 1.

$$\Delta d = N * d_{min} \quad (4)$$

Так же можно определить примерное значение Δd по рис. 1. В соответствии с иллюстрацией разным длинам волн минимальной интенсивности соответствуют несколько наборов эффективных толщин кристаллов, получающихся при соблюдении условий минимума разных порядков. Измерения спектрографа позволяют определить разницу толщин используемых кристаллов с ограниченной точностью. Графическим методом можно определить порядок интерференционного минимума.

В настоящей работе экспериментально показано, что расстояние между интерференционными минимумами определяется взаимной ориентацией кристаллических пластин. В работе предложен метод одновременного определения толщины одной из пластин и разницы толщин исследуемых анизотропных кристаллов.

За основу было принято утверждение, что при взаимно ортогональной ориентации две двулучепреломляющие пластины действуют как одна с разностной толщиной. Эксперимент был поставлен таким образом, что сколлимированный пучок немонохроматического излучения от лампы накаливания проходил через поляризатор, расположенный под углом 45 градусов к оптическим осям кристаллов.

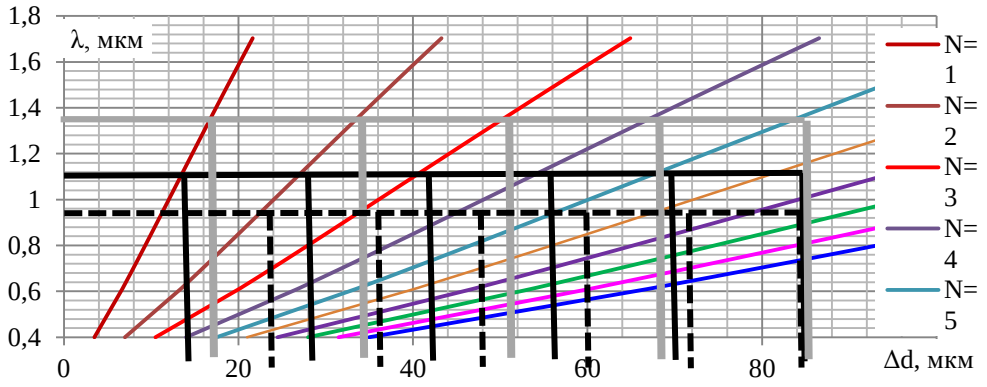
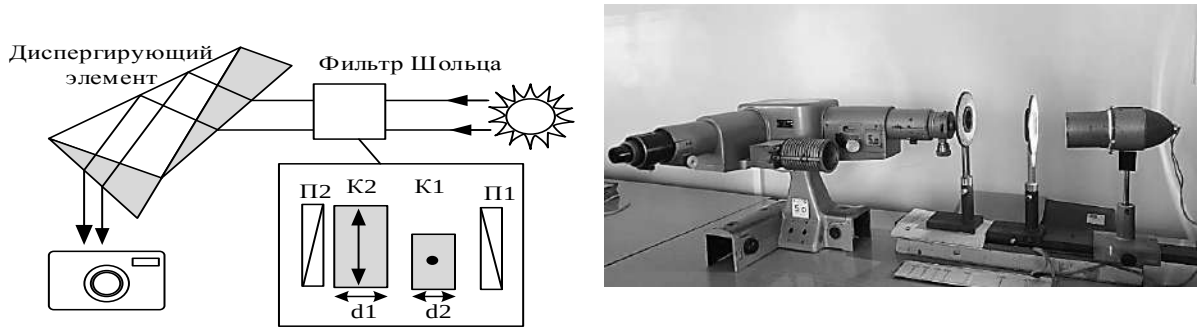


Рис. 1. Графическое соотношение эффективных толщин кристаллов и длин волн интерференционных минимумов

Расположение кристаллов таково, что часть излучения проходила через оба кристалла (имеющие взаимно ортогональные направления оптических осей), а часть через один из кристаллов. Затем излучение проходило через второй поляризатор, попадало в монохроматор и фотографировалось через окуляр монохроматора (рис. 2).



а) б)

Рис. 2. Экспериментальная установка. а) схема, б) вид

Результатом эксперимента явилось наблюдение сдвоенных интерференционных картин с разным спектральным шагом между соседними интерференционными минимумами. Картина с большим расстоянием соответствует интерференции в двух ортогональных кристаллах, картина с меньшим расстоянием соответствует интерференции в одном кристалле. Измеряя количество интерференционных минимумов обеих картин, приходящихся на некоторый спектральный диапазон, можно определить, во сколько раз толщина одного кристалла больше разницы толщин двух кристаллов (рис. 3).

В проведенном эксперименте на 3 минимума одной картины (с учетом разницы толщин кристалла) приходится 27 минимумов второй картины (с одним кристаллом). Таким образом, на одну интерференционную полосу тонкой разностной пластины приходится 13,5 интерференционных полос от двулучепрелоомляющего кристалла. Измерив микрометром толщину одного кристалла, получили значение 1,8 мм. Из рассуждений, приведенных выше, можно сделать вывод, что разница толщин составит 0,130 мм.

Подобный способ определения эффективной длины кристалла демонстрирует высокую точность при использовании спектрометров с высоким разрешением.

Зачастую набор из нескольких пластин используется для создания полу- или четвертьволновых пластин. В этом случае используются пластины с очень близкими толщинами и становится важна не значение не толщины каждой из пластин, а разница толщин. Предложенный метод позволяет определить ее с высокой точностью (10 мкм в проведенных экспериментах).

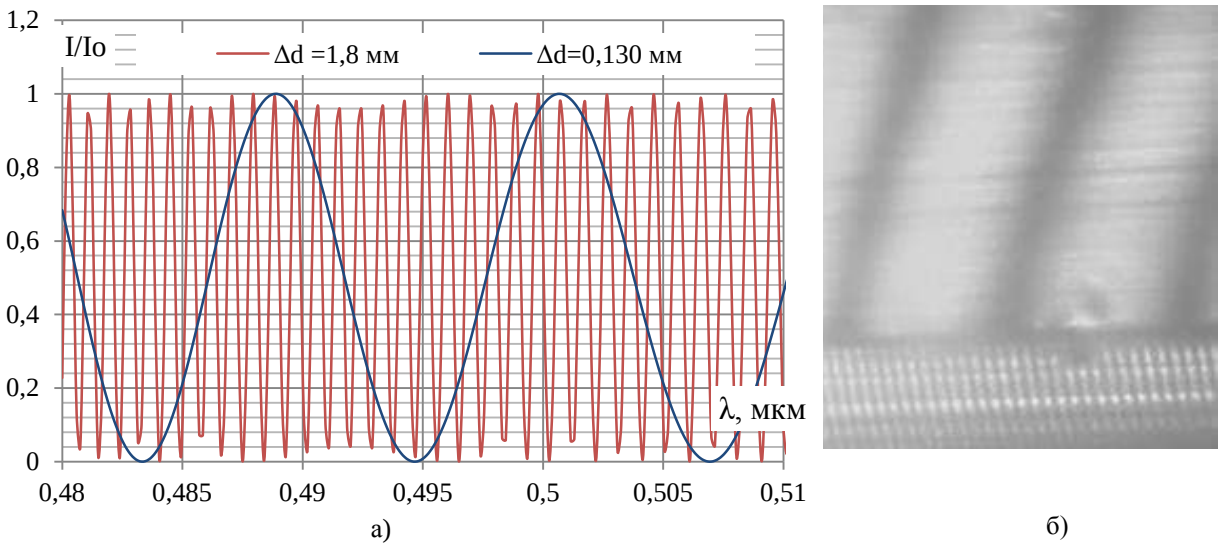


Рис. 3. Результаты эксперимента, а) расчетное положение минимумов, б) фотография эксперимента

Для увеличения точности измерений толщины анизотропной среды можно использовать дополнительные эксперименты, в том числе и поляриметрические. С помощью поворота анализатора достаточно просто измерить азимут поляризационного эллипса и угол эллиптичности без учета знака.

Благодарности. *Кристаллы любезно предоставлены Институтом химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева (ИХТРЭМС КНЦ РАН) г. Апатиты/*

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Попова А. В., Гончарова П. С., Криштоп В. В. Интерференционные поляризационные светофильтры в спектральных системах // Научно-техническое и экономическое сотрудничество стран АТР в XXI веке. 2017. Т. 2. С. 319-324.
2. Попова А. В, Гончарова П. С., Криштоп В. В., Сюй А. В. Оптический метод определения и сравнения толщины тонких кристаллов // Оптика кристаллов и наноструктур. 2017, г. Хабаровск.
3. Кузьминов Ю. С. Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития. М.: Наука, 1987. 264 с.
4. Сюй А. В., Криштоп В. В., Гончарова П. С., Штарев Д. С., Попова А. В., Киреева Н. М., Костина Г. В., Максименко В. А., Корнеенко Т. Н., Ефременко В. Г. Определение толщины анизотропной кристаллической пластинки. X Международная конференция молодых ученых и специалистов «Оптика-2017».

СВЕТОИНДУЦИРОВАННАЯ ДИНАМИКА НАНОЧАСТИЦ В ЖИДКОФАЗНОЙ СРЕДЕ

А. И. Ливашвили[1], В. В. Криштоп[1], Г. В. Костина[1], Т. Н. Брюханова[2], О. И. Ящук[1]

[1]ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
[2]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: livbru@mail.ru

Теоретически проанализирована динамика наночастиц в коллоидной суспензии, находящейся под воздействием светового поля с гауссовым профилем интенсивности. Рассмотрение ведется с учетом смены знака поляризации наночастиц. Показано, что по мере удаления от оси пучка влияние электрострикционного потока практически утрачивается.

© Ливашвили А. И., Криштоп В. В., Костина Г. В., Брюханова Т. Н., Ящук О. И., 2018

Объектом нашего исследования будет оптически прозрачная жидкофазная микрогетерогенная среда, в которой в качестве дисперсной фазы присутствуют наночастицы. В нашем случае это диэлектрические частицы, показатели преломления которых ($n_ч$) могут быть как больше показателей преломления жидкости ($n_{ж}$), так и меньше. При этом плотность наночастиц близка к плотности жидкости, исключая, тем самым, процессы сидиментации.

В отличие от предыдущих работ, связанных с этой проблематикой [1,2], мы не ограничиваемся случаем малых возмущений концентрации, рассматривая тем самым большие интенсивности.

Рассмотрим распределение интенсивности в плоскости среды с гауссовым профилем интенсивности

$$I = I_0 \exp\left(-r^2 \Big/ r_0^2\right) \tag{1}$$

где I_0 – интенсивность световой волны в центре пучка; r_0 – радиус гауссового пучка.

Как известно, действие градиентных сил на наночастицы со стороны светового поля вызывает концентрационный поток, встречный диффузионному (термодиффузией в данном случае пренебрегаем). Подобный массоперенос может быть описан балансным уравнением, записанным в осевой симметрии

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r}\right) - \gamma\, div_r\left(C\frac{\partial I}{\partial r}\right), \quad 0 \le r \le R \tag{2}$$

Здесь приняты следующие обозначения: D – коэффициент диффузии наночастиц; C – объемная концентрация частиц; $\gamma = \dfrac{4\pi\beta D}{C_0 \eta K_Б T}$, β – поляризуемость наночастиц, C_0 – скорость света в вакууме, $K_Б$ – постоянная Больцмана, T – температура среды.

Граничные условия для уравнения (1) получим из условия обращения в ноль суммы потоков на границах области [0,R]

$$\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=0,R} + \left.\frac{2I_0\gamma}{Dr_0^2} r e^{-r^2/r_0^2} C\right|_{r=0,R} = 0 \tag{3}$$

Отсюда:

$$\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=0} = 0, \quad \left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{R} + \frac{2I_0\gamma}{Dr_0^2}\mathrm{Re}^{-R^2/r_0^2} = 0 \tag{4}$$

Заметим, что первое граничное условие выражает факт конечности искомой функции.

С учетом равенства (1) после несложных преобразований уравнение (2) можно представить в виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \left(\frac{2I_0\gamma}{Dr_0^2} r e^{-r^2/r_0^2} + D\frac{1}{r}\right)\frac{\partial C}{\partial r} + \frac{4I_0\gamma}{r_0^2}\left(1 - r^2/r_0^2\right)e^{-r^2/r_0^2}\cdot C, \tag{5}$$

Введем безразмерные переменные и проведем параметризацию в уравнении (4)

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = q\frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + \left(\frac{1}{4}\rho e^{-\rho^2} + q\frac{1}{\rho}\right)\frac{\partial C}{\partial \rho} + \left(1-\rho^2\right)e^{-\rho^2}\cdot C, \tag{6}$$

где $q = \dfrac{D}{4\gamma I_0}$, $\tau = \dfrac{4\gamma I_0}{r_0^2}$, $\rho = \dfrac{r}{r_0}$, $0 \le \rho \le \dfrac{R}{r_0}$.

Далее будем рассматривать приосевое приближение $e^{-\rho^2} \approx 1-\rho^2$ и, будем считать $\rho_{\max} = \dfrac{1}{r}$.

Как будет показано ниже, оценка параметра дает $q \approx 10^3 \div 10^4$. Эта оценка и малость ρ

дает возможность пренебречь первым слагаемым в скобках в уравнении (6). Тогда получим задачу:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = q\left(\frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial C}{\partial \rho}\right) + \left(1 - 2\rho^2\right)\cdot C = 0, \qquad 0 \le \rho \le \frac{1}{r} \tag{7}$$

$$C(\rho,0) = C_0 \exp\left(-\frac{1}{4q}\rho^2\right) \tag{8}$$

$$\left.\frac{\partial C}{\partial \rho}\right|_{\rho=0} = 0, \quad \left.\frac{\partial C}{\partial \rho}\right|_{\frac{1}{r}} + \frac{1}{4q}\left.C\right|_{\frac{1}{r}} = 0 \tag{9}$$

Заметим, что начальное условие в форме (8) удовлетворяет условию согласования с граничными условиями (9).

Будем искать решение в виде

$$C(\rho,\tau) = \exp\left(-\lambda\tau\right)\psi(\rho) \tag{10}$$

Подставив (10) в (7) и сохранив члены, решение по ρ, получим спектроскопическую задачу:

$$\rho\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial \psi}{\partial \rho}\right) + k^2 \rho\cdot\psi = 0, \qquad (k^2 = \frac{1+\lambda}{q}) \tag{11}$$

решение, которого хорошо известно [5]:

$$\psi(\mathrm{r}) = AI_0(k\rho) + BY_0(k\rho), \tag{12}$$

где $I_0(k\rho)$ и $Y_0(k\rho)$ – функции Бесселя соответственно первого и второго родов.

Далее, так как концентрация на оси области должна быть конечной, то полагаем $B = 0$. Таким образом, частное решение уравнения (7) можно записать в виде

$$C(\rho,\tau) = A\exp\left(-\lambda\tau\right)I_0(k\rho) \tag{13}$$

Для определения спектра значений параметра k подставим (13) во второе граничное условие:

$$\left.-kI_1(k\rho)\right|_{\rho=\frac{1}{2}} + \frac{1}{4q}\left.I_0(k\rho)\right|_{\rho=\frac{1}{2}} = 0, \tag{14}$$

Очевидно, корни характеристического уравнения $\frac{I_0(k/2)}{I_1(k/2)} = 8q(k/2)$ образуют спектр собственных значений уравнения (11) (см. [3] и соответствующие таблицы)

Имея ввиду, что $|q| >> 1$ и разлагая $I_0(k/2)$ и $I_1(k/2)$ получим:

$$\frac{I_0(k/2)}{I_1(k/2)} = 4kq = \frac{\frac{1}{2^3}k^2 + \ldots}{\frac{1}{4}k - \frac{1}{8\cdot 4}k^3 + \ldots}, \qquad (\frac{1}{8q} \to 0)$$

$$k^2 = \frac{1}{q}, \tag{15}$$

остальные корни можно определить из уравнения $I_1(\frac{k}{2}) = 0$.

Запишем общее решение уравнения (7)

$$C(\rho,\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n I_0(k_n\rho)\exp\left(-k_n^2\tau\right) \tag{16}$$

Постоянную A_n можно определить, записав начальное условие в виде

$$\exp\left(-k_n^2\tau\right)=\sum_{n=1}^{\infty}A_nI_0(k_n\rho), \tag{17}$$

тем самым разлагая её в ряд. После некоторых преобразований [5] можно получить выражение для коэффициентов A_n:

$$A_n=\frac{2\cdot C_0}{I_0^2(k_n\rho)+I_1^2(k_n\rho)}\cdot\int_0^{1/2}\rho\exp\left(-\frac{1}{4q}\rho^2\right)I_0(k_n\rho)d\rho$$

Последний интеграл можно точно вычислить интегрированием по частям, однако ввиду громоздкости получаемых выражений, ограничимся асимптотикой подынтегральной функции:

$$A_n\approx\frac{I_1(k_n\rho)\cdot C_0}{k_n\left[I_0^2(k_n\rho)+I_1^2(k_n\rho)\right]} \tag{18}$$

с учетом последнего выражение общее решение нашей задачи примет вид:

$$C(\rho,\tau)=C_0\sum_{n=1}^{\infty}\frac{I_1(k_n\rho)\cdot I_0(k_n\rho)}{k_n\left[I_0^2(k_n\rho)+I_1^2(k_n\rho)\right]}\exp\left(-qk_n^2-1\right)\tau \tag{19}$$

Выше было уже отмечено, что при больших значениях q $(q>10^3)$ все коэффициенты $A_n\to 0$, так как $J_1(k_n)\to 0$ за исключением $A_1\to 1$, а отношение $J_1(k_n)/k_n\to 1$, когда $k_n\to 0$, а $k_1^2=1/q$. Тогда для больших значений q получим:

$$C(\rho,\tau)\big|_{q>1}=C_0J_0(\frac{2}{\sqrt{q}}\rho)\exp(-2\sqrt{q}\tau) \tag{20}$$

При малых значениях q $(q>>1)$, что может быть достигнуто при больших интенсивностях излучения $(I_0>10^{10}\ Bm/м^2)$ корни k_n определяются из уравнения $I_0(k_n)=0$. В этом случае коэффициенты A_n, как это следует из (18) будут равны

$$A_n=\frac{C_0}{k_nJ_1^2(k_n\rho)} \tag{21}$$

а решение (19) примет вид

$$C(\rho,\tau)\big|_{q>1}\approx C_0\sum_{n=1}^{\infty}\frac{J_0(k_n\rho)}{k_nJ_1(k_n)}\exp(-qk_n^2-1)\tau \tag{22}$$

Отметим, что все ряды достаточно быстро сходятся, так как

$$k_1<k_2<k_3<\ldots<k_n<\ldots$$

Экспоненциальная функция времени быстро уменьшается.

Смена знака поляризации $\gamma<0$ приводит к спектральной задаче для дифференциального уравнения, решение которого можно представить в виде

$$C(\gamma<0)=BI_0(k\rho),\qquad 0<\rho<1/2 \tag{23}$$

где $I_0(k\rho)$ – модифицированная функция Бесселя нулевого порядка.

Механику концентрации наножидкости вдали от оси пучка $(r/r_0>>1)$ можно получить из уравнения (4), пренебрегая в ней слагаемыми $\approx e^{-(r^2/r_0^2)}$, то есть, рассматривая уравнение

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D(\frac{\partial^2C}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r}) \tag{24}$$

$$C(r,0) = C_0 \exp(-r^2/r_0^2), \qquad \left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=0} = 0 \Rightarrow C|_{r=0} \neq \infty, \qquad \left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=R} = 0 \qquad (25)$$

Решение задачи (24)-(25) хорошо известно [5]. Его главная особенность состоит в том, что начальное гауссово распределение концентрации "расплывается" с течением времени, охватывая всё большую часть пространства.

Подведём некоторые итоги.

1. В случае, когда $\gamma > 0$ $(n_ч / n_ж)$ концентрация частиц, как это следует из равенства (19) и (22), убывает по мере удаления от оси пучка, стремясь к нулю. Со временем частицы покидают фиксированную область пространства, что вполне соответствует экспериментальным наблюдениям. Эти утверждения справедливы в рамках приосевого приближения.

2. Безотносительно знака поляризации в случае $(r/r_0 >> 1)$ уравнения устроены таким образом, что перестают зависеть от источника диффузии, то есть мы получаем "свободную" диффузию наночастиц.

3. Смена знака поляризации приводит нас к быстро растущим решениям типа (23), тем самым происходит умножение числа наночастиц в приосевой области светового пучка. Напомним, что эти явления происходят при $n_ч < n_ж$.

Авторы полагают, что полученные результаты углубляют наше понимание физических процессов происходящих в нанжидкостях, подверженных воздействию электромагнитного излучения.

Л И Т Е Р А Т УР А

1. Иванов В. И., Ливашвили А. И. Электрострикционный механизм самовоздействия излучения в жидкости с наночастицами //Вестник Новосибирского государственного университета. Серия «Физика». 2009. Т.4. №2. С.58-60.
2. Иванов В. И., Ливашвили А. И. Самовоздействие гауссового пучка излучения в слое жидкофазной микрогетерогенной среды //Оптика атмосферы и океана. 2009. Т.22. № 8. С.751-752.
3. Коренев Б. Г. Введение в теорию Бесселевых функций. М.: Наука. 1971. С.287.
4. Smith P. W., Ashkin A. Fonr-wave mixing in an artificial kerr medium. Opt.Lett. 1981. V.6. P.284-286.
5. Полякин А. Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2001. С.576.

ВЗРЫВНОЕ ПУЛЬСАЦИОННОЕ ВСКИПАНИЕ ВОДЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ МИКРОЧАСТИЦ, НАГРЕТЫХ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

А. В. Михеенко, А. И. Андреев

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: serg.50@bk.ru

Рассматривается модель взрывного пульсационного вскипания углеродных микрочастиц взвешенных в воде под действием импульсов интенсивного лазерного излучения Проведенные оценки ,показали, что в рассматриваемых условиях взрывное вскипание возможно в углеродных частицах и в воде, окружающей частицу.

При воздействии мощного лазерного излучения на вещество возникает оптико-*акустический эффект, который заключается в генерации звука в облучаемом образце. В* зависимости от плотности энергии поглощенной в поверхностном слое жидкости возможны различные механизмы генерации акустических и ударных волн: тепловое расширение, поверхностное испарение, взрывное вскипание и испарение, оптический пробой [1, 2].

В случае, когда интенсивность падающего излучения достигает величины порядка 1

© Михеенко А. В., Андреев А. И., 2018

МВт/см^2 , в жидкости с достаточно большим коэффициентом поглощения происходит взрывное вскипание и испарение жидкости, когда происходит перегрев жидкости и переход её в метастабильное состояние. Генерации звука при взрывном вскипании и испарении и моделям взрывного пульсационного вскипания и испарения при падении лазерного излучения на поверхность вещества посвящено достаточно большое количество работ (см., например, [3,4,5]), хотя последовательное описание объемного вскипания в условиях лазерного воздействия оказывается весьма сложной задачей, которая пока еще далека от своего окончательного решения.

Согласно этим моделям за счёт испарения и теплопроводности жидкости максимум температурного профиля в ней с температурой T_{max} смещается от поверхности на некоторую глубину. В этом случае в режиме поверхностного испарения давление на поверхность жидкости $p(T_0)$ будет меньше давления насыщенных паров $p_s(T)$, а максимальная температура T_{max} больше температуры на поверхности жидкости T_0, и прилегающий к поверхности слой жидкой фазы при достаточно большой температуре будет находится в метастабильном перегретом состоянии. Это состояние может существовать только при температурах, которые не выше температуры спинодали T_c (P), и которая определяет границу области абсолютной неустойчивости метастабильной жидкой фазы. При приближении максимальной температуры к температуре спинодали T_c в окрестности T_{max} происходит взрывной переход жидкой метастабильной фазы в газообразное состояние. Возникающее при этом избыточное давление $p = p_s(T_{max}) - p(T_0)$ будет разрушать и выбрасывать поверхностный слой жидкой фазы, которая прилегает к образовавшейся паровой прослойке. При этом за счёт импульса давления отдачи будет возникать акустический сигнал. После этого будет формироваться новая граница раздела фаз, и подобные процессы могут повторяться периодически. Периодичность взрывных вскипаний зависит от длительности импульса и интенсивности лазерного излучения.

В работе [6] мы сообщали о генерации звука под действием лазерного излучения. в воде, в которой взвешены микрочастицы. Акустические сигналы при этом имели вид пульсаций. В условиях этой задачи в поверхностную плёнку воды добавлялись частицы мелкодисперсного углерода (графита). Частицы находились в поверхностном слое на глубине примерно до 1 мм. Вода слабо поглощает излучение с длиной волны 1,06 мкм. Графит относится к проводникам электрического тока, и коэффициент поглощения излучения на этой длине волны у него порядка $\alpha \approx 10^5$см$^{-1}$. Лазерное излучение непосредственно поглощалось углеродными частицами и нагревало их, а за счёт теплопроводности нагревались слои воды, прилегающие к частицам.

Для оценок рассмотрим модель углеродной частицы в виде куба со стороной h = 10 мкм, на которую сверху перпендикулярно одной из поверхностей падает лазерное излучение интенсивностью $I_0 \approx 10^6$ МВт/см^2. Глубина проникновения излучения в частицу при этом будет $\delta = 1/\alpha = 10^{-5}$ см, что гораздо меньше, чем h. Это будет характерный размер нагреваемой непосредственно излучением области. В данном случае можно рассматривать перенос тепла из этой области только вглубь частицы и в прилегающий к этой поверхности частицы слой воды.

Характерная, глубина проникновения тепла, как известно (см., например, [7]), оценивается по формуле

$$L = \sqrt{a\,t} \quad , \qquad (1)$$

где a – коэффициент температурапроводности вещества, t – характерное время нагрева. Оценим эту величину по формуле (1) за время длительности лазерного импульса $t_и \approx 40$ нс. Для углерода $a \approx 10^{-5}$ м^2 / с, и $L_г \approx 0.6$ мкм.

Поток тепла через определённый слой вещества можно оценить по формуле [7]

$$Q = \varkappa \frac{\partial T}{\partial x} \approx \varkappa \frac{\Delta T}{L} \quad , \qquad (2)$$

где $\varkappa$ – коэффициент теплопроводности вещества, Δ T – характерная величина изменения температуры. Используя эту формулу можно оценить отношение потоков тепла от нагретой поверхности внутрь частицы $Q_г$, и в окружающую воду $Q_в$ при одинаковой разности температур Δ T. Если взять коэффициент теплопроводности графита $\varkappa_г \approx 60$ Вт/(м К), для воды $\varkappa_в \approx 0.56$

Вт/(м К), а для характерной глубины проникновения тепла в графит и в воду значения полученные ранее, можно видеть что $Q_г >> Q_в$, то есть поток тепла от нагреваемой поверхности будет в основном направлен вглубь частицы.

В этом случае для оценки температуры на поверхности частицы можно воспользоваться одномерным уравнением теплопроводности с экспоненциально спадающим с глубиной источником, которое имеет вид [8].

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{q\exp -\frac{x}{\delta}}{\delta \rho Cp}, \qquad (3)$$

где ρ – плотность вещества, C_p - его удельная теплоёмкость, q = A q_0, A – поглощательная способность вещества, $q_0 = I_0$ – в данном случае интенсивность лазерного излучения на поверхности вещества. Для графита A ≈ 0.95.

Решение этого уравнения для приращения температуры на поверхности вещества (при x = 0) за время длительности лазерного импульса имеет вид [8].

$$\Delta T\ (t) = \frac{I_0\delta}{k}\left\{\frac{2}{\delta}\sqrt{\frac{at}{\pi}} + \exp\left(\frac{at}{\delta^2}\right)erfc\left(\sqrt{\frac{at}{\delta^2}}\right) - 1\ \right\} \qquad (4)$$

где erfc(z) = 1- erf(z) – дополнительная функция ошибок Лапласа.

Подставляя в формулу (4) характерные значения параметров для искусственно полученных марок графитов, $a \approx 10^{-5}$ м^2/ с , коэффициент теплопроводности $k \approx 15$ Вт/(м. К), $\delta \approx 10^{-7}$ м, и интенсивность лазерного излучения на поверхности частицы $I_0 \approx 10^{11}$ Вт/м^2, получим зависимость, график которой приведен на рис. 1.

Полученные значения для приращения температуры следует считать оценочными, так как в действительности при достижении температур порядка 1000 К теплофизические параметры графита могут измениться в несколько раз. Графиты обладают высокой анизотропией. Теплофизические параметры в различных направлениях могут также отличаться в несколько раз. При температуре порядка 2600 К в некоторых образцах начинается плавление, а при температуре 3800 К начинается кипение.

Согласно техническому описанию используемого в нашей работе [6] лазера, интенсивность его излучения может достигать 10^{10} -- 10^{11} Вт/м^2. Используя одиночные импульсы этого излучения, мы наблюдали яркое свечение углеродных частиц и слышали звук характерный для ударных волн. При этом пъезоэлектрический преобразователь регистрировал акустические сигналы. Как правило, наблюдалась последовательность двуполярных акустических импульсов. Длительность этих импульсов была порядка 1 мкс, что гораздо больше, чем длительность лазерного импульса (~40 нс). Это характерно для высокой плотности мощности лазерного излучения, когда происходят фазовые переходы в облучаемом образце.

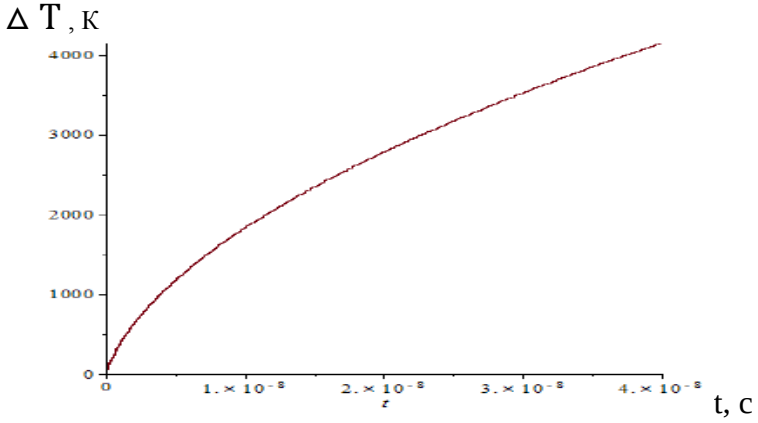


Рис. 1. Зависимость температуры на поверхности частицы от времени длительности лазерного импульса

Такой вид акустического сигнала можно объяснить взрывным вскипанием углеродных

частиц, которые непосредственно нагреваются лазерным излучением, и слоя воды, который находится в контакте с частицами. Температуре спинодали T_c углеродных частиц может быть меньше, чем температура, до которой перегреваются частицы при максимальной интенсивности лазерного излучения. В этом случае происходит взрывное вскипание поверхности частицы и возникает акустический импульс. Также нужно учитывать вклад в акустический сигнал взрывного вскипания плёнки жидкости, которая прилегает к частице. и которая будет нагреваться за счёт отвода тепла от частицы. Температура спинодали для воды ($T_c \approx 580$ К) на много меньше, чем для углерода, и за счёт этого может произойти несколько пульсационных вскипаний. Характерное время теплопроводности для частиц, которые мы использовали для оценок, порядка 10 мкс, что сравнимо с продолжительностью акустического сигнала, который состоит из последовательности акустических импульсов.

Таким образом, возможно, что, первый акустический импульс вызван взрывным вскипанием частицы, а последующие – взрывным вскипанием воды, окружающей частицу.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Бункин Ф. В., Трибельский М. И. Нерезонансное взаимодействие мощного оптического излучения с жидкостью // УФН. Т. 130. № 2. 1980. С. 193-240.
2. Лямшев Л. М. Лазеры в акустике // УФН. 151. 1987.С. 479-527.
3. Витшас А. Ф., Корнеев В. В., Сенцов Ю. И. Взрывное вскипание диэлектрических жидкостей при радиационном разогреве // Квантовая электроника. Т. 16 № 4. 1980. С. 796-800.
4. Сенцов Ю. И. Модель взрывного пульсационного испарения диэлектрических жидкостей при облучении их поверхностей интенсивным лазерным излучением // ПМиТФ. Т. 49. № 6. 2008. С. 17-24.
5. Андреев С. Н., Орлов С. В., Самохин А. А. Моделирование взрывного вскипания при импульсном лазерном воздействии // Труды института общей физики им. А. М. Прохорова. Т. 60. 2004. С. 127-148.
6. Михеенко А. В. Силютин И. В. Генерация звука частицами в жидкости под действием лазерного излучения // Вестник Тихоокеанского государственного университета. № 4. 2014. С. 25-29.
7. Либенсон М. Н., Яковлев Е. Б., Шандыбина Г. Д. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Часть 1. СПб: СПбГУ ИТМО, 2008. 141с.
8. Либенсон М. Н., Яковлев Е. Б., Шандыбина Г. Д. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Часть 2. СПб: СПбГУ ИТМО. 2014. 181с.

ВИСМУТАТЫ СТРОНЦИЯ $Sr_2Bi_2O_5$ И $Sr_6Bi_2O_{11}$: ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГИИ УРБАХА И «УРБАХОВСКИХ ФОКУСОВ» ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

Е. О. Нащочин[1,a], Д. С. Штарев[2,b], А. В. Штарева[2,c], А. В. Сюй[1,d]

[1]ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
[2]ФГБУН «Институт тектоники и геофизики им. Ю.А. Косыгина» ДВО РАН
Хабаровск, e-mail: [a]nashchochin@gmail.com, [b]shtarev@mail.ru, [c]shtareva_anna@mail.ru, [d]alsyuy271@gmail.com

В работе приводятся данные о зависимости оптических свойств двух различных висмутатов стронция от температуры. Показано, что температурная зависимость энергии Урбаха для двух висмутатов стронция коренным образом отличается друг от друга. Установлено аномальное поведение урбаховского фокуса для висмутата стронция Sr2Bi2O5. Сделано предположение о существовании фазового перехода в висмутате стронция Sr2Bi2O5 в области 305 К.

Введение. Висмутаты стронция являются перспективными фотоактивными материалами. На их основе могут быть разработаны фотокатализаторы для очистки воды и воздуха от органических и неорганических поллютантов [1], для производства водорода за счет фотокаталитического разложения воды и т. д. Согласно теоретическим исследованиям [2], наиболее перспективными составами для этого являются висмутаты стронция, в катионной подрешетке которых количество атомов стронция превышает количество атомов висмута. То

© Нащочин Е. О., Штарев Д. С., Штарева А. В., Сюй А. В., 2018

есть таких висмутатов стронция, которые на фазовой диаграмме [3] расположены в области от 50 до 100 мол.%. Существенным фактором, ограничивающим возможности практического использования висмутатов стронция, является относительно большое значение ширины запрещенной зоны. Так, для висмутата стронция $Sr_2Bi_2O_5$ ширина запрещенной зоны составляет 3,2 эВ [4]. Такая ширина запрещенной зоны делает невозможной его активацию излучением видимого диапазона. Однако известно, что полупроводниковые фотоактивные материалы могут быть активированы излучением с энергией фотонов меньшей, чем ширина запрещенной зоны. Такое поглощение излучения в несобственное области становится возможным благодаря электрон-фононным взаимодействиям и описывается правилом Урбаха (1).

$$\alpha = \alpha_0 \cdot e^{-\frac{h\upsilon}{E_U}}, \quad (1)$$

где α – коэффициент поглощения, E_U – энергия Урбаха.

В представленной работе сделана попытка оценить температурные зависимости энергии Урбаха для двух перспективных фотоактивных материалов – висмутатов стронция $Sr_2Bi_2O_5$ и $Sr_6Bi_2O_{11}$.

Эксперимент. Синтез висмутатов стронция $Sr_2Bi_2O_5$ и $Sr_6Bi_2O_{11}$ осуществлялся твердофазным методом. В качестве прекурсоров был использован оксид висмута и нитрат стронция. Твердофазный синтез осуществлялся в два этапа: на первом этапе прекурсоры спекались при 645 ^{0}C с течение 2 часов, на втором – 72 часа при 775 ^{0}C.

Для решения сформулированной задачи для каждого из висмутатов стронция были зарегистрированы спектры диффузного отражения в диапазоне температур от 100 К до 573 К (рис. 1 А, 1 Б). Для регистрации спектров диффузного отражения использовалась приставка к спектрофотометру, позволяющая прецизионно контролировать температуру образца [5].

На практике определение истинного коэффициента поглощения полупроводника является нетривиальной задачей. Поэтому на практике для определения энергии Урбаха вместо α используют функцию Кубелки-Мунка (2).

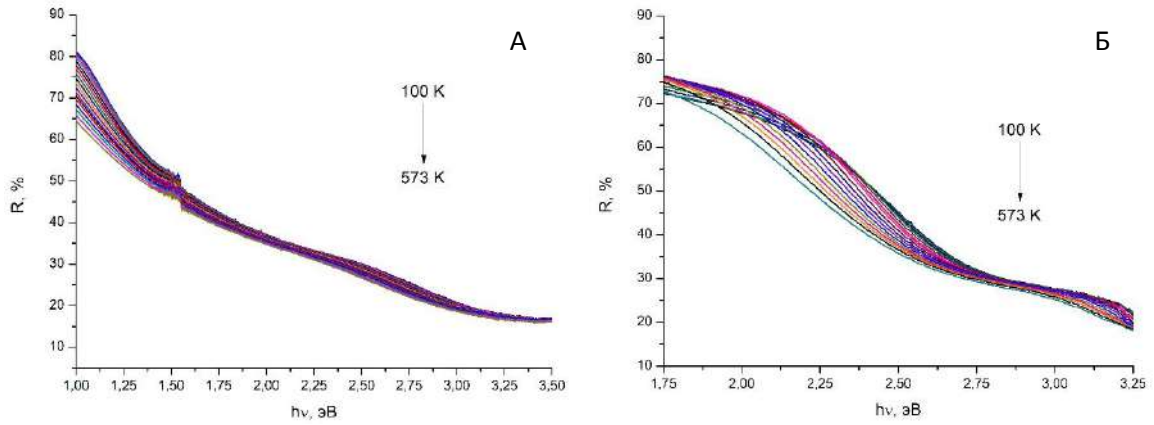


Рис. 1. А – Эволюция спектров диффузного отражения висмутата стронция $Sr_2Bi_2O_5$ при нагреве; Б – Эволюция спектров диффузного отражения висмутата стронция $Sr_6Bi_2O_{11}$ при нагреве

$$F = \frac{(1-R)^2}{2R}, \quad (2)$$

где R – коэффициент отражения.

Видно, что в обоих случаях при повышении температуры образца наблюдается смещение края собственного поглощения.

Если прологарифмировать выражение (1) и учесть переход от коэффициента поглощения к функции Кубелки-Мунка (2), получим:

$$\ln(F) = \ln(F_0) - \frac{h\nu}{E_U}. \quad (3)$$

Результаты и обсуждение. На рис. 2 А и 2 Б представлены результаты расчетов, выполненных по формуле (3).

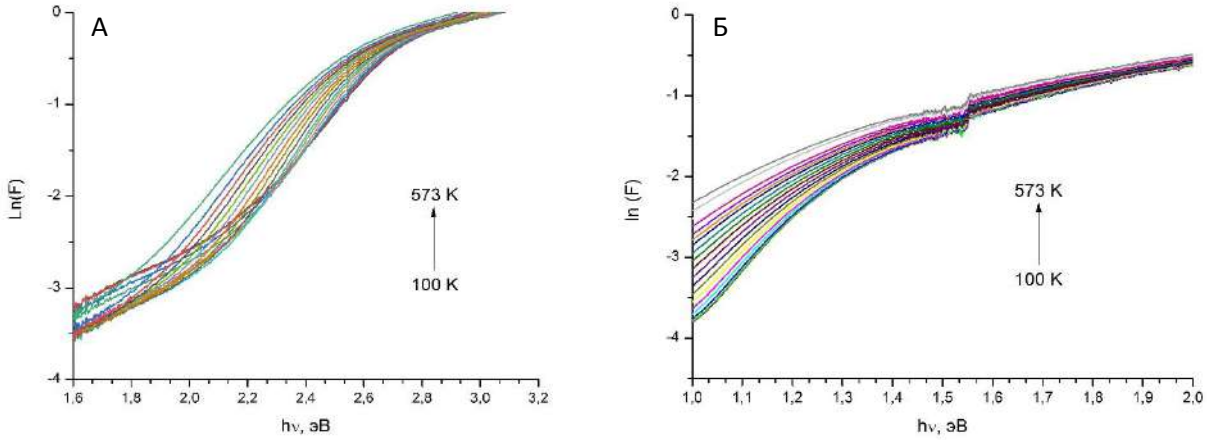


Рис. 2. А – Преобразование Кубелки-Мунка для спектров диффузного отражения висмутата стронция Sr2Bi2O5 при различных температурах; Б – Преобразование Кубелки-Мунка для спектров диффузного отражения висмутата стронция $Sr_6Bi_2O_{11}$ при различных температурах

Из выражения (3) явствует, что энергия E_U может быть найдена, если области вблизи собственного поглощения на рис. 2 описать линейной функцией. Результаты подобного анализа приведены на рис. 3.

Типичная температурная зависимость энергии Урбаха имеет следующий вид. В области низких температур энергия Урбаха не зависит от температуры. Обычно эту область аттрибутируют с собственными или примесными дефектами. Начиная с определенной температуры между энергией Урбаха и температурой устанавливается прямая зависимость. Это связано с ростом тепловой энергии, запасенной кристаллической решеткой. Таким образом, из рис. 6 видно, что висмутат стронция $Sr_6Bi_2O_{11}$ имеет хорошо известный и объясненный, «канонический» вид температурной зависимости энергии Урбаха.

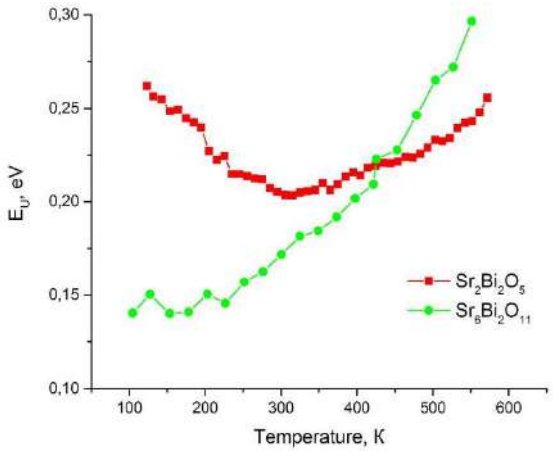


Рис. 3. Температурная зависимость энергии Урбаха для висмутатов стронция $Sr_2Bi_2O_5$ и $Sr_6Bi_2O_{11}$

Температурная зависимость энергии Урбаха висмутата стронция $Sr_2Bi_2O_5$ имеет особенность в области низких температур (рис. 3). Нагрев от 100 К до 300 К сопровождается значительным снижением энергии Урбаха.

Значения энергии Урбаха для каждой температуры, приведенные на рис. 3 получены на

основе анализа наклона линейной части зависимостей, приведенных на рис. 2. На рис. 4 приведены эти линейные аппроксимации.

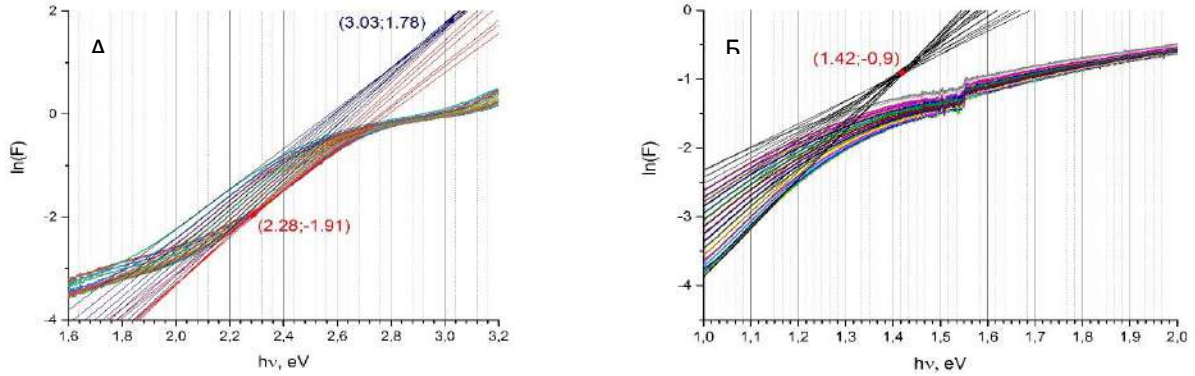


Рис. 4. А – Положение Урбаховского фокуса для висмутата стронция $Sr_2Bi_2O_5$;
Б – Положение Урбаховского фокуса для висмутата стронция $Sr_6Bi_2O_{11}$

Для висмутата стронция $Sr_6Bi_2O_{11}$ (рис. 4 А) экстраполяция линейных участков спектров диффузного отражения показывает, что все они пересекаются в одной точке, называемой Урбаховским фокусом. Для висмутата стронция $Sr_2Bi_2O_5$ (рис. 4 Б) экстраполяция линейных участков спектров диффузного отражения демонстрирует более сложное поведение Урбаховского фокуса. В определенном температурном диапазоне Урбаховский фокус располагается на спектре в точке с координатами (2.28;-1.91). При достижении температуры в 305 К точка Урбаховского фокуса перемещается в точку (3.03;1.78). При этом температура, при которой наблюдается миграция Урбаховского фокуса, в точности соответствует температуре, при которой ниспадающий тренд температурной зависимости энергии Урбаха сменяется возрастающим трендом (рис. 3). Такое поведение Урбаховского фокуса для висмутата стронция $Sr_2Bi_2O_5$ может свидетельствовать о существовании фазового перехода в области 305 К.

Благодарности. *Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-73-00007).*

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Твердофазный синтез и фотокаталитическая активность висмутатов стронция SrxBiyOz (x>y) / Д. С. Штарев [и др.] // Вестник ДВО РАН. 2018. № 2 (198). С. 237-247.
2. The dependence of the conduction band edge of the alkali earth metal bismuthates on their composition / D. S. Shtarev [et al.] // Optical and Quantum Electronics. 2018. №50:228.
3. Hallstedt B. Thermodynamics and Phase Diagram of the Ag-Cu-O System / B. Hallstedt, L. J. Gauckler // Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry. 2003. № 27. P. 177-191.
4. Effects of La doping on structural, optical, electronic properties of Sr2Bi2O5 photocatalyst / Y. Obukuro [et al.] // J. of Alloys and Compounds. 2016. № 658. P. 139-146.
5. In situ study of photo- and thermo-induced color centers in photochromic rutile TiO2 in the temperature range 90-720 K / V. N. Kuznetsov [et al.] // Photochem. Photobiol. Sci. 2016. №15. P. 1289-1298.

СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРИЕМА СИГНАЛОВ СДВ-ДИАПАЗОНА НА РАЗЛИЧНЫХ ТРАССАХ

В. И. Нестеров

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: vinestor@mail.ru

Рассмотрено влияние внезапных ионосферных возмущений на фазу принимаемого сигнала на четырех трассах. Экспериментальные данные получены по приемам фазы сигналов радионавигационной системой «Омега». Трассы практически одинаковой длины. Передатчики расположены в двух точках.

Исследование распространения радиоволн ОНЧ-диапазона (частоты 5 ÷ 30 кГц) важно как в невозмущенных, так и в аномальных условиях, поскольку они широко используются в дальней радиосвязи, в системах навигации. Во время вспышки Солнце представляет собой мощный источник рентгеновского и ультрафиолетового излучений, а также потока частиц с широким спектром энергий, в том числе космических лучей (E ~ 1 ГэВ), субрелятивистских протонов с энергиями от 1 до 1000 МэВ, движущихся по спирали вдоль силовых линий геомагнитного поля и достигающих полярных областей за время от 80 мин до 4 час., и облаков ионов и электронов с меньшими энергиями, которые попадают на Землю через 20 – 40 час. [1]. Увеличение интенсивности рентгеновского излучения, наблюдаемое во время хромосферных вспышек, немедленно вызывает возрастание электронной концентрации в ионосфере.

Рентгеновское излучение вспышек разделено на два диапазона: низкоэнергетичный – мягкое рентгеновское излучение с длинами волн более 1 Å и энергиями менее 12 кэВ (этот диапазон представляет наибольший интерес при исследовании внезапных ионосферных возмущений) и высокоэнергетичный – жесткое рентгеновское излучение с $\lambda < 1$ Å и энергиями выше 12 кэВ. Такое изменение спектра во время вспышки позволяет солнечному излучению глубже проникать в ионосферу (коэффициент поглощения быстро уменьшается с уменьшением длины волны) и вызывать ионизацию на малых высотах.

Для сравнительного анализа, связанного с влиянием рентгеновского излучения на распространение радиоволн ОНЧ-диапазона рассматривались 4 трассы: две –передатчик радионавигационной системы «Омега» расположен на Хайку (Гавайские острова), две – передатчик расположен на острове Ля Реюньон в Индийском океане. В табл. 1 приведены основные параметры трасс, на которых проводились измерения фазы сигналов радионавигационной системы «Омега». Приемные пункты располагались: один в Хабаровске (Россия), другой в Inubo (Japan). Расстояние между приемными пунктами – 1502 км.

Таблица 1

Основные параметры трасс

Трасса распространения	Длина трассы, км	Азимут, град.	Рабочие частоты, кГц
Гавайи – Inubo	6096	68.9	10.2, 11.05, 13.6
Гавайи – Хабаровск	6573	41.3	10.2, 11.05, 13.6
Ля Реюньон – Хабаровск	11018	272.7	10.2, 11.05, 13.6
Ля Реюньон – Inubo	10967	285.4	10.2, 11.05, 13.6

Угол расхождения между трассами составляет: Ля Реюньон – Хабаровск и Ля Реюньон – Inubo – 13.7^0, а между Гавайи – Хабаровск и Гавайи – Inubo – 15.3^0, соответственно. Практическое равенство углов означает, что длины трасс приблизительно одинаковы.

В работе [2] рассматривались результаты воздействия потока рентгеновского излучения на фазу принимаемого сигнала для четырех различных трасс распространения и различных частот. Изменение фазы принимаемого сигнала носит сложный характер, т.к. необходимо учитывать значительное число факторов, например, зенитный угол Солнца, географическое

© Нестеров В. И., 2018

расположение трассы, интенсивность вспышечного потока рентгеновского излучения и т.д. Рассмотрено изменение фазы принимаемых сигналов от потока рентгеновского излучения в диапазоне длин волн 0.5 – 4 Å во время вспышки без учета влияния других факторов. Основой для анализа были отклонения фазы принимаемого сигнала при внезапных ионосферных возмущениях (ВИВ), которые проходили одновременно на данной трассе распространения и фиксированной частоте. Необходимо отметить, что уверенный прием происходил только на частоте 10.2 кГц (это, в первую очередь, относится к приемному пункту, расположенному в Хабаровске. На других частотах (11.05 и 13.6 кГц) часто наблюдалось явление, которое носит название «потеря фазового цикла».

Данные для приемного пункта, расположенного в Inubo, взяты из ежемесячного бюллетеня “Ionospheric Data in Japan” [3].

На рис.1 представлена зависимость отклонения фазы принимаемого сигнала во время ВИВ для передающего пункта, расположенного на Гавайских островах. Обработка фазовых аномалий ($\Delta\varphi$) показала, что она достаточно хорошо аппроксимируется соотношением

$$\Delta\varphi = a + blg\Gamma,$$

где a, b – коэффициенты, зависящие от частоты сигнала и длины трассы.

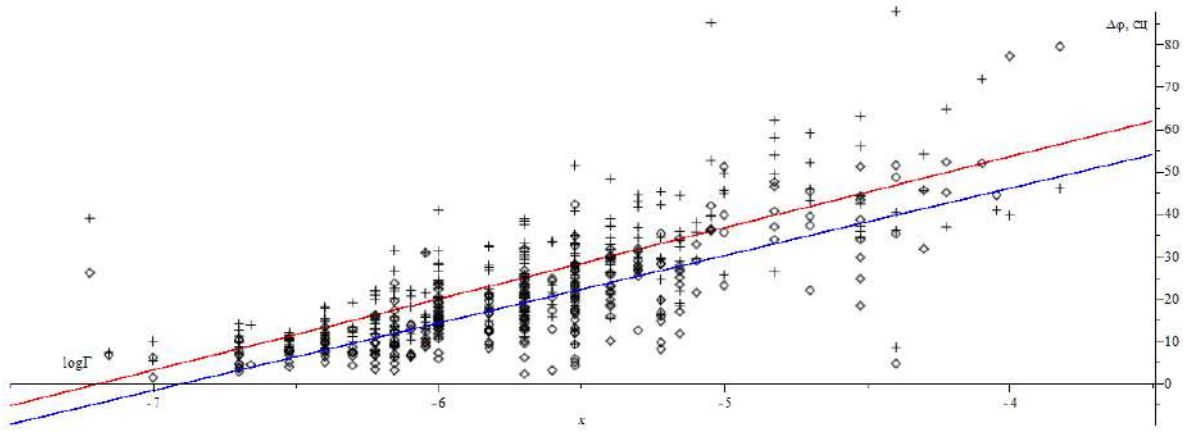


Рис. 1. Зависимость отклонения фазы принимаемого сигнала от lgΓ для трасс Гавайи – Хабаровск (крест) и Гавайи – Inubo (окружность), частота 10.2 кГц. Соответствующие аппроксимирующие кривые – Гавайи – Хабаровск – красная, Гавайи – Inubo – синяя

На рис. 2. – аналогичные результаты, только передающий пункт расположен на острове Ля Реюньон. К несколько неожиданным результатам можно отнести то, что прямые аппроксимации для передающего пункта на Гавайских островах параллельны друг другу, в то время как для передатчика на Ля Реюньон – пересекаются. Это можно объяснить тем, что трассы для передатчика на Гавайях расположены в одном полушарии – северном, в то время как для другого – как в северном, так и южном полушариях, при этом они пересекают геомагнитный экватор, в окрестностях которого на распространение радиоволн рассматриваемого диапазона оказывается значительное влияние. По мнению авторов [4], что при прохождении линии восхода в районе геомагнитного экватора, высота ночной ионосферы имеет наибольшее значение.

Основные данные, полученные на исследуемых смежных трассах, приведены в таблицах 2 и 3. Как видно из этих таблиц, в основном уравнения регрессии довольно хорошо согласуются между собой для рентгеновского излучения как в диапазоне длин волн 1 – 8 Å, так и для 0.5 – 4 Å. Также значения дисперсии (между экспериментальными результаты и линией регрессии) довольно хорошо согласуются между собой для этих же длин волн рентгеновского излучения во время солнечных вспышек.

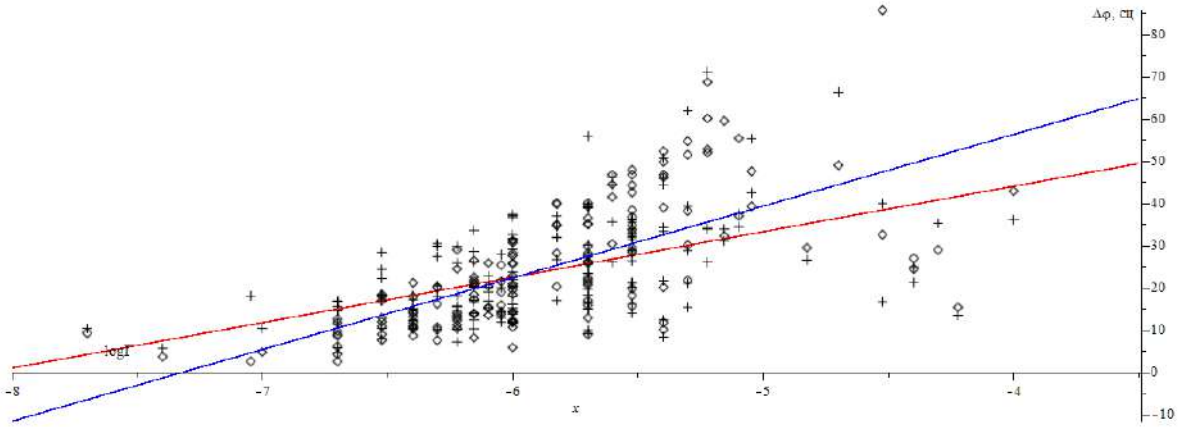


Рис. 2. Зависимость отклонения фазы принимаемого сигнала от lgГ для трасс Ля Реюньон – Хабаровск (крест) и Ля Реюньон – Inubo (окружность), частота 10.2 кГц. Соответствующие аппроксимирующие кривые – Ля Реюньон – Хабаровск – красная Ля Реюньон – Inubo – синяя

Таблица 2

Сравнительные характеристики для передатчика, расположенного на Гавайях

	Частота 10.2 кГц		Частота 11.05 кГц		Частота 13.6 кГц	
	Хабаровск	Inubo	Хабаровск	Inubo	Хабаровск	Inubo
Уравнение регрессии в диапазоне длин волн 1 – 8 Å	20.221logГ + 121.929	20.061logГ + 114.988	8.021logГ + 59.366	13.568logГ + 85.277	19.769logГ + 114.692	19.999logГ + 113.419
дисперсия	86.357	52.494	45.562	21.719	57.315	62.529
Уравнение регрессии в диапазоне длин волн 0.5 – 4 Å	16.796logГ + 120.723	16.343logГ + 112.264	6.572lgoГ + 58.350	10.763logГ + 81.442	15. 961logГ + 111.130	16.673logГ + 114.151
дисперсия	83.661	55.671	43.214	19.047	59.847	56.657

Таблица 3

Сравнительные характеристики для передатчика, расположенного на о. Ля Реюньон

	Частота 10.2 кГц		Частота 11.05 кГц		Частота 13.6 кГц	
	Хабаровск	Inubo	Хабаровск	Inubo	Хабаровск	Inubo
Уравнение регрессии в диапазоне длин волн 1 – 8 Å	12.291logГ + 84.144	20.214logГ + 123.663	0.684logГ + 20.060	19.501logГ + 118.541	14.850logГ + 92.725	22.786logГ + 134.937
дисперсия	111.940	125.417	40.327	28.156	81.945	132.950
Уравнение регрессии в диапазоне длин волн 0.5 – 4 Å	10.771logГ + 87.061	16.960logГ + 124.112	1.364logГ + 24.777	14.232logГ + 104.361	11.589logГ + 87.241	18.038logГ + 128.196
дисперсия	111.940	118.040	39.901	32.588	118.040	131.229

Угол наклона для линий регрессии определяется частотной зависимостью принимаемого сигнала, так как эффективная высота отражения волноводного канала Земля – ионосфера определяется частотой принимаемого сигнала.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Митра А. П. Воздействие солнечных вспышек на ионосферу Земли. М.: Мир. 1977. 370 с.
2. Нестеров В. И. Статистическое распределение фазы сигнала ОНЧ-диапазона при внезапных ионосферных возмущениях//Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2016. Т.19. № 2. С.16-22.
3. Ionospheric Data in Japan. V.44-46. №1-12. 1992-1994.
4. Орлов А. Б., Азарнин Г. В. Основные закономерности распространения сигналов СДВ-диапазона в волноводном канале Земля – ионосфера/Проблемы дифракции и распространения волн: сб. ст. Л.: Изд-во ЛГУ, 1970. Вып X. С.3-107.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГЕНЕРАЦИИ СИГНАЛОВ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ В МНОГОКАНАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

В. Н. Овчарук, О. А. Марченко

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: ovaler@ya.ru

В работе приводится результаты по моделированию периодической последовательности импульсных сигналов заданной формы. Дано теоретическое обоснование выбранных методов. Разработан программно-аппаратный комплекс на базе программных и технических средств компании National Instruments, позволяющий произвольно формировать заданные последовательности акустических импульсов.

В связи с постоянным усложнением промышленных изделий, применения новых материалов и технологий, возрастают требования к обеспечению надёжности и безопасности в эксплуатации. При этом актуально стоит задача диагностики состояния изделий. Одними из способов решения проблемы являются методы неразрушимого контроля (НК) [1]. Согласно ГОСТ 18353-79 существует несколько методов НК, одним из которых является метод акустической эмиссии (АЭ). Он основан на регистрации сигналов, излучающихся при пластическом деформировании твёрдых тел, развитии дефектов, трении и т.д. Особенностью данного метода является обнаружение и регистрация только развивающихся дефектов, что позволяет классифицировать дефекты по степени их опасности для контролируемого объекта [2, 3, 4].

При решении задач диагностики методами акустической эмиссии возникает проблема имитации исходного сигнала при исследовании акустико-эмиссионных свойств объекта и проверке работоспособности системы в целом. Одним из способов имитации акустического сигнала является формирование последовательность импульсов сложной формы, характеристики которых заранее не известны и определяются в процессе исследования. Для этого необходим программируемый генератор электрических сигналов с заданными свойствами.

В отличие от сигналов стандартных форм (синусоида, треугольный, ступенчатый), непериодические сигналы специальной формы сложнее реализовать из-за отсутствия каких-либо описывающих их математических функций. Однако, при определённых обстоятельствах такой сигнал можно рассматривать как периодический и принять в качестве математической модели таких сигналов периодическую функцию времени. Такая функция может быть представлена в виде бесконечного гармонического ряда – ряда Фурье [5]. В тригонометрической форме через синусные и косинусные составляющие ряд Фурье запишется следующим образом:

$$f(t) = \frac{A_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left[Bm_k \cdot \sin(kW_1 t) + Cm_k \cdot \cos(kW_1 t) \right], \quad (1)$$

© Овчарук В. Н., Марченко О. А., 2018

где: $\frac{A_0}{2}=\frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_0+T} f(t)dt$ – постоянная составляющая сигнала; $Bm_k=\frac{2}{T}\int_{t}^{t_0+T} f(t)\cdot\sin(kW_1t)dt$ – амплитудные значения синусных членов ряда; $Cm_k=\frac{2}{T}\int_{t}^{t_0+T} f(t)\cdot\cos(kW_1t)dt$ – амплитудные значения косинусных членов ряда; k – порядковый номер гармонической составляющей; $W_1=2\pi/T$- основная угловая частота (частота первой гармоники)

Если имеется только графическое изображение сигнала, то амплитудные значения составляющих членов ряда можно найти, применяя *графоаналитический метод разложения* в ряд Фурье. Этот метод представляет собой численное интегрирование функции *f(t) методом прямоугольников* [6]. При этом вычисление интеграла сводится к нахождению суммы конечного числа слагаемых. Период функции $f(W_1T)$, равный 2π, разбивают на n равных частей ΔW_1t. Расстояние от начала координат до середины i-го интервала запишем:

$$W_1t_i=(i-0.5)2\pi/n\,,\quad (i=1\ldots n) \qquad (2)$$

Подставляя в функцию $f(t)$ вместо t выражение (2) получим значение функции $f(t)$ на середине i-го интервала. Тогда формулы нахождения амплитуд составляющих членов ряда примут вид:

$\frac{A_0}{2}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(W_1t_i)$ – постоянная составляющая сигнала;

$Bm_k=\frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[f(W_1t_i)\cdot\sin\left(k(i-0.5)\frac{2\pi}{n}\right)\right]$ – амплитудные значения синусных членов ряда;

$Cm_k=\frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[f(W_1t_i)\cdot\cos\left(k(i-0.5)\frac{2\pi}{n}\right)\right]$ – амплитудные значения косинусных членов ряда.

Основываясь на вышеописанном методе моделирования сигнала в программной среде LabVIEW 2013 [7] был разработан виртуальный прибор (ВП) для формирования и генерирования видеоимпульсов и радиоимпульсов произвольной формы с регулировкой всех основных параметров сигнала.

Режим «Формирование сигнала» используется для создания сигналов специальной формы, требуемой пользователю. Форма сигнала задается двумя одномерными массивами точек-координат. Количество точек, описывающих функцию, и количество гармоник также произвольны. Начальная точка должна быть (0; y0). Таким образом, точками описывается один период генерируемого сигнала. Результатом работы ВП в этом режиме является одномерный массив точек, который можно сохранить в отдельном файле. Лицевая панель ВП в режиме «Формирование сигнала» показана на рис. 1.

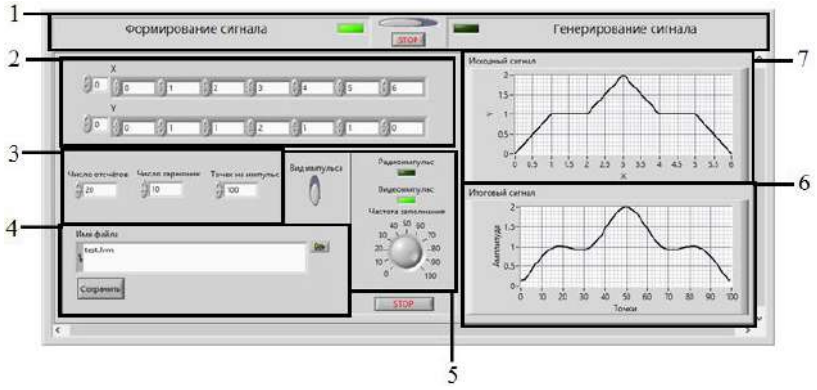


Рис. 1. Лицевая панель ВП в режиме «Формирование сигнала»:
1 – панель выбора режима работы ВП, 2 – задание формы сигнала, 3 – настройка параметров разложения сигнала в ряд Фурье, 4 – выбор имени и расположения файла, 5 – настройка вида импульса, 6 – график исходного импульса, 7 – график итогового импульса

Блок-диаграмму генератора сигналов можно условно разделить на две части - расчет амплитуд составляющих членов ряда и формирование итогового сигнала. Расчет амплитуд составляющих членов ряда (рис. 2) является необходимой составляющей процесса моделирования. В этой части программы исходный сигнал аппроксимируется и подвергается разложению в ряд Фурье. Формирование итогового сигнала (рис. 3) является итоговой частью. В этой части программы производится расчет точек итогового сигнала в зависимости от заданных параметров. Сформированный таким образом электрический сигнал записывается в файл и может быть неоднократно использован в режиме запроса.

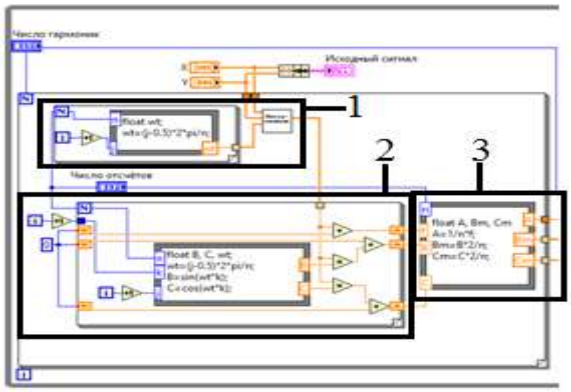


Рис. 2. Блок-диаграмма расчета амплитуд составляющих членов ряда:
1 – аппроксимация исходного сигнала, 2 – интегрирование методом прямоугольников,
3 – вычисление итоговых амплитуд составляющих членов ряда

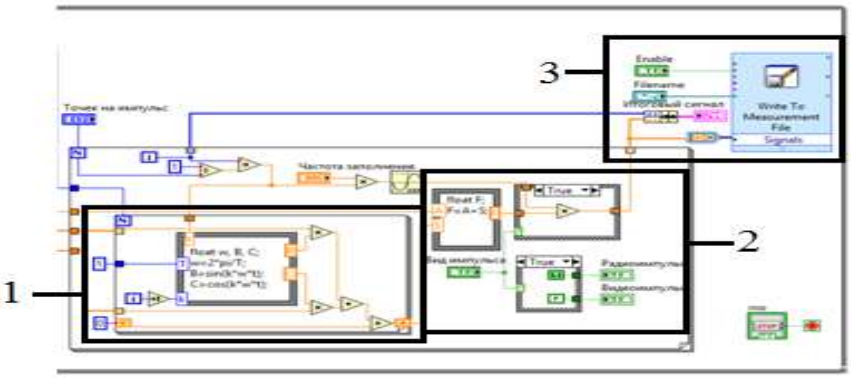


Рис. 3. Блок-диаграмма формирования итогового сигнала:
1 – вычисление суммы амплитуд составляющих членов ряда в заданной точке, 2 – формирование итогового значения функции в зависимости от выбранного вида импульса (видеоимпульс или радиоимпульс), 3 – запись массива точек импульса в файл

В режиме «Генерирование сигнала» ВП работает как генератор импульсов, сформированных в процессе моделирования. Настраиваются амплитуда, длительность и частота повторения импульсов. Можно сгенерировать как одиночный импульс, так и непрерывную последовательность. Лицевая панель ВП в режиме «Генерирование сигнала» показана на рис. 4.

Блок-диаграмма, поясняющая работу ВП в режиме «Генерирование сигнала» показана на рис.5. Из файла считывается массив точек, описывающих форму импульса. Для создания паузы между импульсами в зависимости от длительности и частоты повторения в конец массива добавляется массив «нулевых» точек. Также на основе этих параметров рассчитывается требуемая частота выдачи точек, и в зависимости от неё выбирается объем буфера (для корректной работы объем буфера обычно составляет 1/10 от частоты выдачи точек).

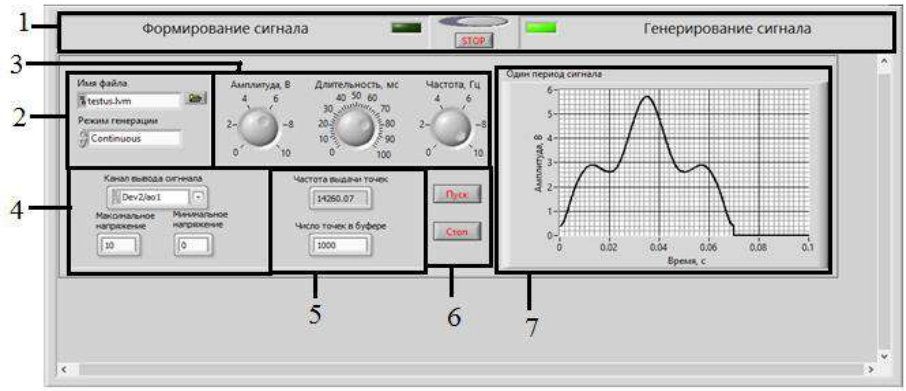


Рис. 4. Лицевая панель ВП в режиме «Генерирование сигнала»:
1 – панель выбора режима работы ВП, 2 – выбор файла с сигналом и режима генерации
3 – настройка параметров генератора, 4 – выбор канала аналогового вывода DAQ -устройства
5 – задание объёма буфера, 6 – элементы контроля генератора, 7 – график одного периода генерируемой последовательности

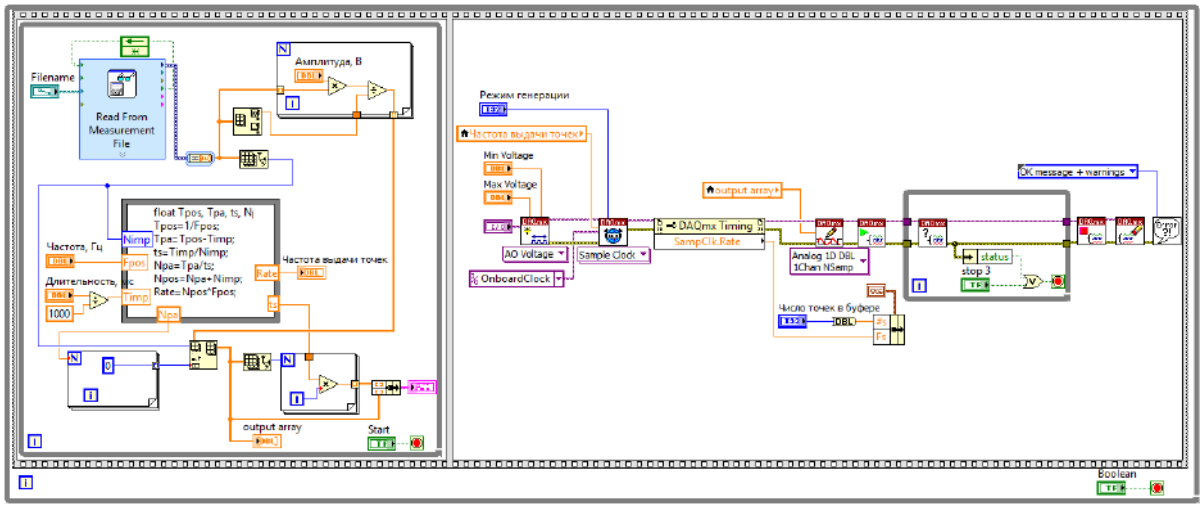


Рис. 5. Блок-диаграмма ВП в режиме «Генерирование сигнала»

В заключении можно отметить, что разработанные программно-аппаратные средства могут быть использованные в системах НК в качестве контролируемого источника акустического излучения. А так как операции регистрации спектра сигнала АЭ обязательно должна предшествовать процедура оценки АЧХ системы «объект-преобразователь», приемный преобразователь должен быть аттестован непосредственно на объекте контроля с использованием дополнительных средств метрологического обеспечения. Таким образом, в состав любой установки спектрального анализа сигналов АЭ должен быть обязательно включен источник акустического излучения с известным спектром, АЧХ которого можно произвольно формировать исходя из требований поставленной задачи. Точность полученной модели сигнала зависит от выбора количества интервалов разбиения при интегрировании (которое определяется автоматически), а так же от выбора количества гармоник.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Овчарук В. Н. Концепция построения акустико-эмиссионных диагностических систем. Хабаровск: Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, 2015. 253 с.
2. Баранов В. М. Акустическая диагностика и контроль на предприятиях топливно-энергетического комплекса М.: Наука, 1998. 303 с.

3. Грешников В. А., Дробот Ю. Б. Акустическая эмиссия. Применение для испытания материалов и изделий. М.: Изд-во стандартов, 1976. 236 с.
4. Поллок А. А. Акустико-эмиссионный контроль // Металлы (Metals handbook), 9-ое издание, Т. 17. ASM International, 1989. С. 278-294.
5. Вадутов О. С. Математические основы обработки сигналов: учебное пособие. Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2011. 212с.
6. Вычислительная математика: Методические указания / сост. И. В. Епанешникова. Хабаровск: Изд-во ХГТУ, 2004г.
7. Суранов А. Я. LabVIEW 8.20: Справочник по функциям. М.: ДМК Пресс. 2007. 536с.

ИССЛЕДОВАНИЕ БЫСТРОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕМЕНТОВ АППАРАТНО-ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА МНОГОКАНАЛЬНОЙ РЕГИСТРАЦИИ В АКУСТИКО-ЭМИССИОННЫХ СИСТЕМАХ СЕРИИ «EMIS»

В. А. Павлов, В. Н. Овчарук

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: slava-95@mail.ru

В статье описано исследование быстродействия многоканального аппаратно-программного комплекса, реализованного на базе DAQ устройств компании National Instruments, регистрации акустико-эмиссионных сигналов. Целью исследования является оценка быстродействия основных компонентов программного комплекса.

Акустико-эмиссионные приборы предназначены, в основном, для применения на крупномасштабных промышленных объектах. В подобных условиях от аппаратуры требуется износостойкость, возможность приёма сигналов акустической эмиссии (АЭ) с распределенных приёмных преобразователей и регистрация параметров нагружения. Для удовлетворения подобных требований необходимо применение многоканальных систем.

Число каналов определяет возможности аппаратуры и область её применения. Трех- и более канальная аппаратура раскрывает возможности метода акустической эмиссии. Появляется возможность точной локации в определенной области. Это означает, что возможно осуществлять контроль состояния объекта непосредственно в зоне шва или на стыке материала. Однако, в области контроля могут наблюдаться источники шума, обусловленные конструктивными особенностями объекта и для их локации потребуются дополнительные каналы. Поэтому базовый универсальный модуль должен содержать до 8 каналов [1].

В процессе регистрации сигналов считывается большое количество данных. Принятие решения о присутствии сигналов акустической эмиссии происходит после тщательного анализа этих данных. Можно вероятностно оценить соотношение между временными затратами на сам контроль и обработку данных как 30 и 70 % соответственно [2]. Поэтому важнейшее значение имеет качество и возможности аппаратно-программного комплекса (АПК), позволяющие за минимальное время провести экспресс анализ накопленной информации и выдать решение по дальнейшей эксплуатации объекта.

Разработанный в рамках научного исследования АПК позволяет производить захват временной формы сигналов АЭ с предысторией и послезвучанием, помехоустойчивую регистрацию, идентификацию и распознавание сигналов с заданными АЧХ [3]. В условиях постобработки производится анализ спектральных характеристик в оконном режиме, сохранение данных в раздельные директории и отображение АЭ сигналов на раздельных графических экранах.

Программное обеспечение, входящее в состав системы, было разработано в среде NI LabVIEW 2013. В качестве устройства многоканального приема сигнала используется NI USB-6366.

Целью исследования является оценка быстродействия работы составляющих элементов

© Павлов В. А., Овчарук В. Н., 2018

программы при различном числе созданных физических каналов. Основное внимание будет уделено оказываемому влиянию на:

1) Регистрацию послезвучия АЭ сигнала (рис. 1).
2) Длительность визуализации сигнала (рис. 2).

Исследование визуализация сигнала состоит из двух частей:

1) При выводе результатов на 8 графических экранов. В таком случае работа по визуализации сигнала состоит из: осуществление виртуальным прибором деятельности по разделению двумерного массива на одномерные; выдаче одномерных массивов данных на графические экраны.

2) При выводе результатов на 1 графический экран. В этом случае не требуется разделять двумерный массив на одномерный.

При исследовании, длительность послезвучия АЭ сигнала постоянна и равна 60000 сэмплов (три блока данных по 20000 сэмплов в каждом), возбуждение АЭ сигналов происходит с помощью метода «соударение».

Исследование быстродействия АПК будет производиться с помощью функций LabVIEW:

1) Flat sequence – структура последовательного выполнения.
2) Tick Count Express VI – таймер.
3) Local Variable - локальные переменные.

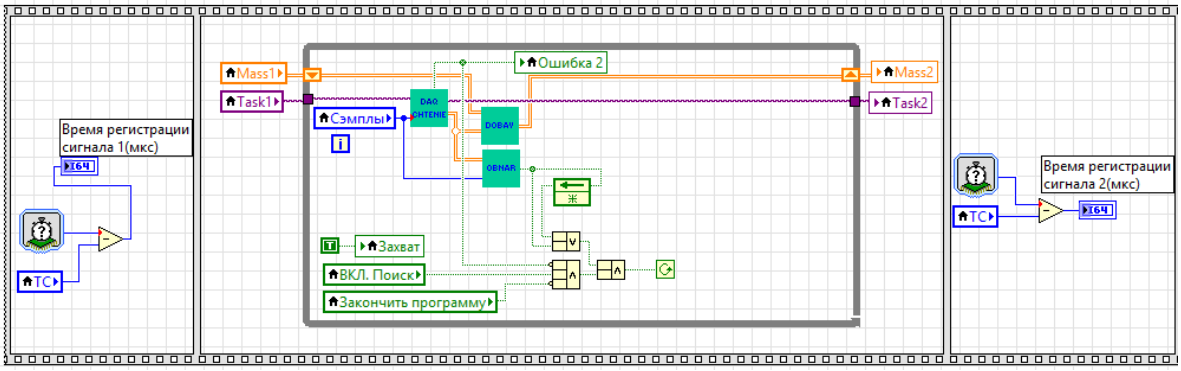


Рис. 1. Часть основной программы регистрации послезвучия АЭ сигнала

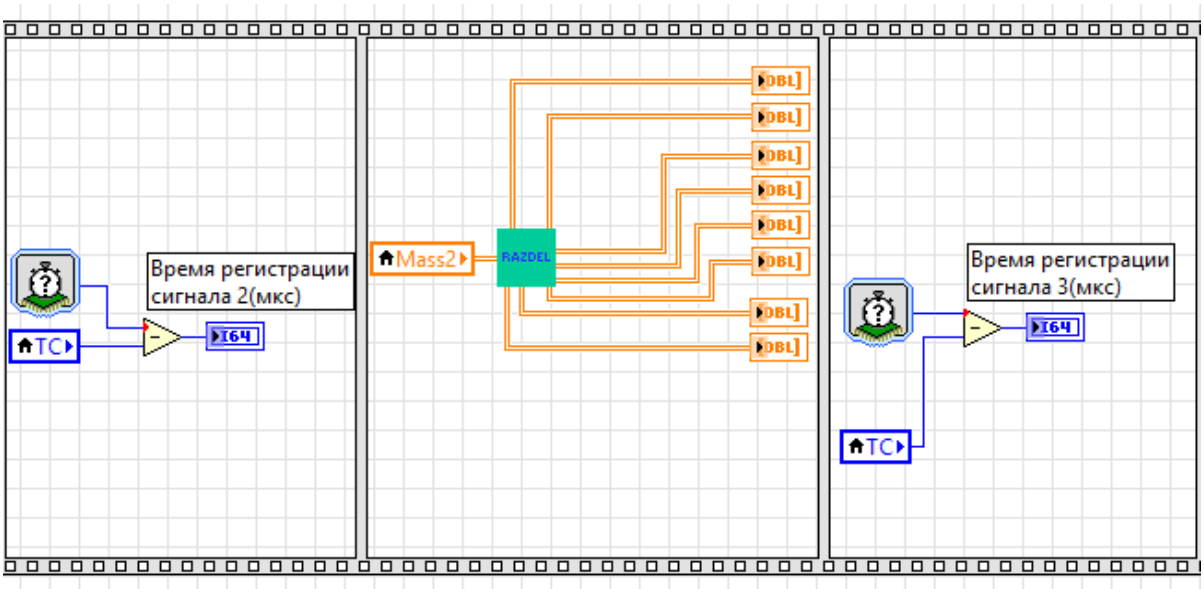


Рис. 2. Часть основной программы визуализации АЭ сигнала

Результаты исследования фиксируются в трех состояниях системы: при 8 созданных физических каналах; при 4 каналах; при 1 канале. Визуализация сигнала имеет две формы вывода, поэтому первая часть исследования приведена на рисунках 3-5, а вторая часть на рисунках 6-8 (длительность 1 – длительность регистрации послезвучания АЭ сигнала; длительность 2 – длительность визуализации АЭ сигнала).

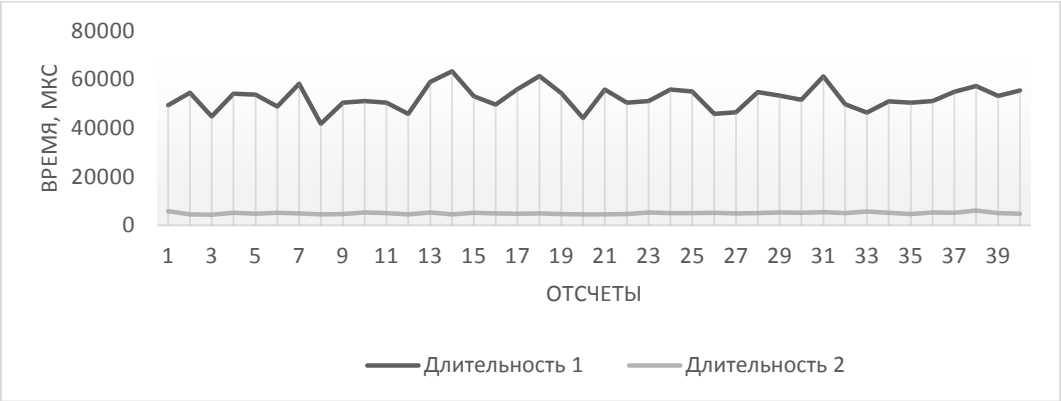


Рис. 3. Результат исследования №1 (при 8 физических каналах)

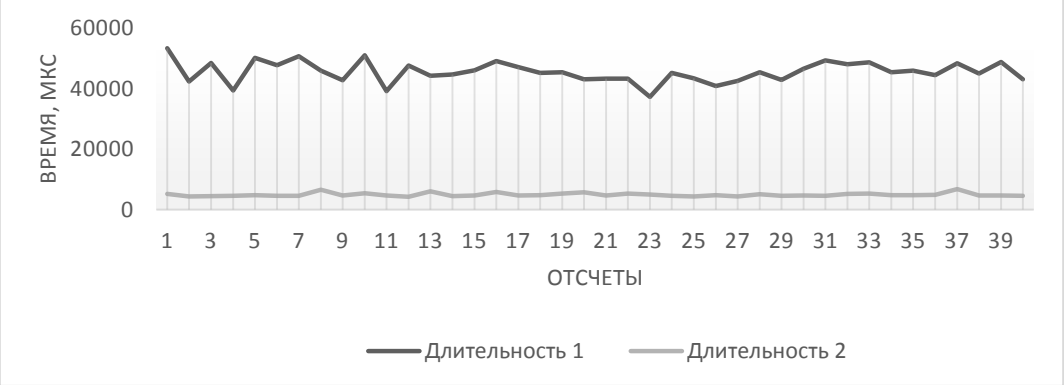


Рис. 4. Результат исследования №1 (при 4 физических каналах)

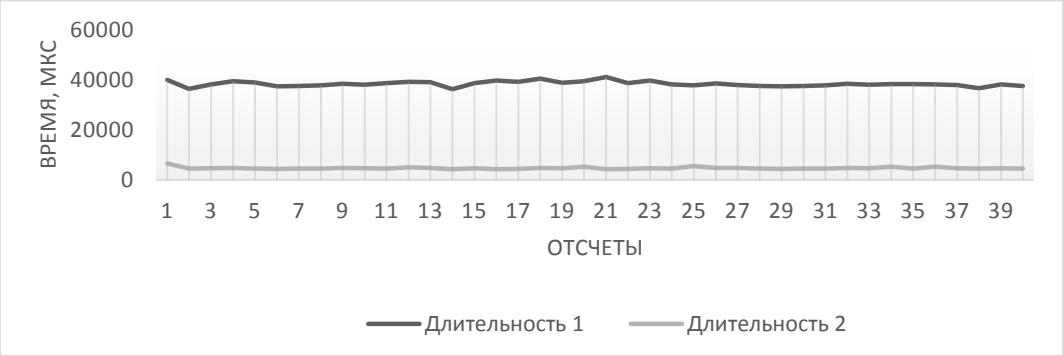


Рис. 5. Результат исследования №1 (при 1 физическом канале)

Рис. 6. Результат исследования №2 (при 8 физических каналах)

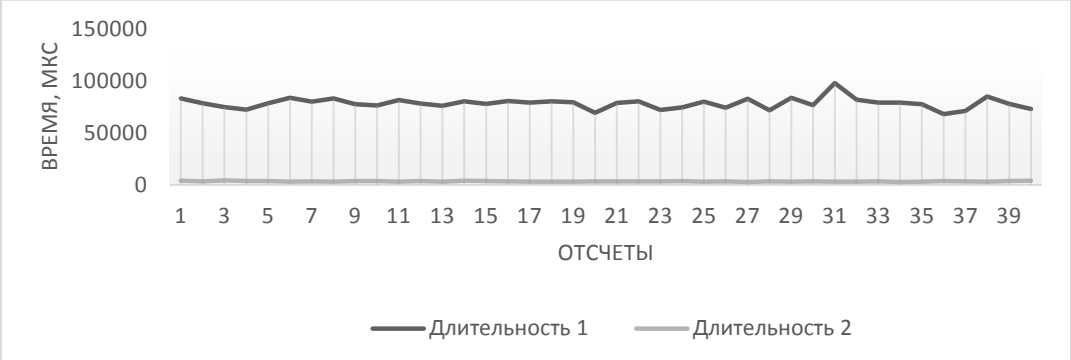


Рис. 7. Результат исследования №2 (при 4 физических каналах)

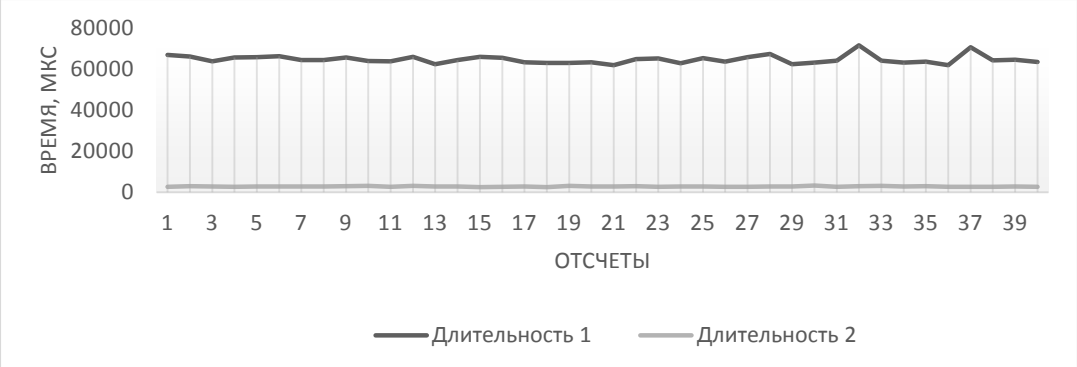


Рис. 8. Результат исследования №2 (при 8 физическом канале)

Полученные результаты исследования №1 (рис. 3-5) позволяют сделать вывод о том, что при изменении числа физических каналов длительность визуализации АЭ сигнала составляет в среднем: 1) 5,1мс; 2) 4,9мс; 3) 4,6мс. По данным результатам возможно сделать заключение:

1. При одинаковом количестве считываемых сэмплов длительность визуализации примерно одинакова и не зависит от работы по получению и преобразованию данных;

2. При уменьшении количества физических каналов в два раза, спад средней длительности визуализации АЭ сигнала составляет 3мс и возможно при увеличении числа физических каналов до 16 подобная тенденция сохранится (проверка гипотезы не возможна на текущем оборудовании, так как доступно только 8 каналов для приёма сигналов).

Полученные результаты исследования №2 (рис. 6 - 8) позволяют сделать вывод о том, что при изменении числа физических каналов длительность визуализации АЭ сигнала составляет в среднем: 1) 3,3мс; 2) 3,2мс; 3) 2,9мс. При данных результатах возможно сделать заключение:

1. «Заключение 1» предыдущего исследования было вторично подтверждено.

2. При уменьшении числа графических экранов с восьми до одного значительно уменьшается время, необходимое на визуализацию сигнала, снижение составляет примерно 2мс при соответствующих количествах созданных физических каналов, но данное увеличение быстродействия уменьшает наглядность получаемой информации.

Разработанный АПК позволяет производить многоканальный сбор данных с DAQ устройства на достаточной для акустической эмиссии быстродействием (подтверждено исследованиями №1 и №2). АПК имеет простор для улучшения составляющих его подпрограмм, путем, как улучшения имеющихся решений реализаций, так и применение новых идей.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Оглезнева Л. А. Сравнительные характеристики акустико-эмиссионных систем // Вестник науки Сибири. 2011. №1(1). С. 211-219.
2. Гуменюк В. А., Пашин В. М., Иванов Ю. Г. Программно-аппаратный комплекс и новые возможности АЭ-диагностики корпусных конструкций // Тяжелое машиностроение. 2003. № 3.
3. Овчарук В. Н. Акустико-эмиссионные информационно-измерительные системы. Пути и методы совершенствования. Хабаровск: Изд-во ТОГУ, 2013. 300 с.

ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ СРЕДЫ ГРАФИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ LABVIEW В МНОГОКАНАЛЬНЫХ АКУСТИКО-ЭМИССИОННЫХ СИСТЕМАХ

В. А. Павлов, В. Н. Овчарук

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: slava-95@mail.ru

В статье описана реализация способа многоканальной регистрации сигналов акустической эмиссии для мониторинга состояния промышленных объектов. Приведено описание лицевой панели программного комплекса для регистрации и анализа акустических сигналов, разработанного в среде программирования LabVIEW. Описана структура и принцип работы аппаратно-программного комплекса, реализованного на базе DAQ устройств компании National Instruments.

Для регистрации АЭ сигналов при испытаниях крупномасштабных промышленных объектов следует применять аппаратуру АЭ в виде многоканальных систем, позволяющих определять, как координаты источников сигналов, так и характеристики сигналов АЭ с одновременной регистрацией параметров нагружения (давления, температуры и т.д.).

Число каналов определяет возможности аппаратуры и область её применения. Трех- и более канальная аппаратура раскрывает возможности метода акустической эмиссии. Появляется возможность точной локации в определенной области. Это означает, что возможно осуществлять контроль состояния объекта непосредственно в зоне шва или на стыке материала. Однако в области контроля могут наблюдаться источники шума, обусловленные конструктивными особенностями объекта и для их локации потребуются дополнительные каналы. Поэтому базовый универсальный модуль должен содержать до 8 каналов [1].

В процессе регистрации сигналов считывается большое количество данных. Принятие решения о присутствии сигналов акустической эмиссии (АЭ) происходит после тщательного анализа этих данных. Можно вероятностно оценить соотношение между временными затратами на сам контроль и обработку данных как 30 и 70 % соответственно [2]. Поэтому важнейшее значение имеет качество и возможности аппаратно-программного комплекса (АПК), позволяющие за минимальное время провести экспресс анализ накопленной информации и выдать решение по дальнейшей эксплуатации объекта.

На основе основных требований к информационно-измерительному комплексу [3], при ограниченной производительности следует проводить экспресс-анализ входного сигнала на

© Павлов В. А., Овчарук В. Н., 2018

предмет обнаружения и достоверности, а дальнейшую идентификацию и уточнение параметров производить в режиме постобработки.

Разработанный в рамках научного исследования АПК позволяет производить захват временной формы сигналов АЭ с предысторией и послезвучанием, помехоустойчивую регистрацию, идентификацию и распознавание сигналов с заданными АЧХ [4]. В условиях постобработки производится анализ спектральных характеристик, сохранение данных в раздельные директории и отображение АЭ сигналов на раздельных экранах событий.

Программное обеспечение, входящее в состав системы, было разработано в среде NI LabVIEW 2013. В качестве устройства многоканального приема сигнала используется NI USB-6366.

На рис. 1 приведен интерфейс пользователя АЭ системы разработанного АПК. Интерфейс имеет раздельные экраны для просмотра временной формы сигнала АЭ, регистрируемой по каждому из каналов. Работа программы предусматривает идентификацию входного сигнала по ряду признаков, в том числе и получаемых от спектральной функции. Вычисление спектра входного сигнала происходит в оконном режиме регистрации, с помощью имеющегося ПК, прошедшего государственную регистрацию [5]. На основе полученных спектральных функций делается вывод о наличии или отсутствии АЭ сигнала на входе АПК. Идентификаторы и обнаружители имеются в каждом канале. Считанный входной сигнал объединяется в блоки данных, для формирования предыстории и послезвучания АЭ сигнала, и передается в соответствующие своему каналу графические экраны и при необходимости сохраняются в раздельные директории.

Рис. 1. Многоканальная АЭ система на основе NI USB-6366
1 – окно задания параметров, 2 – индикация работы программного комплекса (ПК), 3 – графический экран входного сигнала, 4 – окно переключателей работы с ПК, 5 – окно параметров настройки спектрального анализатора

На рис. 2 приведена блок-диаграмма основной части разработанного ПК, осуществляющая: связь с DAQ устройством, считывания информации, обнаружение полезного сигнала, вывод на графические экраны и сохранение результатов.

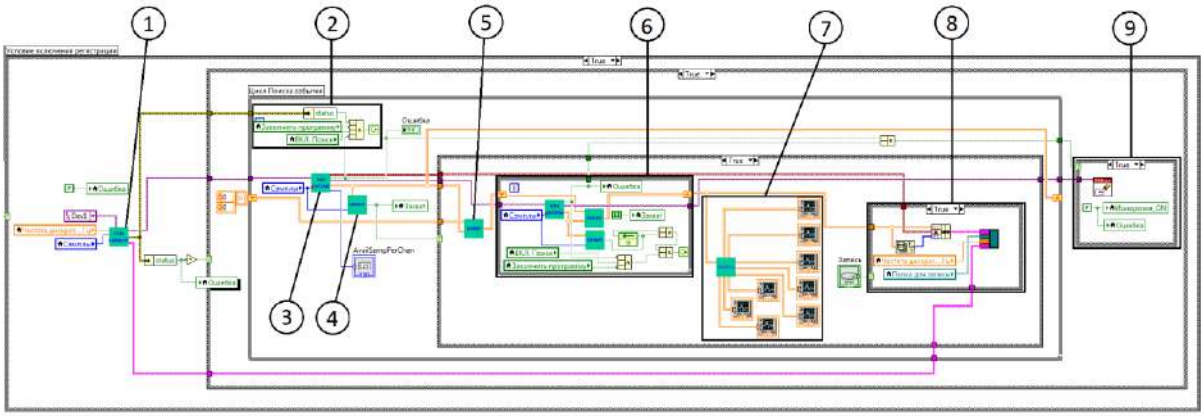


Рис. 2. Блок-диаграмма программного комплекса

Условно блок-диаграмму можно разделить на девять частей, в соответствии с нумерацией на рисунке и выполняемой задачей:

1 – Виртуальный прибор, создающий задачу для каждого канала DAQ устройства и опрашивающий его на наличие ошибок функционирования и связи (рис. 3). Работа вириального прибора основана на создании задачи и настройке её параметров с помощью DAQ устройств низкого уровня, ради увеличения быстродействия и экономии ресурсов ЭВМ;

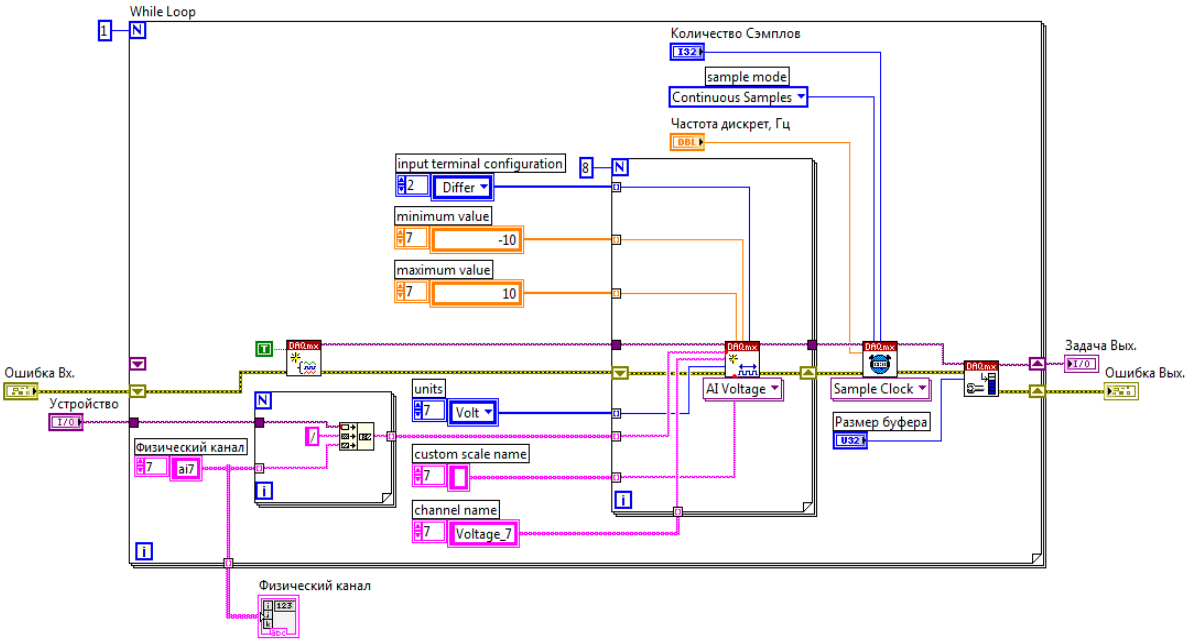


Рис. 3. Блок-диаграмма виртуального прибора

2 – Группа условий, отвечающих за продолжение работы цикла обнаружения и считывания АЭ сигнала. Включает в себя: отсутствие ошибок в работе виртуального прибора, наличие переключателя «Включить поиск сигнала» в рабочем положении и отсутствие нажатия на кнопку выключения программы. Отсутствие истинности в любом из данных условий приведет к тому, что полученный сигнал ошибочен;

3 – Виртуальный прибор, считывающий входной сигнал соответствующего канала. Данные, считанные прибором затем используются для обнаружения АЭ сигнала. Является частью ПК, прошедшего государственную регистрацию [6];

4 – Виртуальный прибор, анализирующий спектр поступающих данных и делающий вывод о наличие АЭ сигнала в соответствующем канале (рис. 4). Основой для работы

виртуального прибора является разбиение двумерного массива данных на одномерные, соответствующие каналам данных, и проведении спектрального анализа на основе идентификатора, индивидуального для каждого канала. Идентификатором является ПК, прошедшим государственную регистрацию [5];

5 – Виртуальный прибор, добавляющий предыдущий массив данных к текущему для формирования массива, имеющего предысторию. Данный прибор разбивает два поступающих двумерных массива на одномерные, после чего происходит их объединение, в соответствии с каналами данных. Таким образом, достигается изменение порядка следования массивов. Конечным этапом является формирование нового двумерного массива, который объединяет в себе новые данные и предыдущую итерацию считывания;

6 – Цикл, в рамках которого происходит считывание заданного количества сэмплов и производится повтор данной процедуры до тех пор, пока не будет сделан вывод об окончании послезвучия АЭ сигнала;

7 – Группа элементов, состоящая из виртуального прибора и восьми графических окон. Работа виртуального прибора основана на разделении двумерного массива данных, содержащего всю поступившую информацию каждого из каналов, на одномерные массивы и их распределение на соответствующие графические экраны;

8 – Структура Case, в которой полученный массив данных сохраняется в заданную заранее директорию;

9 – Структура Case, которая либо очищает созданную задачу (при значении «True»), либо полностью выгружает её из памяти (при значении «False»). Данная структура отвечает за своевременное освобождение ресурсов ЭВМ.

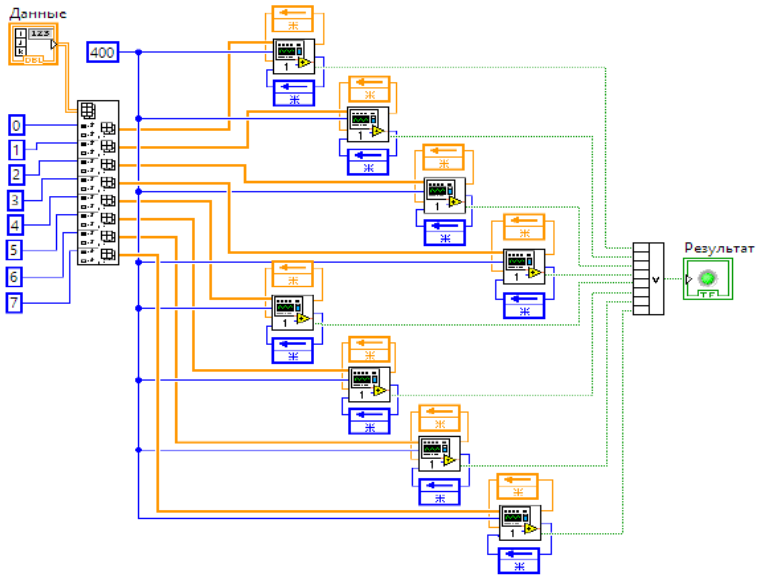


Рис. 4. Блок-диаграмма виртуального прибора

Проведенный анализ показал, что использовать спектральные характеристики сигналов акустической эмиссии невозможно без предварительной оценки АЧХ системы «объект-преобразователь». Методика и результаты исследования АЧХ образцов приведены в работе [3]. Как отмечалось, при ряде испытаний предполагаемые источники акустического излучения находятся в области материала, составляющей до 50% общего объема. В таких условиях невозможно восстановление истинного спектра исходного сигнала путем корректировки его по АЧХ. Такая корректировка внесет только дополнительную погрешность, которая ещё больше может усугубиться предварительным усилителем. Поэтому в программе обработки спектральных функций [5] имеется возможность использовать спектральные характеристики, скорректированные по АЧХ приемного преобразователя.

Программный комплекс позволяет производить многоканальный сбор данных с DAQ устройства. Обнаружитель каждого канала производит в реальном времени анализ поступающих данных на основе его спектральных характеристик и имеет большую вероятность правильной фиксации АЭ сигналов. Добротный АЭ сигнал фиксируется с предысторией и послезвучанием в каждом из каналов устройства. В дальнейшем планируется расширить функционал программы, а именно обеспечить возможность загрузки сохраненных данных в графические окна соответствующих каналов.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Оглезнева Л. А. Сравнительные характеристики акустико-эмиссионных систем// Вестник науки Сибири. 2011. №1(1). С. 211-219.
2. Гуменюк В. А., Пашин В. М., Иванов Ю. Г. Программно-аппаратный комплекс и новые возможности АЭ-диагностики корпусных конструкций // Тяжелое машиностроение. 2003. № 3.
3. Овчарук В. Н. Акустико-эмиссионные информационно-измерительные системы. Пути и методы совершенствования. Хабаровск: Изд-во ТОГУ, 2013. 300 с.
4. Овчарук В. Н. Критерии выбора параметров акустической эмиссии материалов // Датчики и системы. 2014. №3. С. 10-17.
5. Овчарук В. Н. Программа корректировки спектральных функций // Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2014613381 от 26.03.2014.
6. Овчарук В. Н., Пурисев Ю. А. Программный комплекс многоканальной информационно-измерительной системы для регистрации сигналов акустической эмиссии // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015614794 от 28.04.2015.

АНИЗОТРОПИЯ И РЕЗОНАНСНЫЕ ЭФФЕКТЫ В СПЕКТРЕ СЕЙСМИЧЕСКИХ ВОЛН (РАЙОН БУРЕЙСКОЙ ГЭС)

К. С. Рябинкин[1,2], В. В. Пупатенко[1]

[1]ФГБУН «Институт тектоники и геофизики им. Ю.А. Косыгина ДВО РАН»
[2]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: kostya-rowan@mail.ru

Рассмотрены особенности записей землетрясений на станциях локальной сейсмической сети Бурейской ГЭС. С помощью спектрально-временного анализа обнаружены искажения спектра сейсмических волн, связанные как с очагом землетрясения, так и с путём распространения волн и строением земной коры в пункте регистрации. Зафиксировано смещение резонансных частот в зависимости от направления колебаний, которое может быть объяснено анизотропией блокового строения земной коры.

Важными задачами сейсмологии является изучение процессов подготовки землетрясений, включая наблюдение за процессами накопления и разрядки напряжений [1]. Контроль напряжённо-деформированного состояния горных пород может также использоваться для изучения строения земной коры. Одним из определяющих эффектов может служить блоковое деление земной коры. Оно проявляется на различных масштабах, размеры блоков могут варьироваться в широких пределах от сотен километров до сотен метров [2]. Блоковая структура среды в присутствии сильных напряжений в земной коре может проявляться в количестве землетрясений, особенностях их распределения во времени и в пространстве, а также в спектральном составе сейсмических колебаний.

С блоковой делимостью также связано возникновение ряда нелинейных эффектов распространения сейсмических волн и микросейсмических колебаний естественного и техногенного происхождения [3]. Наиболее типичный случай проявления нелинейных

© Рябинкин К. С., Пупатенко В. В., 2018

эффектов – резонансы, приводящие к искажению спектрально-амплитудного состава сейсмических волн и микросейсм, а зачастую и к пониженному их затуханию. Резонансные эффекты могут нести серьёзную угрозу и их необходимо учитывать при оценке сейсмической опасности [4].

Гидроэлектростанции (ГЭС), как одни из наиболее потенциально опасных техногенных сооружений, находятся под пристальным сейсмологическим контролем. Заполнение водохранилища, периодические изменения уровня воды, мощное вибрационное воздействие турбин и гидроагрегатов несомненно оказывают влияние на локальную сейсмичность, хотя остаются дискуссионными вопросы о том, могут ли такие воздействия привести к возникновению более сильных землетрясений или только инициировать уже готовящиеся землетрясения [5].

Объект исследования в настоящей работе – район Бурейской ГЭС. Детальные сейсмические наблюдения там начались только после заполнения водохранилища, что осложняет интерпретацию наблюдаемых особенностей сейсмического процесса и реакции среды на землетрясения. Тем не менее, район Бурейской ГЭС представляет собой хороший естественный полигон для наблюдения за напряжённо-деформируемым состоянием блоков земной коры.

Локальная сейсмическая сеть Бурейской ГЭС с линейными размерами порядка 20 км включает шесть станций, из которых с конца 2011 года одновременно работали три-пять. На станциях установлены регистраторы REFTEK 130-01 и короткопериодные датчики GS-1.

Ранее в работе [2] нами были обнаружены, в том числе, эффекты искажения спектрального состава сейсмических колебаний при близких (расстояния до 50 км) землетрясениях в районе Бурейской ГЭС. На многих сейсмических записях наблюдается перераспределение энергии сейсмических волн в высокочастотную (10-20 Гц и выше) область, отмечено также относительно долгое затухание высокочастотных колебаний.

В настоящей работе указанные эффекты рассмотрены более подробно. Были проанализированы записи 59 землетрясений с октября 2011 г. по май 2013 г., произошедших как в пределах локальной сети, так и на расстояниях, до 300 км (рис. 1). Спектрально-временной анализ записей землетрясений проводился с помощью авторской программы.

На рис. 2 приведены спектрограммы типичных записей землетрясений (эпицентральные расстояния 30 и 130 км), полученных на станциях CHGD («Чеугда») и PAYK («Пайкан»).

Записи не всех проанализированных землетрясений выглядят на каждой станции схожим образом. Основное отличие заключается в наличии или отсутствии колебаний с частотой выше 20 Гц и в том, какая часть сейсмической энергии выделяется на этих частотах.

К смещению спектра землетрясений могут привести три причины (по-отдельности или в сочетании). Во-первых, это строение земной коры непосредственно в пункте наблюдений, в том числе вызывающее резонансы или нелинейные эффекты в виде геоакустической эмиссии. Во-вторых, это строение земной коры на пути прохождения сейсмических волн. Разломные зоны и блоковое строение могут изменять скорость затухания колебаний определённых частот. Наконец, в-третьих, это особенности очага землетрясения: его механизм, сбрасываемые напряжения, прочностные свойства пород и их флюидонасыщенность.

Анализ спектрограмм землетрясений показывает, что все эти причины могут быть выделены и рассмотрены по-отдельности. Так, к проявлениям особенностей очага землетрясения можно отнести тот факт, что каждое относительно удалённое (>30 км) землетрясение регистрировалось всеми станциями со схожим распределением энергии высоких и низких частот, хотя это распределение иногда сильно отличается для разных эпицентральных зон. Наблюдаемые на всех станциях резонансы, с одной стороны сильно отличаются друг от друга (влияние пункта наблюдений), но, с другой стороны, проявляются или не проявляются синхронно (влияние пути распространения волн).

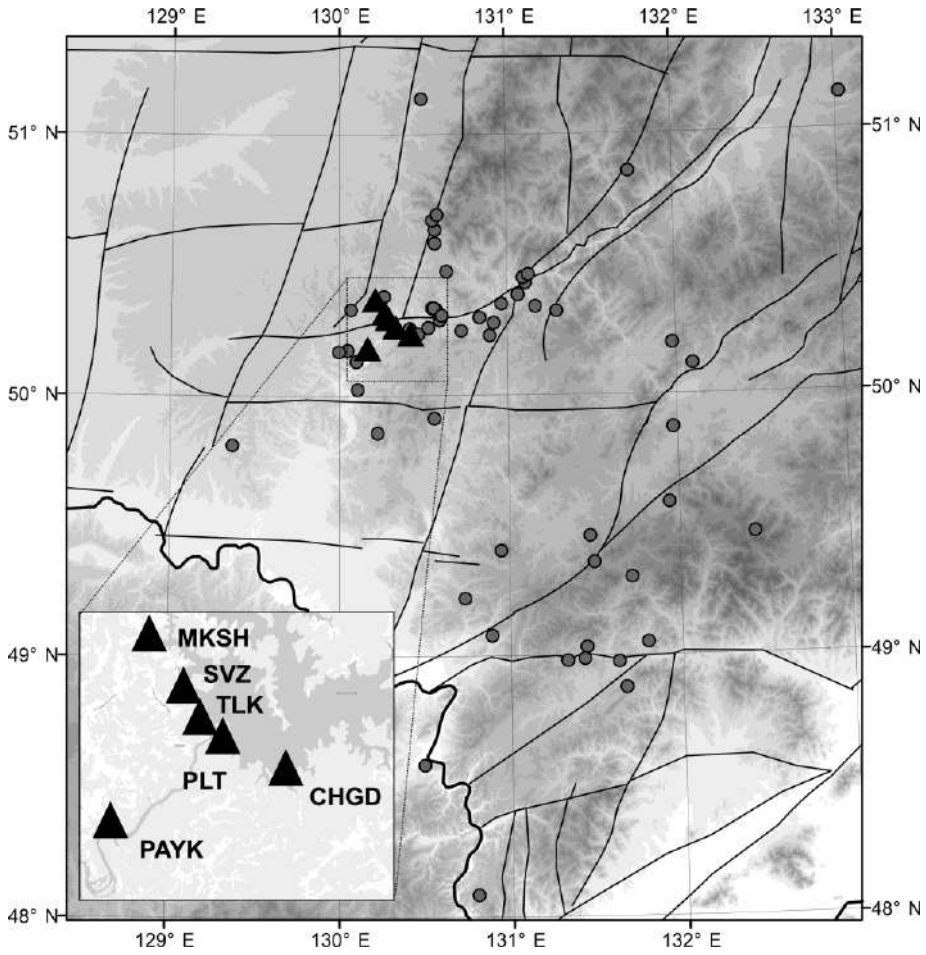


Рис. 1. Станции локальной сейсмической сети Бурейской ГЭС и зарегистрированные с октября 2011 г. по май 2013 г. землетрясения. Тонкими чёрными линиями обозначены основные разломы, в соответствии с [6]

Но наибольший интерес представляют небольшие отличия в резонансных эффектах на разных станциях и на разных компонентах одной и той же станции. Так, на вертикальных компонентах основной резонанс проявлен слабее, а его частоты выше, чем на горизонтальных компонентах (например, 10-14 Гц против 8-12 Гц на станции «Плотина» и 13-21 Гц против 10-14 Гц на станции «Чеугда»). Между двумя горизонтальными компонентами (север-юг и восток-запад) такая же зависимость прослеживается на станции «Чеугда» (соответственно, 11-14 и 10-13 Гц) и, в меньшей степени, на станциях «Плотина» и «Пайкан».

Указанный резонанс очень резко переходит в локальный минимум интенсивности сейсмических волн. При изменении частоты всего на 10-20% спектральная плотность может изменяется на 15-25 дБ, иногда практически до уровня микросейсмического шума. Другими словами, рядом с резонансными частотами расположен другой диапазон, в котором происходит подавление сейсмических колебаний. Этот эффект, опять же, имеет локальными причины возникновения и проявляется только на станциях «Чеугда», «Плотина» и «Пайкан».

Различие резонансных частот при колебаниях в разных направлениях можно объяснить, основываясь на блоковом строении земной коры в районе Бурейской ГЭС [2]. В самом деле, если предположить, что размеры или другие характеристики блоков отличаются во взаимно перпендикулярных направлениях (блоковая делимость имеет направленность и анизотропные свойства), то и резонансы будут проявляться на разных частотах.

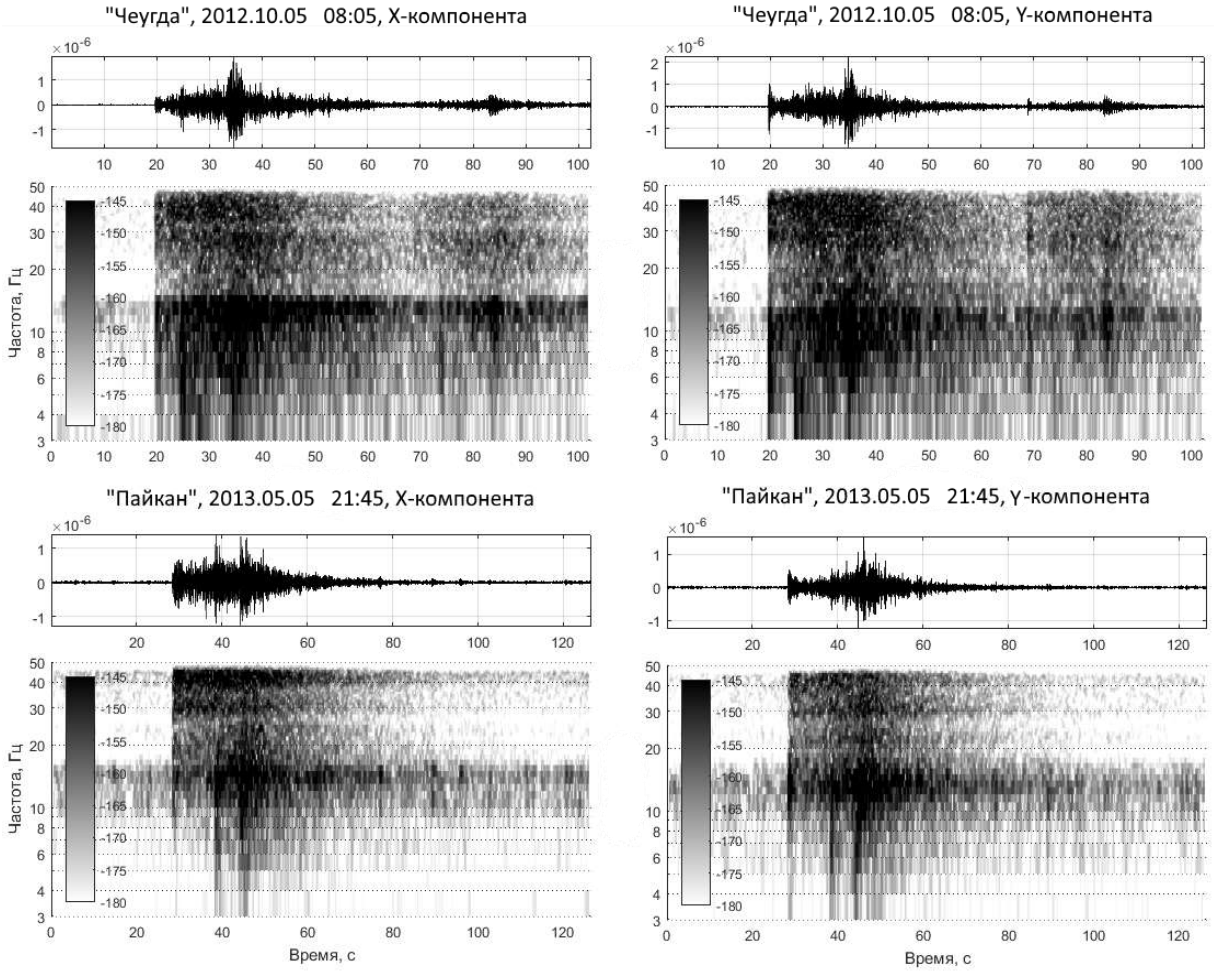


Рис. 2. Волновые формы (сверху, в м/с) и спектрально-временные диаграммы (снизу, в дБ, относительно 1 $м^2/с^4/Гц$) записей землетрясений на станциях «Чеугда» и «Пайкан»

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Спивак А. А., Кишкина С. Б. Исследование микросейсмического фона с целью определения активных тектонических структур и геодинамических характеристик среды // Физика Земли. 2004. № 7. С. 35-49.
2. Трофименко С. В. и др. Динамика геосреды по спектральной плотности мощности микросейсм до и после землетрясений // Тихоокеанская геология. 2017. Т. 36. № 5. С. 20-28.
3. Быков В. Г. Сейсмические волны в пористых насыщенных породах. Владивосток: Дальнаука, 1999. 108 с.
4. Еманов и др. Резонансные свойства верхней части разреза // Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. № 1. С. 26-36.
5. Мирзоев К. М. и др. Наведенная сейсмичность и возможности регулируемой разрядки накопленных тектонических напряжений в земной коре // Физика Земли. 2009. №10. С. 49-68.
6. Забродин В. Ю., Рыбас О. В., Гильманова Г. З. Разломная тектоника материковой части Дальнего Востока России. Владивосток: Дальнаука, 2015. 132 с. + 1 цв. вкл.

ФОРМИРОВАНИЕ ТОНКОПЛЕНОЧНОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ СВЕТОИНДУЦИРОВАННОМ ОСАЖДЕНИИ НАНОЧАСТИЦ В ЖИДКОСТИ

В. К. Хе, В. И. Иванов, Д. А. Сырников

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
г. Хабаровск, e-mail: khe@ngs.ru

Рассматривается теоретическая модель формирования тонкопленочных структур в двухкомпонентной жидкости во внешнем световом поле.

Химические методы образования наноструктур из жидкой фазы хорошо известны, однако, недавние исследования показывают ряд новых возможностей. Например, Дур и Браун показывают [1], как индуцированная светом тепловая диффузия латексных микрочастиц в растворе приводит к образованию двумерного кристалла на охлаждающей поверхности в конвективном потоке жидкости. Концентрация микрочастиц увеличивалась в зоне светового пучка на несколько порядков. Для наночастиц реализация такого метода затруднена, так как коэффициент тепловой диффузии для них намного меньше, чем для микрочастиц [2-3].

Целью данной работы является теоретическое исследование возможности формирования наноструктур в жидкости с помощью лазерного пучка.

Рассмотрим схему предполагаемого эксперимента (Рис. 1): жидкофазная среда с наночастицами (дисперсная фаза) находится под воздействием лазерного излучения с равномерным профилем интенсивности I_0. Под действием сил светового давления в кювете наночастицы начинают осаждаться, формирую на дне кюветы плотный осадок.

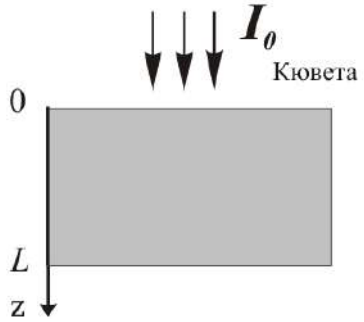


Рис. 1. Схема светоиндуцированного осаждения

На наночастицу действует сила светового давления со стороны мощного опорного луча $F_p = \frac{128\pi^5 a^6}{3c_0\lambda^4}\left(\frac{m^2-1}{m^2+2}\right)n_1 I_0$, где $m = n_2/n_1$, n_1, n_2 – показатели преломления веществ дисперсионной и дисперсной сред соответственно. Скорость частицы $V = \mu F_p$, где $\mu = (6\pi\eta a)^{-1}$ - коэффициент подвижности частиц, η – вязкость жидкости, a – радиус частицы, λ – длина волны излучения, c_0 – скорость света.

Балансное уравнение, описывающее динамику концентрации наночастиц в жидкофазной среде с учётом диффузии [4]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C - V\nabla C, \qquad (1)$$

где C – объемная концентрация дисперсных частиц, D - коэффициент диффузии.

© Хе В. К., Иванов В. И., Сырников Д. А., 2018

В стационарном случае решение (1) с соответствующими граничными условиями имеет вид:

$$C(z, I_0) = \gamma L D^{-1} C_0 I_0 \frac{e^{\gamma z I_0 / D}}{e^{\gamma l I_0 / D} - 1}, \qquad (2)$$

где C_0 – начальная концентрация наночастиц в кювете, $\gamma = 64\pi^4 a^5 n_1 \left(m^2 - 1\right)\left(m^2 + 2\right)^{-1} \left(9 c_0 \lambda^4 \eta\right)^{-1}$.

Полученное решение (2) позволяет сделать оценку роста осаждающейся тонкослойной структуры внизу кюветы. На рисунке 2 показана зависимость скорости осадкообразования от интенсивности излучения и размера наночастиц для следующих параметров: $n_1 = 1.33$, $n_2 = 1.48$, $\eta = 8.9 * 10^{-4}$ *Па*сек*, *L*=1 *см*, T=300 K, λ = 0,632 *мкм.*

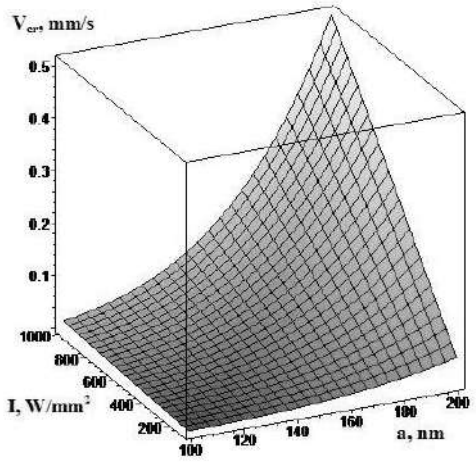


Рис. 2. Зависимость скорости роста структуры от интенсивности пучка и размера наночастиц

Полученная зависимость демонстрирует возможность управления наночастицами в жидкости для формирования тонкопленочных структур. Описанные результаты представляют интерес для разработки оптических методов управления частицами, а также методов диагностики микрочастиц [5-9].

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Duhr S., Braun D. Two-dimension colloidal crystal formed by thermophoresis and convection // Applied physics letters. 2005. V. 86. P. 131921.
2. Zhang F.J., Cheng G.X., Ying X.G. Emulsion and macromolecules templated alginate based polymer microspheres // Reactive Func. Polym. 2006. V. 66. P. 712-719.
3. Debora J.D., Lyon L.A., Thermoresponsive photonic crystals // J. Phys. Chem. B. 2000. V. 104. P. 6327-6331.
4. Ivanov V. I. Ivanova G. D., Krylov V. I., Khe V. K. Diagnostics of nanosuspension by the light-induced pseudo-prism method // В сборнике: Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering Сер. "Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics". 2017. С. 101760V.
5. Иванов В. И., Иванова Г. Д. Светоиндуцированная термодиффузия наночастиц // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В. М. Самсонова, Н. Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. № 8. С. 135-138.
6. Ivanov V. I., Ivanova G. D., Khe V. K. Thermal lens response in the two-component liquid layer // Proc. SPIE. 2015. V. 968042. November 19; DOI: 10.1117/12.2205722.
7. Ivanov V. I., Ivanova G. D., Khe V. K. Light induced lens response in nanosuspension // В сборнике: Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering Сер. "Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics". 2017. P. 101760V.
8. Иванов В. И., Иванова Г. Д., Хе В. К. Термолинзовая спектроскопия двухкомпонентных жидкофазных сред // Вестник Тихоокеанского государственного университета. 2011. № 4. С. 39-44.

9. Иванов В. И., Иванова Г. Д., Хе В. К. Оптическая диагностика полимерных наночастиц // Фундаментальные исследования. 2015. № 11-6. С. 1085-1088.

СВЕТОИНДУЦИРОВАННОЕ ДВИЖЕНИЕ МИКРОЧАСТИЦЫ

С. А. Шведов

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
г. Хабаровск, e-mail:tmeh@festu.khv.ru

Исследована возможность ускорения твердых прозрачных микрочастиц в условиях невесомости с помощью лазерного излучения. Получена зависимость скорости частицы от длины траектории.

Светоиндуцированные силы могут использоваться для ускорения микрочастиц до значительных скоростей [1–3]. Однако кинематические характеристики движения и параметры траектории сильно зависят от параметров лазерного пучка [4].

Целью данной работы является анализ зависимости скорости частицы от длины траектории прозрачной микрочастицы в гауссовом пучке, движущейся за счет сил светового давления.

Для гауссова пучка имеем следующее распределение интенсивности:

$$\mathrm{I(r,z)} = I_0 \exp(-\mathrm{r}^2 / r_0^2)\left(1 + (\lambda z / \pi r_0^2)^2\right)^{-1/2}, \qquad (1)$$

где I_0 – интенсивность гауссова лазерного пучка в перетяжке; λ – длина волны; z – расстояние от плоскости перетяжки вдоль оси пучка; r_0 – радиус пучка в перетяжке.

Сила светового давления на прозрачную микрочастицу:

$$\mathrm{F_{LP}} = 2\pi I_0 a_0^2 q c^{-1}\left(1 + (\lambda z / \pi r_0^2)^2\right)^{-1/2}, \qquad (2)$$

где c – скорость света в вакууме; a_0 – радиус частицы; ρ – плотность вещества микрочастицы, q – безразмерный оптический фактор, определяемый оптическими параметрами микрочастицы [5].

Полученная сила определяет зависимость ускорения микрочастицы от координаты, интегрируя которую получаем выражение для скорости микрочастицы:

$$\mathrm{v} = \{3\pi I_0 r_0^2 (a_0 \rho q c \lambda)^{-1} \ln[\lambda z / \pi r_0^2 + \left(1 + (\lambda z / \pi r_0^2)^2\right)^{1/2}]\}^{1/2}, \qquad (3)$$

Используя получившуюся зависимость построим график для скорости, принимая следующие значения: q = 0,051; ρ = 900 кг/м^3; a_0 =10 мкм; r_0 = 100 мкм; λ_1 = 0,5 мкм и λ_2 = 10 мкм; c = = 3108 м/с; z = 1 м; I_0 = 100 МВт/м^2.

Полученная зависимость показывает, что основной разгонный участок определяется конфокальным параметром гауссова пучка [6].

Световое давление является более эффективным механизмом ускорения микрочастиц для коротковолновых лазерных источников [7] и может использоваться для их транспортировки [8–10].

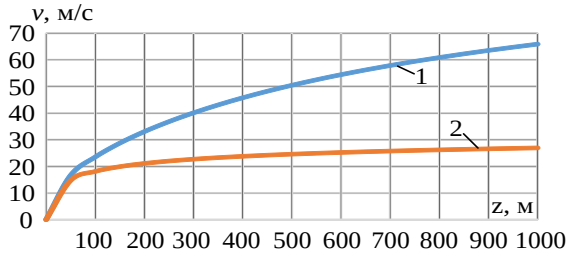


Рис. 1. Зависимость скорости микрочастицы от длины траектории:
1 – длина волны 1; *2* – длина волны 2

Давление света может использоваться для манипуляции микрочастицами, а также для их разгона до значительных скоростей [1–3]. В вязкой среде величина светоиндуцированной ско-

© Шведов С. А., 2018

рости ограничена возникающей при движении силой трения [5–6].

Целью данной работы является анализ зависимости скорости прозрачной микрочастицы в гауссовом пучке от параметров вязкой сплошной среды.

Для гауссова пучка имеем следующее распределение интенсивности:

$$I(r,z) = I_0 \exp(-r^2 / r_0^2)\left(1 + (\lambda z / \pi r_0^2)^2\right)^{-1/2}, \quad (4)$$

где I_0 – интенсивность гауссова лазерного пучка в перетяжке; λ – длина волны; z – расстояние от плоскости перетяжки вдоль оси пучка; r_0 – радиус пучка в перетяжке.

Сила светового давления на прозрачную микрочастицу:

$$F_{LP} = 2\pi I_0 a_0^2 q c^{-1}[1 + (\lambda h / \pi r_0^2)]^{-0.5}, \quad (5)$$

где c – скорость света в вакууме; a_0 – радиус частицы; ρ – плотность вещества микрочастицы, q – безразмерный оптический фактор, определяемый оптическими параметрами микрочастицы [5].

Приравнивая данную силу к силе сопротивления, определяемой законом Стокса, получим выражение для скорости микрочастицы:

$$v = \pi I_0 r_0^2 a_0 q (3\mu c \lambda z)^{-1}, \quad (6)$$

где μ – коэффициент вязкости среды.

Интегрируя (6), получаем зависимость координаты от времени:

$$z = [2\pi I_0 r_0^2 a_0 q (3\mu c \lambda)^{-1} t]^{0.5}, \quad (7)$$

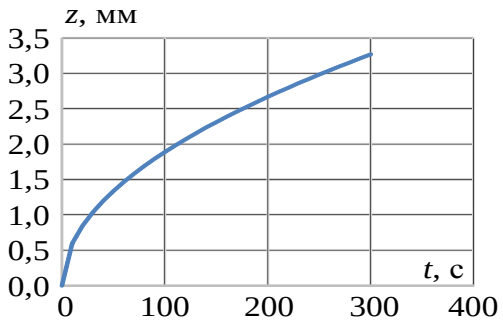


Рис. 2. Зависимость координаты микрочастицы от расстояния для разных интенсивностей светового пучка

Используя получившуюся зависимость, построим график, принимая следующие значения: q = 0,05; ρ = 900 кг/м^3; a_0 =10 мкм; r_0 = 100 мкм; λ = 0,5 мкм; c = 3·10^8 м/с; I_0 = 10^8 Вт^2/м. Полученная зависимость показывает, что ускорение микрочастицы происходит на небольших расстояниях при использовании достаточно маломощных непрерывных лазерных источников [11].

Таким образом, световое давление является эффективным механизмом ускорения микрочастиц, а также их транспортировки [7-12].

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Иванов В. И., Кузин А. А., Окишев К. Н. Оптическая левитация наночастиц: монография. Хабаровск: Изд-во ДВГУПС, 2008. 105 с.
2. Kuzin A. A., Ivanov V. I., Ivanova G. D., Karpets Y. M. Light induced mechanism of the bubble clusters formation // В сборнике: Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering Сер. "Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics". 2017. С.101761X; DOI: 10.1117/12.2268276.
3. Иванов В. И., Иванова Г. Д., Кирюшина С. А., Мяготин А. В. Нанодисперсные среды для динамической голографии // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58. № 11-3. С. 153-156.
4. Ivanov V.I., Ivanova G.D., Kirjushina S.I., Mjagotin A.V. The concentration mechanisms of cubic nonlinearity in dispersive media//Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 735. №1. P. 012013.

5. Ахманов С. А., Никитин С. Ю. Физическая оптика, 2004. 514 с.
6. Ivanov V. I., Ivanova G. D., Khe V. K. Light induced lens response in nanosuspension // В сборнике: Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering Сер. "Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics". 2017. С.101760V.
7. Ivanov V. I. Ivanova G. D., Krylov V. I., Khe V. K. Diagnostics of nanosuspension by the light-induced pseudo-prism method//В сборнике: Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering Сер. "Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics".- 2017. С. 101760V.
8. Иванов В. И., Иванова Г. Д. Светоиндуцированная термодиффузия наночастиц // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В. М. Самсонова, Н. Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. № 8. С. 135-138.
9. Иванов В. И., Иванова Г. Д., Хе В. К. Оптическая диагностика полимерных наночастиц//Фундаментальные исследования. 2015. № 11-6. С. 1085-1088.
10. Ivanov V. I., Ivanova G. D., Kirjushina S. I., Mjagotin A. V. The concentration mechanisms of cubic nonlinearity in dispersive media//Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 735. № 1. P. 012013.
11. Ashkin A., Dziedzic J. M., Bjorkholm J. E., Chu S. Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles / // Optics Letters. 1986. V. 11. № 5. P. 288-290.
12. Иванов В. И., Мяготин А. В., Иванова Г. Д. Электрострикционный механизм светолинзового отклика в наносуспензии // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общ. ред. В. М. Самсонова, Н. Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. Вып. 9. С. 205-209.

ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ГЕТЕРОСТРУКТУР $Sr_6Bi_2O_{11}/SrCO_3$

А. В. Штарева[1], Е. О. Нащочин[2], Д. С. Штарев[1]

[1] ФГБУН «Институт тектоники и геофизики им. Ю.А. Косыгина» ДВО РАН
[2]ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
г. Хабаровск, e-mail: avshtareva@mail.ru

В представленной работе исследуются гетероструктуры, состоящие из висмутата стронция и карбоната стронция. Впервые показано, что фотокаталитическая активность подобных композиций нелинейно зависит от массовой доли карбоната стронция. Установлены две оптимальные концентрации карбоната стронция, при которых наблюдается резкое увеличение фотокаталитической активности гетероструктуры. Показано, что увеличение фотокаталитической активности отдельных гетероструктур связано с отклонением от стехиометрического соотношения между стронцием и висмутом в приповерхностном слое висмутата стронция вблизи интерфейса

Ранее было показано [1], что присутствие карбоната стронция в образцах висмутата стронция может приводить к значительному повышению фотокаталитической активности образца. Несомненная ценность описанной работы заключается в том, что она впервые показала возможность повышения фотокаталитической активности отдельных фотокатализаторов карбонатом стронция. Однако данная работа содержала несколько моментов, требующих дальнейшего всестороннего изучения. В основном, к таковым можно отнести:

1) невозможность, используя выбранную методику синтеза, эффективно управлять соотношением между долей висмутата и карбоната стронция в гетероструктуре;

2) для оценки фотокаталитической активности был использован водный раствор метиленового синего, который согласно некоторым оценкам не может служить для реферрентной оценки фотокаталитической активности фотокатализаторов видимого света;

3) не было предложено никакого механизма, позволившего объяснить наблюдаемый эффект нелинейный эффект зависимости фотокаталитической активности гетероструктуры $Sr_6Bi_2O_{11}/SrCO_3$ от доли карбоната стронция.

Представленная работа направлена на решение перечисленных выше проблем.

© Штарева А. В., Нащочин Е. О., Штарев Д. С., 2018

Получение гетероструктур $Sr_6Bi_2O_{11}/SrCO_3$ осуществлялось в два этапа. На первом этапе производился синтез чистого, фазово однородного висмутата стронция $Sr_6Bi_2O_{11}$. Для этого использовался метод твердофазного синтеза. В качестве прекурсоров были использованы оксид висмута Bi_2O_3 и безводный нитрат стронция $Sr(NO_3)_2$. Стехиометрическое соотношение прекурсоров перетиралось в агатовой ступке в присутствие 3 мл спирта, после чего подвергалось двухстадийному нагреву. На первом этапе смесь прекурсоров отжигали при 650 ^{0}C с течение 4 часов. На втором – при 775 ^{0}C в течение 72 часов. В работе [1] было показано, что такой метод синтеза позволяет получить фазово однородный висмутат стронция $Sr_6Bi_2O_{11}$.

Для получения гетероструктур $Sr_6Bi_2O_{11}/SrCO_3$ в качестве прекурсоров использовался синтезированный висмутат стронция и химически чистый карбонат стронция. Формирование гетероструктуры происходило в ходе спекания прекурсоров при температуре синтеза висмутата стронция в течение 24 часов с периодическим перетиранием через каждые 6 часов. Перед спеканием прекурсоры также перетирались в агатовой ступке в присутствие 1,5 мл спирта.

Управление соотношением между массовыми долями висмутата и карбоната стронция в итоговой гетероструктуре осуществлялось подбором соответствующих массовых соотношений на этапе смешивания прекурсором. Всего было получено 11 образцов гетероструктур типа $XSr_6Bi_2O_{11}/(1\text{-}X)SrCO_3$ (0 – 1,0), где X и (1-X) – массовые доли висмутата и карбоната стронция, соответственно. В дальнейшем для обозначения соотношения массовых долей в гетероструктуре будет использоваться дробь вида (100*X/100*(1-X)), см., например, рис. 1.

Синтезированные описанным способом образцы были исследованы методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Для этого был использован сканирующие электронный микроскоп Vega 3 (Tescan) с ускоряющим напряжением 20 кэВ. На рис. 1.а представлена СЭМ фотография типичной гетероструктуры. Видно, что две фазы (висмутатная и карбонатная) образовали большое количество интерфейсов.

Для идентификации каждой из представленных на рис. 1.а фаз было выполнено картирование частицы методом энергодисперсионной спектроскопии (рис. 1.б). При этом использовалась приставка к СЭМ X-Max (Oxford Instruments).

Видно (рис. 1.в), что висмутат стронция соответствует более светлым областям приведенной на рис. 1.а фотографии, а карбонат стронция – более темным.

Оценка фотокаталитической активности синтезированных образцов осуществлялась по скорости разложения фенола в водном растворе под действием видимого света в присутствие исследуемых гетероструктур. Типичный эксперимент проходил при следующих условиях: концентрация фенола в водном растворе составляла 100 ppm; соотношение между водным раствором фенола и фотокатализатором – 1мл / 1 мг; облучение производилось Xe лампой (OSRAM) мощностью 150 Вт; определение концентрации фенола осуществлялось методом жидкостной хроматографии с использованием хроматографа 1260 Infinity (Agilent Technologies). На рис. 2 приведены данные о фотокаталитической активности всех синтезированных гетероструктур.

Видно хорошее согласование результатов с полученными ранее данными [1]. Однако новый подход к синтезу образцов позволил выявить ранее не описанный эффект: при массовой доле $SrCO_3$ в гетероструктуре порядка 80% наблюдается второй максимум фотокаталитической активности.

Для объяснения наблюдаемого эффекта зависимости фотокаталитической активности от доли $SrCO_3$ в гетероструктуре $Sr_6Bi_2O_{11}/SrCO_3$, из образцов 70/30, 40/60 и 20/80 были изготовлены ламели, исследованы затем методом СЭМ.

Ламели изготавливались таким образом, чтобы включать поперечный срез границы раздела фаз. Изготовление ламелей осуществлялось ионным травлением.

После получения, области вблизи границы раздела фаз исследовались методом энергодисперсионной спектроскопии.

Целью данного исследования было измерение соотношение между концентрацией атомов висмута и стронция в приповерхностном слое висмутатной фазы гетероструктуры. На рис. 3 приведены полученные описанным способом профили изменения концентрации элементов в зависимости от глубины приповерхностного слоя.

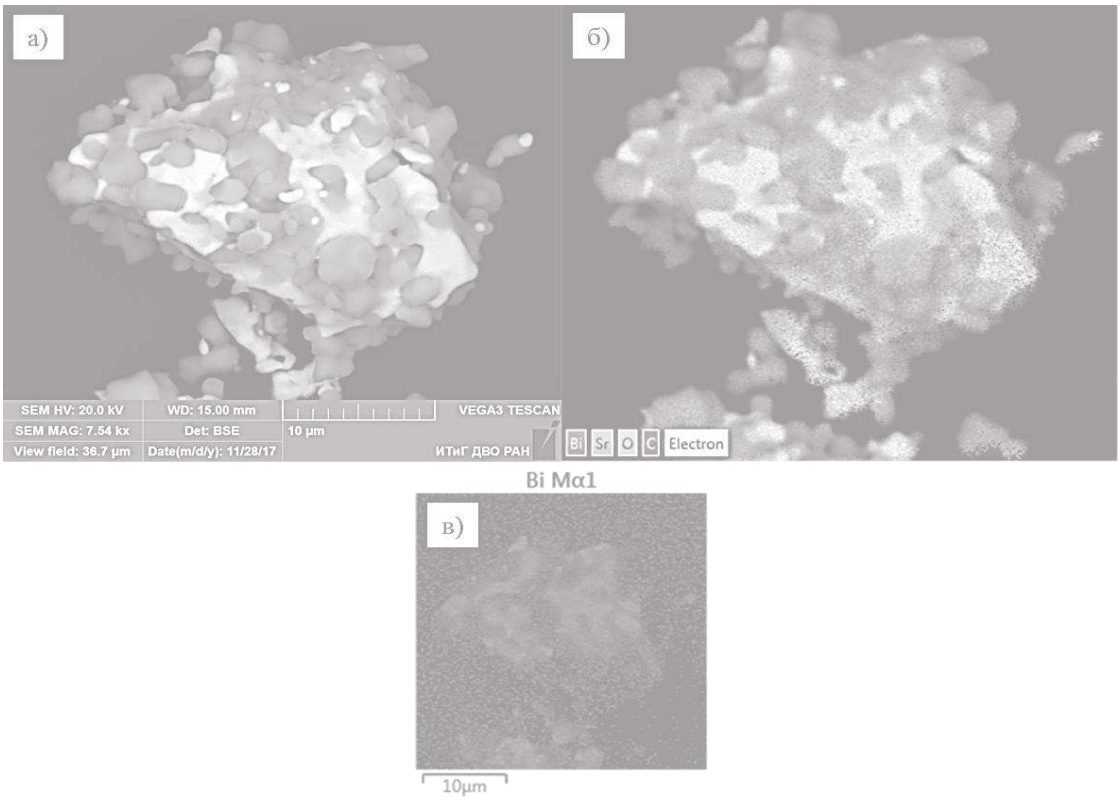


Рис. 1. Гетероструктура $Sr_6Bi_2O_{11}/SrCO_3$ (50/50)

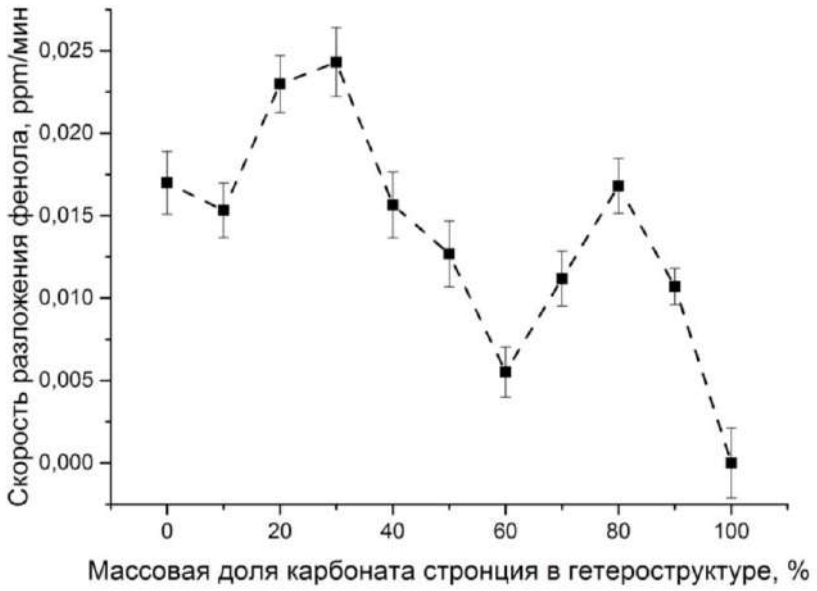


Рис. 2. Зависимость фотокаталитической активности гетероструктуры $Sr_6Bi_2O_{11}/SrCO_3$ от массовой доли карбоната стронция

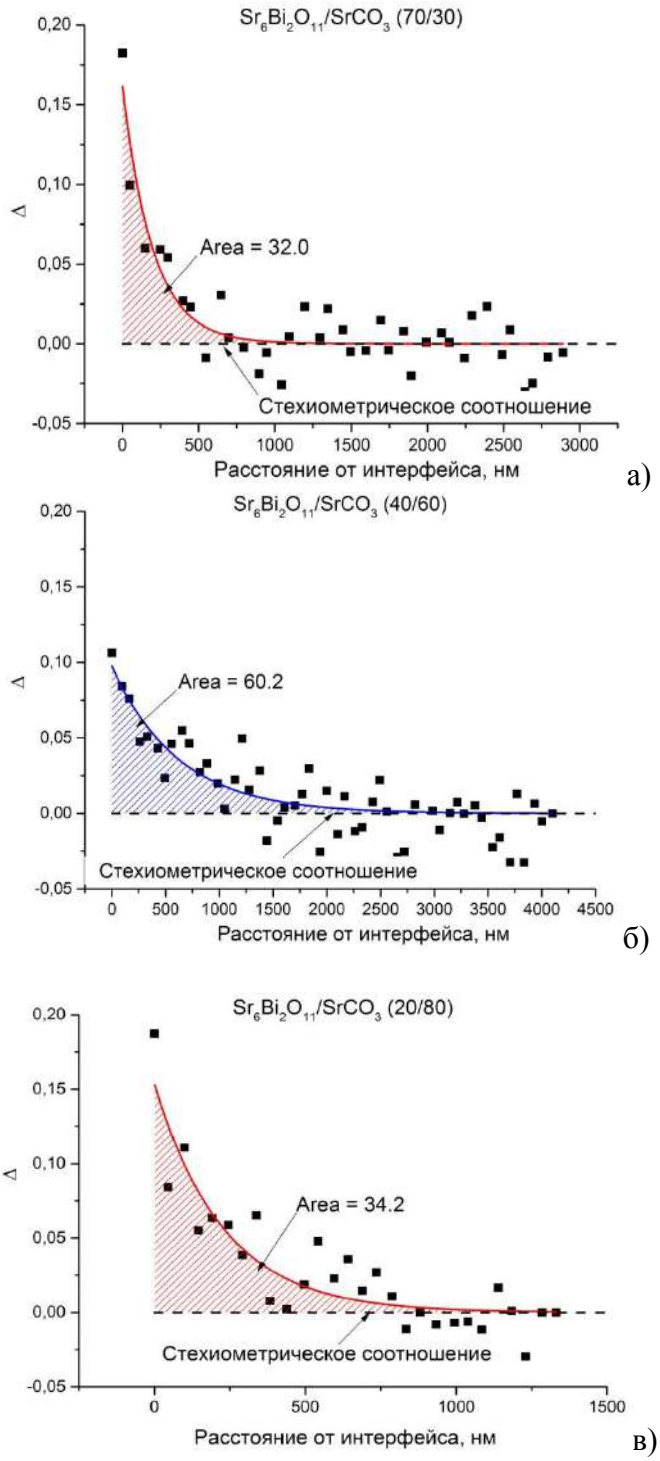


Рис. 3. Соотношение между основными элементами в приповерхностном слое висмутата стронция для гетероструктур различного состава

На представленных на рис. 3 графиках параметр Δ (ось ординат) рассчитывался по формуле:

$$\Delta = \frac{[(Sr/Bi) - (Sr/Bi)_{bulk}]}{(Sr/Bi)_{bulk}}, \quad (1)$$

где (Sr/Bi) – соотношение между концентрацией атомов стронция и висмута вблизи межфазной границы; $(Sr/Bi)_{bulk}$ – соотношение между концентрацией атомов стронция и висмута, измеренное на максимально возможном удалении от межфазной границы (в объеме вис-

мутата стронция).

Таким образом, данные, рассчитанные по формуле (1) можно интерпретировать как отклонение соотношения Sr/Bi в приповерхностном слое от такового в объеме материала, то есть от стехиометрического. Приведенные графики можно трактовать двояко. С одной стороны, приведенное на них отклонение от стехиометрии может быть обусловлено избытком стронция в приповерхностном слое в области интерфейса. С другой – наоборот, недостатком висмута. В первом случае это может быть объяснено тем, что сверхстехиометричный стронций попадает в висмутат из карбоната. Во втором случае разумно предположить, что висмут из структуры висмутата мигрирует через интерфейс в карбонатную часть гетероструктуры. Однако очевидно, что аномальное увеличение фотокаталитической активности связано с наблюдаемым отклонением состава приповерхностного слоя висмутата стронция в области границы раздела фаз от стехиометрического.

Видно, что для образцов, проявляющих повышенную фотокаталитическую активность (составы 70/30 и 20/80), характерно следующее:

1) отклонение от стехиометрии на границе раздела фаз достигает значительных величин ($\Delta \approx 0{,}20$);

2) отклонение от стехиометрии в значительной степени сконцентрировано в приповерзностном слое гетероструктуры – на глубине порядка 0,5 мкм стехиометрический состав висмутата стронция практически восстанавливается;

3) площадь фигуры, ограниченной кривыми профиля Δ и стехиометрического соотношения для таких гетероструктур составляет порядка 30 ед.

Напротив, для образца с низкой фотокаталитической активностью (40/60) характерна обратная картина:

1) отклонение от стехиометрии на границе раздела фаз значительно меньше и достигает порядка 0,1;

2) отклонение от стехиометрии наблюдается даже на значительном удалении от интерфейса;

3) площадь фигуры, ограниченной кривыми профиля Δ и стехиометрического соотношения для такого образца составляет порядка 60 ед.

Благодарности. *Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-73-00007).*

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Штарев Д. С., Карпович Н. Ф., Штарева А. В., Блох А. И., Нащочин Е. О. Твердофазный синтез и фотокаталитическая активность висмутатов стронция SrxBiyOz (x>y) // Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук. 2018. Вып. 2 (198). С. 237-247.

Секция «Теоретическая физика и вычислительная математика»

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИОНОВ КОСМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ НА ПОЛИМЕРНЫЕ ПЛЕНКИ

А. В. Аврашенко, И. В. Верхотурова

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: loy-iver@rambler.ru

В пакете прикладных программ SRIM/TRIM проведено моделирование раздельного и последовательного воздействия ионов космической плазмы на многослойные структуры. Получено распределение потерь энергии ионов по глубине исследуемых мишеней. Полученные результаты позволяют оценить возможность применения системы ZnO/Тефлон в качестве двухслойного защитного покрытия, наносимого на облучаемую поверхность политетрафторэтилена, выбрать оптимальные значения толщин покрытия.

Введение. Полимерные материалы со структурой полиимидов (пленки Каптон) широко применяются в качестве различных функциональных материалов космических аппаратов. Однако они подвержены процессу электризации и эрозии под действием ионизирующего излучения космической плазмы (электроны, протоны H^+, ионы атомарного кислорода O^+ и др.) в результате чего ухудшаются свойства полиимидных пленок. В последнее время большое внимание уделяется эффективным способам защиты данных полимерных материалов от негативных процессов воздействия космической плазмы [1, 2].

Существуют несколько методов позволяющих снизить негативные процессы электризации и эрозии полимерных материалов. К таким методам относятся: применение полимеров, обладающих повышенной электропроводностью за счет введения определенных примесей; использование полимерных пленок толщиной меньше пробега электронов в данных пленках; нанесение на облучаемую поверхность полимерной пленки тонкого проводящего прозрачного покрытия с высокой эмиссионной способностью и другие [1, 2].

В данной работе представлены результаты моделирования в ПО SRIM/TRIM взаимодействия ионов космической плазмы различных энергий с материалами мишеней. Рассмотрены полученные в программе TRIM распределения потерь энергии частиц и вторичных радиационных дефектов в материале мишеней по ее глубине.

Объекты и метод исследования. Программа SRIM/TRIM, созданная на основе метода Монте-Карло, позволяет моделировать процессы взаимодействия различных частиц с веществом мишени, представляющей собой как однослойные, так и многослойные плоские конфигураций. В пакете прикладных программ получены распределение потерь энергии ионов и вторичных радиационных дефектов по глубине мишеней. Моделирование взаимодействия потока ионосферных частиц проводилось с тремя типами мишеней (рис. 1).

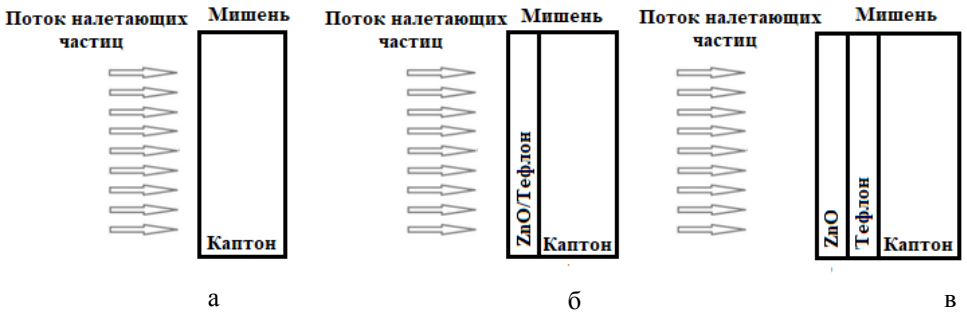


Рис. 1. Монослойная и многослойные мишени

© Аврашенко А. В., Верхотурова И. В., 2018

Первый тип – монослойная мишень, представляющая собой полиимидную пленку Каптон (рис. 1, а).

Для уменьшения негативного воздействия ионов космической плазмы на пленки Каптон на ее облучаемую поверхность наносятся как неорганические, так и органические защитные покрытия. На сегодняшний день наиболее часто используемым материалом прозрачных проводящих покрытий является оксид индия, легированный оловом [1, 2]. Главным недостатком этого материала является его дороговизна из-за дефицита индия на планете, поэтому во многих областях применения прозрачных проводящих покрытий используют другие металлооксидные соединения [3]. В данной работе в качестве защитных покрытий были выбраны Тефлон и ZnO как альтернатива дорогостоящему покрытию на основе оксида индия In_2O_3. Поэтому второй тип мишени – двухслойная, представляющая собой полимерную пленку Каптон, имеющую на облучаемой поверхности защитное покрытие, состоящее из полимерной пленки Тефлон или прозрачного проводящего покрытия ZnO (рис. 1, б).

Третий тип мишени – трехслойная, представляющая собой полимерную пленку Каптон, имеющую на облучаемой поверхности двухслойное защитное покрытие, состоящее из полимерной пленки Тефлон и прозрачного проводящего покрытия ZnO (рисунок 1, в).

Моделирование взаимодействия протонов H^+ с энергиями 30, 50 и 100 эВ; 100 кэВ, 500 кэВ, 7,5 МэВ и ионов атомарного кислорода O^+ с энергиями 30, 50 и 100 эВ с материалом мишеней, проводилось как при раздельном, так и при последовательном облучении этими частицами. Выбранные значения энергий соответствуют энергиям частиц низких земных орбит (от 200 км до 500 км) и радиационных поясов земли (700 км до 1500 км).

Результаты моделирования и обсуждение. На рис. 2 представлено распределение потерь энергии ионов низких земных орбит по глубине монослойной мишени, облучаемой ионами с энергией 30 эВ, 50 эВ и 100 эВ (серым цветом обозначены ионизационные потери энергии частиц, черным цветом – потери энергии частиц на смещение атомов мишени).

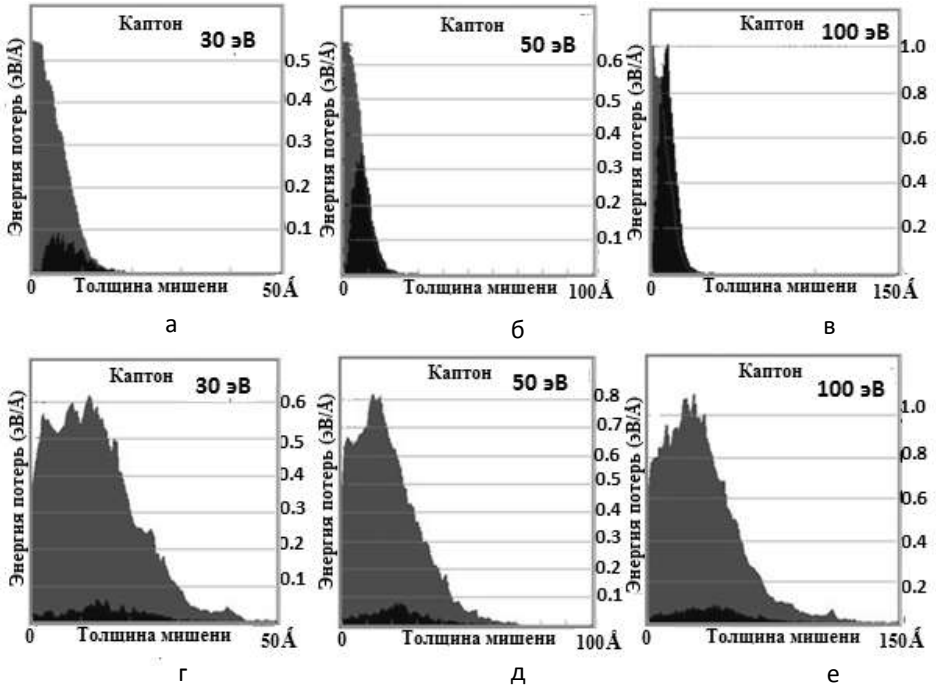


Рис. 2. Распределение потерь энергии ионов O^+ и H^+ по глубине монослойной мишени
а, б, в – при облучении пленки Каптон ионами атомарного кислорода O^+;
г, д, е – при облучении пленки Каптон протонами H^+

Из представленного распределения потерь энергии ионов по глубине монослойной мишени видно следующее.

1. Ширина измененного слоя в пленке Каптон при облучении ионами O^+ намного меньше, чем при облучении протонами, независимо от энергии ионов. При этом под измененным подразумевается слой, в котором происходит образование свободных носителей заряда и радиационных дефектов в результате воздействия ионизирующего излучения на полимерную пленку.

2. Основными потерями энергии частиц при взаимодействии с монослойной мишенью являются ионизационные потери, потери на смещение невелики. Исключение лишь составляют потери энергии ионов O^+ связанные со смещением атомов мишени при энергии ионов 100 эВ (рисунок 2, г), величина потерь которых значительно возросла до значения ионизационных потерь.

Из распределения вторичных радиационных дефектов, возникающих в мишени при ее облучении двумя типами частиц с низкими энергиями установлено, что основными вторичными дефектами в Каптоне при облучении протонами являются атомы водорода, а при облучении ионами атомарного кислорода – атомы углерода.

Увеличение энергии протонов до значений от 100 кэВ до 7,5 МэВ, характерных для частиц радиационных поясов земли, приводит к тому, что основными потерями энергии частиц, при взаимодействии однослойной мишенью, становятся ионизационные потери, величина которых с возрастанием энергии частиц уменьшается, а ширина измененного слоя увеличивается.

При последовательном облучении полиимидной пленки ионосферными частицами с энергией 30 эВ ширина измененного слоя, а также величины ионизационных потерь и потерь на смещение атомов мишени одинаковы, независимо от последовательности облучения (рисунок 3). Увеличение энергии частиц до 100 эВ приводит к увеличению ширины измененного слоя и величины потерь энергии на смещение. Можно отметить, что при облучении сначала протонами H^+, а затем ионами O^+ на распределении становится более четко выраженным дополнительный пик Брэгга (рис. 3, г).

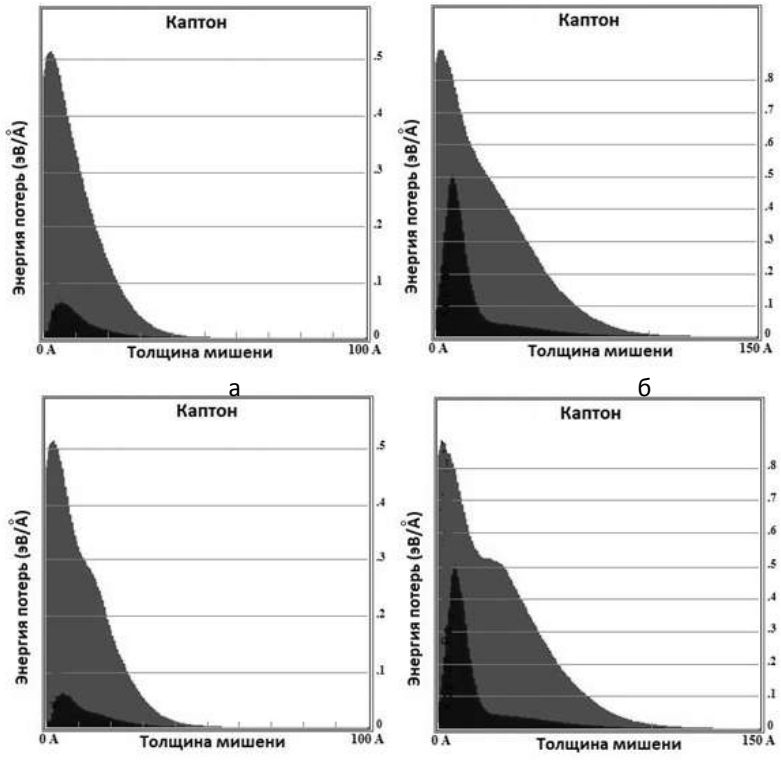


Рис. 3. Распределение потерь энергии ионов O^+ и H^+ по глубине монослойной мишени:
а, б – при облучении пленки Каптон ионами атомарного кислорода O^+;
в, г – при облучении пленки Каптон протонами H^+

Основным вторичным радиационным дефектом в монослойной мишени при ее последовательном облучении ионами с энергией 30 эВ является атом водорода, независимо от последовательности облучения. С увеличением энергии частиц до 100 эВ значительно возрастает количество вторичных дефектов по углероду независимо от последовательности облучения.

Моделирование взаимодействия ионов H^+ и O^+ с двухслойными мишенями при энергиях налетающих частиц 30 эВ и 100 эВ показало следующее: величина потерь энергии на смещение атомов мишени в оксиде цинка значительно ниже этого же вида потерь энергии ионосферных частиц в тефлоне; ширина измененного слоя также значительно меньше, чем в тефлоне и при возрастании энергии частиц до 100 эВ не выходит за пределы защитного слоя [4].

При низких энергия ионосферных частиц основными вторичными дефектами в оксиде цинка являются атомы кислорода, с увеличением энергии возрастает доля вторичных дефектов по цинку. Моделирования взаимодействия ионов H^+ с энергиями от 100 кэВ до 500 МэВ с двухслойными мишенями показали, что достаточно сильное ослабление подающих ионов наблюдается в первом защитном слое на основе оксида цинка. Однако при энергиях ионов 7,5 МэВ заметно, что однослойного защитного покрытия не хватает, так как весьма значительно повышается уровень ионизационных потерь энергии ионов в основном материале. Следовательно, при таких энергиях ионов требуется модифицировать однослойное защитное покрытие или формировать многослойное.

Основываясь на результатах, ранее проведенного моделирования взаимодействия ионов с однослойными мишенями Тефлон и ZnO, порядок формирования слоев в трехслойной мишени был выбран следующим. На облучаемую поверхность Каптона сначала формировался слой из полимерной пленки Тефлон, а поверх него слой оксида цинка. Таким образом, получалось двухслойное защитное покрытие. Толщина слоев в покрытии при моделировании процессов воздействия ионов различной энергии с мишенью изменялась таким образом, чтобы максимум потерь энергии ионов приходился на защитное покрытие.

На рис. 4 представлены распределения потерь энергии ионов с энергий соответствующей частицам низких земных орбит по глубине трехслойной мишени.

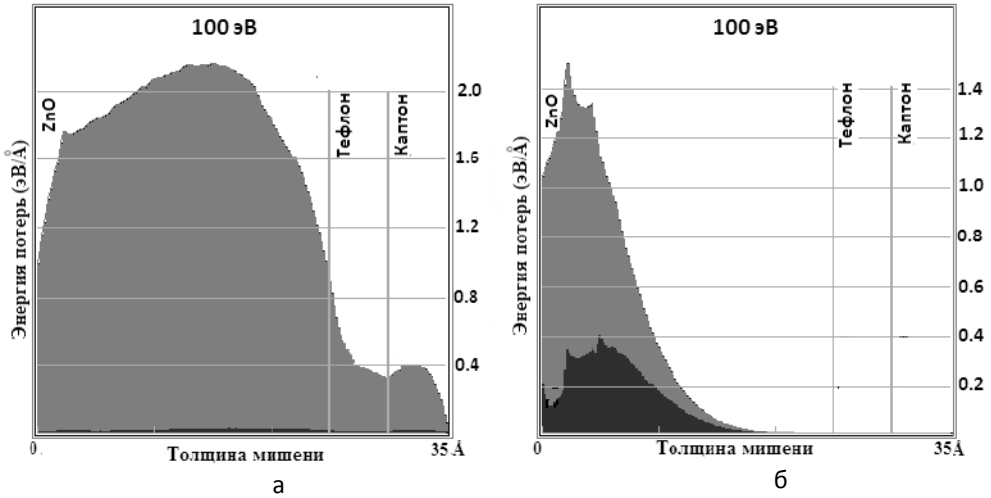


Рис. 4. Распределение потерь энергии ионов по глубине многослойной мишени:
а – при облучении трехслойной мишени ионами H^+; б – при облучении трехслойной мишени ионами O^+

Моделирование взаимодействия протонов и ионов атомарного кислорода при энергии 100 эВ и протонов при более высоких энергиях с трёхслойными мишенями показал, что значительные потери энергии ионов происходят в первом слое защитного покрытия, продолжают уменьшать во втором слое и некоторая часть ионов проникает в основной материал.

Заключение. При энергиях ионов, характерных частицам низких земных орбит, основными потерями энергии при взаимодействии со всеми типами мишеней являются

ионизационные потери, вклад потерь энергии на смещение атомов мишени значительно возрастает лишь для ионов атомарного кислорода O^+ с энергией 100 эВ при взаимодействии с полимерной пленкой Каптон. При энергиях ионов, характерных частицам радиационных полей Земли, потерями энергии при взаимодействии со всеми типами мишеней являются только ионизационные потери.

Нанесение на облучаемую поверхность Каптона однослойного защитного покрытия на основе ZnO толщиной от 5 нм до 10 нм позволяет ослабить поток ионов низких земных орбит даже при их совместном действии.

Нанесение на облучаемую поверхность Каптона двухслойных защитных покрытий на основе Тефлона и ZnO при суммарной толщине слоев до 1 мкм позволяет ослабить поток ионов лишь при энергиях частиц до 3 МэВ.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Крючек С. Д. Создание перспективных терморегулирующих покрытий космических аппаратов / С. Д. Крючек, М. Ф. Решетнев, Г. Г. Крушенко и др. // Решетниковские чтения. 2015. 3(35). С.340-341.
2. Новиков Л. С. Радиационные воздействия на материалы космических аппаратов. М.: Московский гос. ун-т. 2010. 192 с.
3. Кондрашин В. И., Рыбакова Н. О, Ракша С. В., Шамин А. А, Николаев К.О. Прозрачные проводящие покрытия на основе оксидов металлов. Технологии получения, свойства и области применения // Молодой ученый №13, 2015. С 128-132.
4. Верхотурова И.В. Моделирование воздействия ионизирующих и ионосферных частиц на полимерные пленки/ И.В. Верхотурова, М.С. Быковский, А.В. Аврашенко, К.К. Тяжелкова // Вестник АмГУ. Серия «Естественные и экономические науки», 2018. – Вып. 81.– С. 28-34
5. Аврашенко А. В., Быковский М. С., Верхотурова И. В. Моделирование воздействия ионов на полимерные пленки / //Молодежь XXI века: шаг в будущее: матер. XIX регион. науч.-практ. конф. (23 мая 2018 г., Благовещенск). В 3 т. Благовещенск: Изд-во Дальневосточного гос. аграрного ун-та, 2018. Т. 3. С. 17-18

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИБЛИОТЕКИ OPEN SOURCE PHYSICS

М. С. Алёшин, А. В. Прохоренко

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: aleshin.m.s@pnu.edu.ru

Демонстрируются возможности применения библиотеки Open Source Physics для численного моделирования физических процессов на примере процесса рассеяния в поле Кулоновского потенциала и потенциала Юкавы. Представлены результаты компьютерного моделирования, произведён расчёт траекторий рассеиваемых частиц, дифференциальных сечений.

Введение. В наше время компьютерное моделирование является неотъемлемой частью современной фундаментальной и прикладной физики. При этом роль численного моделирования стоит наравне с проведением как теоретических, так и экспериментальных исследований. Способность производить численные расчёты является неотъемлемым навыком современных исследователей.

В связи с этим особо актуальным становится вопрос выбора инструмента для проведения численного эксперимента. При описании сложных процессов, таких, как поведение деформируемого тела, течение вязкой жидкости и пр. оправдано применение профессионально ориентированных программных комплексов (таких как Geant4, openFOAM, COMSOL и др.) [1]. Для решения же более широкого круга проблем разумным становится использование различных библиотек программирования. В частности, в нашей работе рассматривается пример

© Алёшин М. С., Прохоренко А. В., 2018

работы с библиотекой Open Source Physics, написанной на языке программирования Java.

Данная библиотека упрощает процесс реализации вычислительного алгоритма и написания программного кода в целом. Её функционал обеспечивает лёгкий графический ввод параметров любого моделируемого процесса, табличный вывод данных, экспорт графиков, визуализацию и анимацию, а также численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений, обеспечена подробным руководством пользователя [2] и учебной литературой [3]. Явным преимуществом использования данного инструмента является существенное сокращение временных затрат на получение конечного результата, что позволяет успешно применять его в учебном процессе. В частности, в ходе реализации математического моделирования студенты способны уделить основное внимание пониманию и анализу физической сущности процесса, избавляясь при этом от необходимости глубокого изучения особенностей программирования, тонкостей использования классов и библиотек Java. Таким образом, подобные средства компьютерного моделирования являются эффективным инструментом при подготовке специалистов физиков.

В данной работе в качестве иллюстрации возможностей библиотеки Open Source Physics приведены результаты компьютерного моделирования процесса рассеяния для разных потенциалов взаимодействия, произведён расчёт траекторий рассеиваемых частиц, а также дифференциальных сечений.

Постановка задачи. В качестве демонстрации использования библиотеки была выбрана задача моделирования процесса рассеяния. При этом целью было не только построение траекторий движения рассеянных частиц, но и расчёт дифференциальных сечений.

Типичный эксперимент по рассеянию производится над пучком из большого числа налетающих частиц с одинаковой кинетической энергией. Схема процесса представлена на рисунке 1. Падающие частицы с начальной скоростью v движутся в положительном направлении оси x. Мишень помещена в начало координат. Прицельный параметр b представляет собой перпендикулярное расстояние от начальной линии траектории до линии оси координат, проходящей через центр мишени. Мы предполагаем, что ширина пучка больше размера мишени. Для простоты модели мы рассматриваем рассеяние одним центом, полагая, что мишень достаточно мала. В эксперименте рассеянные частицы регистрируются детекторами, расстояния до которых от цели считаются достаточно большими. Угол рассеяния θ определяется как угол между начальной и конечной скоростями v и v' налетающей частицы.

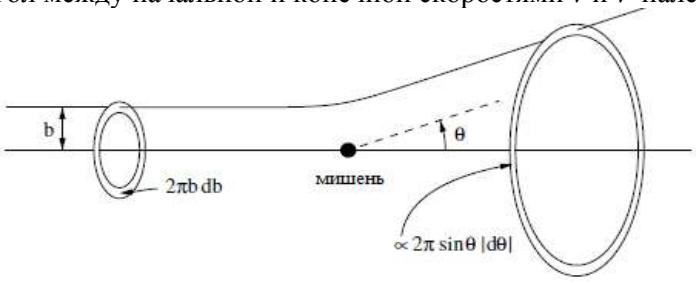


Рис. 1. Схема процесса упругого рассеяния в системе координат, начало которой совпадает с рассеивающим центром. Частицы, пересекающие площадку $2\pi b\mathrm{d}b$, рассеиваются в телесный угол $\mathrm{d}\Omega$

Будем полагать, что рассеяние является упругим, и мишень намного массивнее частиц пучка, так что цель можно считать фиксированной. Также предположим, что для каждой налетающей частицы не происходит повторного рассеяния. Из этих соображений следует, что начальная и конечная скорости падающих частиц равны. Угол рассеяния θ зависит от прицельного параметра b в виду действия на частицы силы со стороны мишени. В физическом эксперименте регистрируется число частиц, попадающих в угловой диапазон между θ и $\theta+\mathrm{d}\theta$ для разных значений θ. Детекторы измеряют количество частиц, рассеянных в элементе телесного угла $\mathrm{d}\Omega = \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi$, опирающегося на θ. Дифференциальное сечение $\sigma(\theta)$ определяется соотношением [4]

$$\frac{dN}{N} = n\sigma(\theta)d\Omega \qquad (1)$$

где dN – число частиц, рассеянных в телесный угол dΩ, опирающийся на угол θ и азимутальный угол ϕ, N – общее количество частиц в пучке, n – плотность рассеивающих центров цели, определяемая как количество мишеней на единицу площади.

Выражение (1) позволяет сделать вывод, что доля частиц, рассеянных в телесный угол dΩ, пропорциональна dΩ и n. Из (1) видно, что $\sigma(\theta)$ можно интерпретировать как эффективную площадь частицы-мишени при рассеяния падающей частицы в элементе телесного угла dΩ. Частицы, не попавшие в этот угол, не учитываются. С другой стороны, $\sigma(\theta)$ есть отношение площади $b\mathrm{d}b\mathrm{d}\phi$ к телесному углу $\mathrm{d}\Omega = \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi$, где $b\mathrm{d}b\mathrm{d}\phi$ – бесконечно малая площадь поперечного сечения пучка, который рассеивается на телесный угол, ограниченный диапазонами углов от θ до $\theta+\mathrm{d}\theta$ и ϕ до $\phi+\mathrm{d}\phi$. Из этих соображений вытекает известное аналитическое выражение для $\sigma(\theta)$:

$$\sigma(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{db}{d\theta}\right| \qquad (2)$$

Из этого выражения мы видим, что аналитические расчёты позволяют выразить b как функцию θ, причём дают зависимость вплоть до бесконечных значений θ.

В эксперименте по рассеянию частицы налетают со случайными значениями прицельного параметра b и азимутального угла ϕ, измеряется количество частиц, зарегистрированных в различных детекторах. В нашей модели значение параметра b задаётся, поэтому для нахождения угла рассеяния мы интегрируем уравнения движения Ньютона. То есть, в отличие от аналитических расчётов такая симуляция даёт на выходе угол рассеяния θ как функцию прицельного параметра b.

Поскольку дифференциальное сечение обычно не зависит от ϕ, мы можем рассматривать частицы пучка только при $\phi = 0$ (в одной плоскости). Число частиц в реальном пучке пропорционально $2\pi b\Delta b$, площади кольца с радиусами b и $b+\Delta\mathrm{d}b$, где коэффициент 2π получается в результате интегрирования по углу ϕ. Здесь Δb – шаг изменения прицельного параметра b, используемый в модели. Поскольку рассеивающий центр единственный, то плотность $n = 1/(\pi R^2)$.

Результаты моделирования. Расчёты проводились для рассеяния на потенциале Кулоновского взаимодействия вида

$$V_C = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \qquad (3)$$

и потенциала Юкавы

$$V_Y = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r}. \qquad (4)$$

При этом для моделирования были выбраны единицы, в которых $e^2/(4\pi\varepsilon_0) = 1$, значение параметра было выбрано равным $a = 1$.

На рис. 2 представлены траектории движения частиц с разными прицельными параметрами в процессе рассеяния на рассеивающем центре, помещённом в начало координат. На рис. 3 представлены дифференциальные сечения процесса рассеяния.

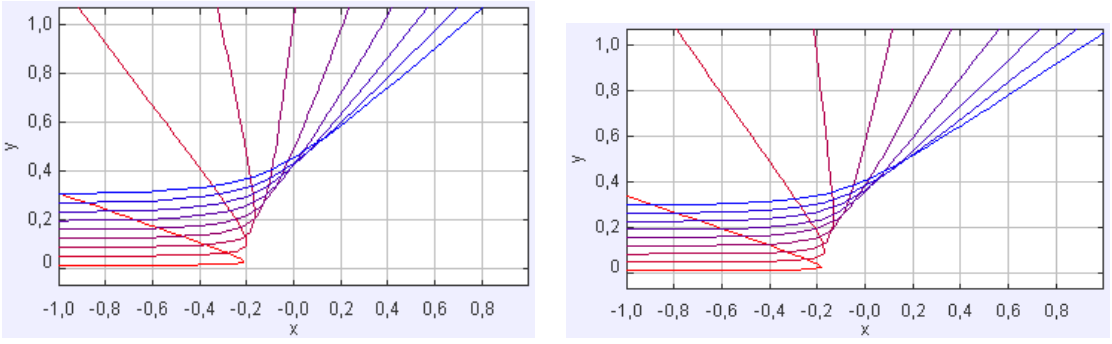


Рис. 2. Результат расчёта траекторий рассеяния на потенциалах вида (3) (слева) и вида (4) (справа). Рассеивающий центр помещён в точку (0,0)

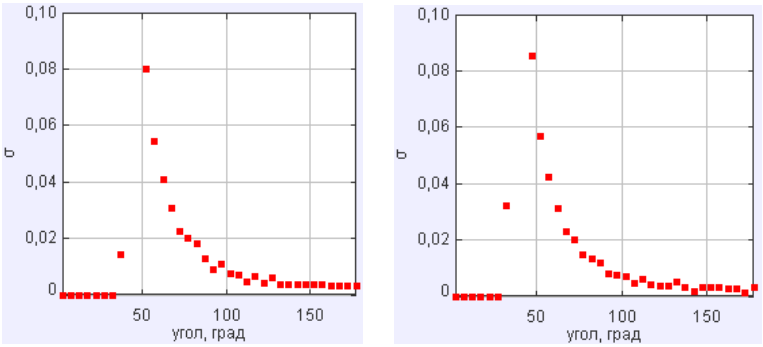


Рис. 3. Результат расчёта дифференциальных сечений рассеяния на потенциалах (3) (слева) и (4) (справа)

Результаты моделирования дают возможность произвести не только качественный анализ процесса рассеяния, определить разницу в характере взаимодействия разного типа, но также произвести анализ конкретных физических параметров, таких как влияние величины прицельного параметра на угол рассеяния, скорости налетающих частиц на положение максимума и величину дифференциального сечения в зависимости от угла рассеяния

Заключение. Рассмотренный в данной статье пример использования библиотека Open Source Physics демонстрирует её эффективность и простоту использования в прикладных задачах моделирования. В то время, как большинство инновационных научных исследований не обходится без написания собственного программного обеспечения из-за отсутствия необходимого среди существующего, становится очевидной необходимость для современных исследователей иметь навыки самостоятельной разработки.

Полученный в результате моделирования программный продукт может использоваться в качестве виртуальной лабораторной работы и как демонстрационный материал в процессе изучения реакций рассеяния студентами физических специальностей.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Насыров В. В. Моделирование вязкого течения жидкости // Вестник ТОГУ. 2017. № 2(45). С.55-60.
2. Christian W. Open Source Physics: A User's Guide with Examples / W. Christian et al // Addison-Wesley, 2006. 407 p.
3. Gould H. An Introduction to Computer Simulation Methods Applications to Physical System / H. Gould, J. Tobochnik, and W. Christian // Addison-Wesley, 2006. 720 p.
4. Ландау Л. Д. Теоретическая механика. Том I. Механика. 4-е изд. испр. / Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц // М.: Наука, 1988. – 216 с.

МАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ДВУХПОДРЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ: МЕТОД СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

А. Д. Аллилуев, В. И. Белоконь, Р. В. Лапенков

ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет»
г. Владивосток, e-mail: belokon.vi@dvfu.ru

Большое количество новых магнитных материалов, как правило, представляют из себя твердые растворы, содержащие обменно-взаимодействующие ионы различных элементов, часто имеющих относительно малую концентрацию. Для теоретического анализа магнитных фазовых переходов в таких материалах метод молекулярного поля, не учитывающий возможность упорядочения типа спинового стекла, является слишком грубым. В данной работе предпринята попытка описания

© Аллилуев А. Д., Белоконь В. И., Лапенков Р. В., 2018

магнитного упорядочения в бипарных сплавах методом случайных полей взаимодействия, предложенным в наших работах [1-3].

Данный метод основывается на плотности распределения случайных полей взаимодействия $W(H)$, которая имеет вид (полагая магнитный момент m и постоянную Больцмана k равными единице):

$$W(H) = \frac{1}{\sqrt{\pi}B} e^{-\frac{(H-MH_0)^2}{B^2}}, \tag{1}$$

где: $H_0 = p\sum_k \varphi_k$ – магнитное поле, создаваемое магнитными атомами на данный магнитный узел, $B^2 = 2p[1-p]\sum_k \varphi_k^2$ – дисперсия нормального распределения, M – относительный магнитный момент, приходящийся на один атом, p – концентрация магнитных атомов, φ_k – поле, создаваемое атомом с номером k , суммирование ведется по всем атомам, поле которых отлично от нуля.

$W(H)$ представляет из себя «размазанную» δ - функцию, которую, как показано в работе [2], можно без существенной ошибки заменить «ступенчатой» функцией вида (заменив H на $\widetilde{H} + MH_0$):

$$W(\widetilde{H}) = \begin{cases} \frac{1}{2B}, & -B \le \widetilde{H} \le B \\ 0, & \widetilde{H} \notin [-B, B] \end{cases}. \tag{2}$$

Для двухподрешеточных магнетиков относительные магнитные моменты, приходящиеся на один атом, таким образом:

$$M_1 = \frac{1}{2B_1}\int_{-B_1}^{B_1} th\left[\frac{1}{T}(H_1 + M_1H_{011} + M_2H_{012})\right] dH_1, \tag{3}$$

$$M_2 = \frac{1}{2B_2}\int_{-B_2}^{B_2} th\left[\frac{1}{T}(H_2 + M_2H_{022} + M_1H_{021})\right] dH_2, \tag{4}$$

где, в случае прямого обменного взаимодействия: $B_1^2 = 2p_1(1-M_1^2p_1)z_1J_1^2 + 2p_2(1-M_2^2p_2)z_2J_{12}^2$, $H_{011} = p_1z_1J_1$, $H_{012} = p_2z_2J_{12}$, $B_2^2 = 2p_2(1-M_2^2p_2)z_2J_2^2 + 2p_1(1-M_1^2p_1)z_1J_{21}^2$, $H_{022} = p_2z_2J_2$, $H_{021} == p_1z_1J_{21}$, z_1 и z_2 – число ближайших соседей первой и второй подрешетки соответственно.J_1, J_2, J_{12}, J_{21} – поле от ближайшего соседа соответствующей подрешетки.

Разлагая соотношения (3), (4) в ряд до третьего члена включительно в окрестностях $M_1 \ll 1$ и $M_2 \ll 1$ и интегрируя подынтегральные выражения (3) и (4), получим:

$$M_1 = \frac{1}{B_1} th\left[\frac{B_1}{T}\right](H_{011}M_1 + H_{012}M_2) - \frac{1}{3B_1}\left(\frac{1}{T}\right)^2 th\left[\frac{B_1}{T}\right](H_{011}M_1 + H_{012}M_2)^3 + \\ + \frac{1}{3B_1}\left(\frac{1}{T}\right)^2 th^3\left[\frac{B_1}{T}\right](H_{011}M_1 + H_{012}M_2)^3, \tag{5}$$

$$M_2 = \frac{1}{B_2} th\left[\frac{B_2}{T}\right](H_{022}M_2 + H_{021}M_1) - \frac{1}{3B_2}\left(\frac{1}{T}\right)^2 th\left[\frac{B_2}{T}\right](H_{022}M_2 + H_{021}M_1)^3 + \\ + \frac{1}{3B_2}\left(\frac{1}{T}\right)^2 th^3\left[\frac{B_2}{T}\right](H_{022}M_2 + H_{021}M_1)^3, \tag{6}$$

Выражая M_1 через M_2 в нулевом приближении, можно получить для каждой подрешетки соотношения:

$$M_1^2 = \frac{3}{\left(\frac{1}{T}\right)^2\left[1-th^2\left[\frac{B_1}{T}\right]\right]\left\{H_{011}+\frac{H_{012}H_{021}th\left[\frac{B_2}{T}\right]}{B_2-H_{022}th\left[\frac{B_2}{T}\right]}\right\}^2} - \frac{3B_1}{\left(\frac{1}{T}\right)^2\left[1-th^2\left[\frac{B_1}{T}\right]\right]th^2\left[\frac{B_1}{T}\right]\left\{H_{011}+\frac{H_{012}H_{021}th\left[\frac{B_2}{T}\right]}{B_2-H_{022}th\left[\frac{B_2}{T}\right]}\right\}^3}, \quad (7)$$

$$M_2^2 = \frac{3}{\left(\frac{1}{T}\right)^2\left[1-th^2\left[\frac{B_2}{T}\right]\right]\left\{H_{022}+\frac{H_{012}H_{021}th\left[\frac{B_1}{T}\right]}{B_1-H_{011}th\left[\frac{B_1}{T}\right]}\right\}^2} - \frac{3B_2}{\left(\frac{1}{T}\right)^2\left[1-th^2\left[\frac{B_2}{T}\right]\right]th^2\left[\frac{B_2}{T}\right]\left\{H_{022}+\frac{H_{012}H_{021}th\left[\frac{B_1}{T}\right]}{B_1-H_{011}th\left[\frac{B_1}{T}\right]}\right\}^3}, \quad (8)$$

Отсюда следует, что отличные от нуля решения для M_1 и M_2 возможны лишь при выполнении условий:

$$\frac{H_{011}}{B_1}th\left[\frac{B_1}{T}\right]\left\{1+\frac{\frac{H_{012}H_{021}}{H_{011}B_2}th\left[\frac{B_2}{T}\right]}{1-\frac{H_{022}}{B_2}th\left[\frac{B_2}{T}\right]}\right\} > 1, \quad (9)$$

$$\frac{H_{022}}{B_2}th\left[\frac{B_2}{T}\right]\left\{1+\frac{\frac{H_{012}H_{021}}{H_{022}B_1}th\left[\frac{B_1}{T}\right]}{1-\frac{H_{011}}{B_1}th\left[\frac{B_1}{T}\right]}\right\} > 1, \quad (10)$$

поскольку $th\frac{B}{T} \leq 1$, от сюда следует, что:

1. Если для одной из подрешеток данные условия не выполняются, то соответствующее упорядочение в ней можно определить как спиновое (кластерное) стекло.

2. Очевидно, что в случае отсутствия взаимодействия между подрешетками ($H_{012} = H_{021} = 0$), условия возможности магнитного упорядочения типа «ферромагнетик» выглядит так:

$$\frac{H_{011}}{B_1} > 1; \qquad \frac{H_{022}}{B_2} > 1. \quad (11)$$

3. Легко также видеть, что для тождественных подрешеток ($H_{012} = H_{021} = H_0, H_{011} = H_{022}, B_1 == B_2 = B$), при стремлении H_{011} и H_{022} к нулю условия (9), (10) приобретают вид:

$$\left(\frac{H_0}{B}\right)^2 > 1, \quad (12)$$

в случае, когда $H_0 < 0$ – имеет место антиферромагнитное упорядочение в подрешетках.

В работе [4] численно исследована система с конкурирующими обменным взаимодействиями, в которой возможно непрерывное изменение обменных интегралов от положительных к отрицательным. Наш подход позволяет аналитически исследовать такую систему и провести сравнение с результатами численного эксперимента.

Для сравнения с результатами работы [4] будем полагать (в случае прямого обменного взаимодействия при концентрации магнитных атомов $p = 1$):

$$H_0 = K(1-a)z - Jaz = K[(1-a)z - xaz], \quad (13)$$

$$B = \sqrt{2(K^2(1-a)z + J^2az)} = \sqrt{2((1-a)z + x^2az)}, \quad (14)$$

где: K – положительный обменный интеграл, J – модуль отрицательного обменного интеграла, $x = \frac{J}{K}$, a – концентрация ионов с отрицательным обменным взаимодействием, z – число ближайших соседей.

Используя условия существования спонтанной намагниченности (11), (12) и выражения для H_0 (13) и B (14), можно получить фазовую диаграмму в координатах (x, a), позволяющую оценить тип магнитного упорядочения двухподрешеточной системы, например для $z = 6$, качественно совпадающую с результатами работы [3] (рисунок).

Таким образом, метод случайных полей взаимодействия, сохраняя простоту теории молекулярного поля, позволяет описывать не только ферро-, антиферро-, ферримагнитные упорядочения, но и упорядочения типа «спиновое стекло» (сперро- и сперимагнитизм).

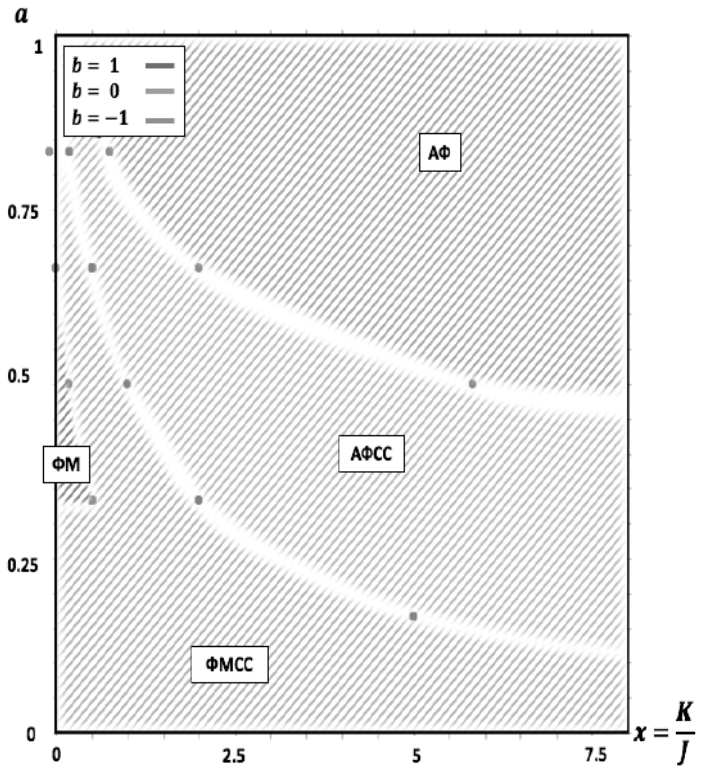


Рис. Фазовая диаграмма

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Белоконь В. И., Нефедев К. В. Функция распределения случайных полей обменного взаимодействия в неупорядоченных магнетиках. Спиновое и макроспиновое стекло // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2001. Т.120, №1(7). С. 156-164.
2. Белоконь В. И., Нефедев К. В. Магнитные фазовые переходы в аморфных системах с конкурирующими обменными взаимодействиями // Физика твердого тела. 2002. Т. 44, №9. С. 1632-1634.
3. Белоконь В. И., Нефедев К. В., Савунов М. А. Спиновое стекло с конечным радиусом взаимодействия в модели Изинга // Физика твердого тела. 2006. Т. 48, № 9. С. 1649-1656.
4. Петраковский Г. А. Спиновые стекла // Соросовский образовательный журнал. 2001. № 9. С. 83-89.

СООТНОШЕНИЕ ПОДХОДОВ К ОПИСАНИЮ РЕЗОНАНСНЫХ ЯВЛЕНИЙ В ПРОЦЕССАХ ИОНИЗАЦИИ АТОМНЫХ СИСТЕМ

С. М. Бурков, А. С. Зайцев

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: s_burkov@mail.ru

В статье проведен анализ различных подходов к описанию процессов резонансной ионизации атомных систем. Рассмотрен общий подход, основанный на представлении вещественной К–матричной асимптотики, и общий подход, основанный на представлении комплексных энергий. Показано, что при равных допущениях метод комплексных энергий позволяет представить резонансное сечение в виде суперпозиции фановских форм. Предложен метод анализа резонансного процесса без ограничения числа открытых каналов для перекрывающихся резонансов.

В ранних работах У. Фано и его последователей [1,2] было показано, что при выборе набора базисных функций, удовлетворяющих определенным условиям, задача нахождения сечений резонансной ионизации атома решается аналитически. В случае распада изолированного резонанса по одному или нескольким открытым каналам, сечение представляется простым выражением, параметры которого имеют простой физический смысл. Этими параметрами являются: положение резонанса E_m, его ширина Γ_m, а также параметры асимметрии q и ρ^2.

$$\sigma_{tot}^{r}(E) = \sigma^{dir}(E)\left\{1 + \left(\rho_r^2 \frac{(q_r+\epsilon_r)^2}{\epsilon_r^2+1}\right) - \rho_r^2\right\}.\ \epsilon = \frac{E-E_r}{\Gamma_r} \quad (1)$$

Выражение известно как формула Фано и широко используется в спектроскопии автоионизационных состояний при интерпретации как расчетных, так и экспериментальных данных. Обобщение этого подхода на случай распада нескольких взаимодействующих резонансов по одному или нескольким открытым каналам не позволяет свести полученные выражения к суперпозиции состояний описываемых формулами (1). В этих случаях вопрос определения спектроскопических параметров состояний оставался открытым. В работах [1,2] также не было рассмотрено описание резонансов в парциальных сечениях. Вместе с тем, как было показано в [3-4], изменение граничных условий при постановке задачи позволяет получить общее решение для произвольного случая. Практически это соответствует переходу от вещественной К – матричной асимптотики к работе с физическими каналами имеющими комплексную S – матричную асимптотику. Данная работа посвящена анализу соотношения этих подходов.

К – матричный подход

Рассмотрим основные положения К – матричного подхода. Следует отметить, что изложенный ниже подход не полностью повторяет выкладки [1,2], а при схожих предположениях приводит к результатам, совпадающим с точностью до обозначений. Представим полный гамильтониан атомной системы в следующем виде:

$$H = H^{mod} + V^{res} \quad (2)$$

где H^{mod} – модельный гамильтониан, собственные функции которого ψ_i^E и ϕ_m диагонализируют в подпространствах состояний дискретного и непрерывного спектров полного гамильтониана. V^{res} – остаточное взаимодействие отвечающее за взаимодействие подпространств. Собственные функции ψ_i^E и ϕ_m удовлетворяют следующим условиям:

$$\langle\phi_m|\widehat{H}|\phi_n\rangle = E_n\delta_{mn}\ ; \quad (3)$$

$$\langle\psi_\lambda^E|\widehat{H}|\psi_{\lambda'}^{E'}\rangle = E\delta_{\lambda\lambda'}\,\delta(E-E')\ ; \quad (4)$$

$$\langle\phi_m|\widehat{H}|\psi_\lambda^E\rangle = \langle\phi_m|V^{res}|\psi_\lambda^E\rangle = V_\lambda^m(E); \quad (5)$$

$$[V_\lambda^m(E)]^* = V_\lambda^m(E),\ \ \langle\phi_m|\psi_\lambda^E\rangle = 0; \quad (6)$$

Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) будем искать в виде разложения по собственным функциям модельного гамильтониана:

$$\Phi_i^E = \sum_m a_i^{mE}|\phi_m\rangle + \sum_\lambda \int_0^\infty b_i^{\lambda E}(E')\,|\psi_\lambda^{E'}\rangle\,dE' \ . \quad (7)$$

© Бурков С. М., Зайцев А. С., 2018

Подстановка разложения (7) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (2) с учетом свойств (3-6) приводит его к системе интегро-алгебраических уравнений:

$$\begin{cases}(E_m - E)a_i^{mE} + \sum_\lambda \int_0^\infty b_i^{\lambda E}(E')\,V_\lambda^m(E')dE' = 0 \\ \sum_m a_i^{mE}\,V_\lambda^m(E) + (E - E')b_i^{\lambda E}(E') = 0\end{cases}. \quad (8)$$

Формальное решение $b_i^{\lambda E}$ представим в следующем виде:

$$b_i^{\lambda E}(E') = P\frac{\sum_m V_\lambda^m(E)a_i^{mE}}{(E-E')} + A_{i\lambda}\delta(E - E'). \quad (9)$$

Выбор матрицы $A_{i\lambda}$ определяет асимптотические свойства полученного решения. Так, например если положить $A_{i\lambda}$ вещественной, а базисные волновые функции непрерывного спектра имеют вещественную асимптотику $\psi_i^E \sim a\sin(kr) + bcos(kr)$, то решение будет также иметь вещественную асимптотику. Подставив (9) в первое уравнение системы (8) получим систему алгебраических уравнений относительно коэффициентов a_i^{mE}.

$$(E_n - E)a_i^{nE} + \sum_m [F_{nm}(E)]\,a_i^{mE} = -\sum_\lambda V_\lambda^n(E)A_{i\lambda}, \quad (10)$$

$$g_{nm}(E) = \pi\sum_\lambda V_\lambda^m(E)V_\lambda^n(E),\ F_{nm}(E) = \frac{1}{\pi}P\int_0^\infty \frac{g_{nm}(E')}{E-E'}dE'$$

Найдем собственные векторы и собственные значения U_{nm},$\dot{E}_n$ симметричной вещественной матрицы правой части системы (10)

$$W_{nm}(E) = \delta_{nm}E_n + F_{nm}(E) \quad (11)$$

Решение системы (10) через собственные векторы и собственные значения можно записать в следующем виде:

$$a_i^{mE} = \sum_k U_{mk}(E)\frac{\dot{V}_i^k(E)}{[E-\dot{E}_k(E)]}; \quad (12)$$

$$\dot{V}_\lambda^k(E) = \sum_m U_{mk}V_\lambda^m(E)$$

Подставляя (12) в выражение (9) получаем:

$$b_i^{\lambda E}(E') = P\sum_i A_{ij}[\frac{K_{i\lambda}(E,E')}{(E-E')} + A_{i\lambda}\delta(E - E')]. \quad (13)$$

где $K_{i\lambda}(E,E) = \sum_m \frac{\dot{V}_\lambda^m(E)\dot{V}_i^m(E)}{E-E_m}$ - матрица реактанса. Подставив (12) и (13) в разложение (7) для полной волновой функции можно записать следующее выражение:

$$\Phi_j^E = \sum_i A_{ij}\{|\psi_i^E\rangle + \sum_m \frac{\dot{V}_i^m(E)}{[E-\dot{E}_m(E)]}[\,|\phi_m\rangle + \sum_\lambda P\int_0^\infty \frac{\dot{V}_\lambda^m(E')}{E-E'}|\psi_\lambda^{E'}\rangle dE'\,]\} \quad (14)$$

Полученная волновая функция (14) должна удовлетворять условиям нормировки на дельта – функцию по энергии. Что бы определить нормирующую матрицу $A_{i\lambda}$, рассмотрим асимптотические свойства полученного решения. При $r \to \infty$ $|\psi_i^E\rangle \to \sin(k_i r + \delta)$, $|\phi_m\rangle \to 0$. Тогда выражение

$$\sum_m \frac{\dot{V}_i^m(E)}{[E - \dot{E}_m(E)]}[\,|\phi_m\rangle + \sum_\lambda P\int_0^\infty \frac{\dot{V}_\lambda^m(E')}{E-E'}|\psi_\lambda^{E'}\rangle dE'\,] \to \sum_\lambda K_{i\lambda}(E,E)\cos(k_\lambda r + \sigma)$$

Соответственно, матрица нормировок может быть представлена в виде:

$$A_{i\lambda} = (1 - i\pi K)^{-1} \quad (15)$$

Элементы матрицы $A_{i\lambda}$ можно выразить через собственные векторы и собственные значения *K*-матрицы. Пусть D_{ij}- собственные вектора, η_i- собственные значения. Тогда

$$A_{l\lambda} = \sum_j \frac{D_{lj}D_{j\lambda}}{1+i\pi\eta_j} \quad (16)$$

Парциальные сечения процесса ионизации атомной системы могут быть представлены в следующем виде:

$$\sigma_j(E) = |<\Psi^i|\hat{\mathrm{T}}|\Phi_j^E>|^2 \quad (17)$$

Ψ^i- волновая функция начального состояния, $\hat{\mathrm{T}}$ – оператор перехода, определяется типом рассматриваемого процесса. Подставляя (14) в (17) имеем выражение для парциальных сечений:

$$\sigma_j(E) = |\sum_i A_{ij}\{t_i^c(E) + \sum_m \frac{\dot{V}_i^m(E)}{[E-\dot{E}_m(E)]}[\,t_m^d + \sum_\lambda P\int_0^\infty \frac{\dot{V}_\lambda^m(E')}{E-E'}t_\lambda^c(E')dE'\,]\}|^2 \quad (18)$$

Преобразовав (18) к случаю распада одного резонанса по одному открытому каналу и переходя к обозначениям [1,2]:

$$a_i^{mE} = \sin\Delta / \pi V_\lambda^m(E'), \tag{19}$$

$$\mathrm{b_i^{\lambda E'}} = \frac{\left|\mathrm{V_\lambda^m(E')}\right|}{\pi\left(\mathrm{V_\lambda^m(E)}\right)^*}\frac{\sin\Delta}{\mathrm{E-E'}} - \cos\Delta\ \delta\left(\mathrm{E-E'}\right), \tag{20}$$

где $\Delta = -\arctan\frac{\pi}{A}$.

$A = \frac{E-E_m-F(E)}{\left|\mathrm{V_\lambda^m(E)}\right|^2}$, $F(E) = P\int dE'\ \frac{\left|\mathrm{V_\lambda^m(E')}\right|^2}{E-E'}$. Следуя этим обозначениям, можно получить

$$\langle\psi_\lambda^E|T|i\rangle = \frac{1}{\pi\left(\mathrm{V_\lambda^m(E)}\right)^*}\langle\Phi|T|i\rangle\sin\Delta - \langle\psi_\lambda^E|T|i\rangle\cos\Delta,$$

$$\Phi = \phi_m + P\int dE'\ \frac{\left|\mathrm{V_\lambda^m(E')}\right|^2\psi_\lambda^{E'}}{E-E'},$$

и вводя обозначения

$$\epsilon = -\cot\Delta = \frac{E-E_m-F(E)}{\pi\left|\mathrm{V_\lambda^m(E)}\right|^2},\quad q_m = \frac{\langle\Phi|T|i\rangle}{\pi\left(\mathrm{V_\lambda^m(E)}\right)^*\langle\psi_\lambda^E|T|i\rangle};$$

получим формулу для полного сечения в ее классическом виде: $\sigma = \frac{(q_m+\epsilon)^2}{1+\epsilon^2}$;

Формулу (1) для распада из изолированного резонанса по нескольким открытым канала из (18) получить можно только для полного сечения перейдя к системе собственных каналов К – матрицы с использованием представления (16). Для общего случая распада нескольких состояний по одному или нескольким открытым каналам в системе параметров (1) в К – матричном подходе описание не представляется возможным.

Обобщение метода Фано. Представление комплексных энергий. Чтобы сформировать волновую функцию конечного состояния (7) с асимптотикой, соответствующей физическим каналам, формальное решение системы (8) представим в виде:

$$b_i^{\lambda E}(E') = P\frac{\sum_m V_\lambda^m(E)a_i^{mE}}{(E-E')} + \left[A_{i\lambda} - i\pi\sum_m V_\lambda^m(E)a_i^{mE}\right]\delta(E-E'). \tag{21}$$

После подстановки в систему (8) получим:

$$(E_n - E)a_i^{nE} + \sum_m[F_{nm}(E) - ig_{nm}(E)]\,a_i^{mE} = -\sum_\lambda A_{i\lambda}V_\lambda^n(E),$$

$$g_{nm}(E) = \pi\sum_\lambda V_\lambda^m(E)V_\lambda^n(E),\ F_{nm}(E) = \frac{1}{\pi}P\int_0^\infty\frac{g_{nm}(E')}{E-E'}dE' \tag{22}$$

Определим $B_{nm}(E)$ и $\eta_n(E) = E_n(E) + i*\Gamma_n(E)/2$ – собственные вектора и собственные значения симметричной комплексной матрицы , входящей в левую часть уравнения (22):

$$W_{nm}(E) = \delta_{nm}E_n + F_{nm}(E) - ig_{nm}(E). \tag{23}$$

Отсюда, можно получить выражения для коэффициентов:

$$a_i^{mE} = \sum_k B_{mk}(E)\frac{\sum_\lambda A_{i\lambda}\tilde{V}_\lambda^m(E)}{[E-E_k(E)+i\Gamma_k(E)/2]}, \tag{24}$$

$$\mathrm{b_i^{\lambda E'}} = \sum_\mu \mathrm{A_{i\mu}}\left[\delta_{\lambda\mu}\delta\left(\mathrm{E-E'}\right) + \sum_k\frac{V_\mu^k(E)V_\lambda^k(E')}{\left[E-E_k(E)+\frac{i\Gamma_k(E)}{2}\right]} * \left(\frac{\mathrm{P}}{\mathrm{E-E'}} - \mathrm{i}\pi\delta\left(\mathrm{E-E'}\right)\right)\right], \tag{25}$$

где $\tilde{V}_\lambda^m(E) = \sum_m B_{mk}(E)V_\lambda^m(E)$,

Подстановка (25) и (24) в разложение (7) для ψ_i^E, после достаточно громоздких преобразований позволяет получить выражение для полного и парциальных сечений в следующем виде:

$$\sigma_\alpha(E) = \sigma_\alpha^{dir}(E) + \sum_m\frac{\Gamma_m(E)P_{m\alpha}(E)+\varepsilon_m(E)Q_{m\alpha}(E)}{\varepsilon_m^2(E)+1}, \tag{26}$$

функции $P_{m\alpha}(E)$ и $Q_{m\alpha}(E)$ являются удвоенной реальной и мнимой частями комплексной функции:

$$N_{\alpha m}(E) = \sum_{\lambda\epsilon\alpha}H_{m\lambda}(E)\left(t_\lambda^{dir}(E) + \sum_n\frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_n(E)-\varepsilon_m(E)+2i}\right)^*, \tag{27}$$

где

$$t_\lambda^{dir}(E) = \langle \lambda E|\hat{t}|0\rangle,$$
$$H_{m\lambda}(E) = 2\tilde{V}_\lambda^m(E)\left[\langle\tilde{\Phi}_m^E|\hat{t}|0\rangle - i\langle\chi_m^E|\hat{t}|0\rangle\right]/\Gamma_m(E)$$
$$|\tilde{\Phi}_m^E\rangle = |\varphi_m^c\rangle + \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{|\chi_m^{E'}\rangle}{E-E'}dE'$$
$$|\chi_m^{E'}\rangle = \pi\sum_\mu \tilde{V}_\mu^m(E)|E\mu\rangle$$

Индекс α в данном случае определяет канал или группу каналов, в которой исследуется сечение процесса ионизации. Функции $P_{m\alpha}(E)$ и $Q_{m\alpha}(E)$ входят в выражение для сечений линейно, поэтому переход от парциальных сечений к полному или сечению по группе каналов осуществляется суммированием.

$$P_{m\alpha}(E) = \sum_{\lambda\epsilon\alpha} P_{m\lambda}(E) \qquad Q_{m\alpha}(E) = \sum_{\lambda\epsilon\alpha} Q_{m\lambda}(E)$$

Для любого α выражение для сечений (26) может быть представлено обобщенной формулой Фано:

$$\sigma_\alpha(E) = \sigma_\alpha^{dir}(E)\left\{1 + \sum_m\left(\rho_{m\alpha}^2(E)\frac{(q_{\alpha m}(E)+\epsilon_m(E))^2}{\epsilon_m^2(E)+1}\right) - \rho_{\alpha m}^2(E)\right\}. \quad (28)$$

При этом аналоги параметров Фано – $q_m(E)$ и $\rho_m^2(E)$ являются функциями энергии E и выражаются через функции $P_{m\alpha}(E)$и $Q_{m\alpha}(E)$.

$$q_{m\alpha}^{\pm}(E) = \frac{P_{m\alpha}(E)}{Q_{m\alpha}(E)} \pm \sqrt{\left(\frac{P_{m\alpha}(E)}{Q_{m\alpha}(E)}\right)^2 + 1}\,;$$
$$\rho_{m\alpha}^{2\pm}(E) = P_{m\alpha}(E)/(2q_{m\alpha}^{\pm}(E)\sigma_\alpha^{dir}(E)). \quad (29)$$

В связи с тем, что выражение (28) является квадратичной формой относительно функций $P_{m\alpha}(E)$ и $Q_{m\alpha}(E)$, можно определить два набора функций $q_m(E)$ и $\rho_m^2(E)$, определяющих сечение (28). Выбор набора осуществляется из следующих соображений. $q_m(E) > 0$ в окрестности резонанса, случае если минимальное значение сечения для данного резонанса предшествует максимальному значению.

Параметризация резонансных сечений. В случае слабой зависимости функций $P_{m\alpha}(E)$ и $Q_{m\alpha}(E)$от энергии они могут быть приближенно заменены на их значения в точках резонансов, определяемых решением уравнений: $E_m(E)=E$. Полученная таким образом параметрическая формула является универсальной, она позволяет вводить парциальные параметры, параметры отношения ветвей процесса в произвольном случае. Рассмотрим далее ряд вопросов, связанных с извлечением параметров резонансных состояний, как в случае изолированного резонанса, так и при наличии перекрывающихся резонансов. Примером не перекрывающихся состояний может служить полное сечение резонансной фотоионизации атома аргона между первым ($3p^5{:}\,P^2|$ и вторым ($3s3p^6{:}\,S^2|$ порогами. (рис 1) Резонансы соответствуют возбуждению частично-дырочной серии ($3s3p^6$ np:^{1} P|. Расчет выполнялся методом R-матрицы [5] в приложении к задаче двух фотонной ионизации.

Резонансы на рисунке соответствуют состояниям ($3s3p^6$ np:^{1} P|. n=5,6.. и с хорошей степенью точности можно считать изолированными. В соответствии с выше изложенным для оценки параметров применима формула (1). Для первичной оценки параметры Фано можно выразить через такие характерные точки резонансной кривой, как максимум и минимум сечения ($\sigma_{max}^m; \sigma_{min}^m$), энергию в этих точках ($E_{max}^m; E_{min}^m$) и фоновое сечение σ_m^{dir}:

$$q_m = \frac{1}{\rho_m}\left(\frac{\sigma_{max}^m}{\sigma^{dir}} - 1\right)^{1/2};\ \rho_m^2 = \left(1 - \frac{\sigma_{min}^m}{\sigma^{dir}}\right). \quad (30)$$

а также выразить через них, положение и полуширину резонанса, соответственно:

$$E_m = \frac{E_{min}^m + E_{max}^m q_m^2}{1+q_m^2}\,; \quad (31)$$
$$\Gamma_m/2 = \frac{(E_{max}^m - E_{min}^m)q_m}{1+q_m^2}\,. \quad (32)$$

В соответствии с полученными формулами произведем оценку резонансных параметров для первых трех резонансов. Результаты оценки приводятся в таблице 1. Следует отметить, данная оценка является приближенной с точностью до определения значений фона прямых пе-

реходов σ_m^{dir} в точке рассматриваемого резонанса. Тем не менее, полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом и расчетами других авторов [6] .

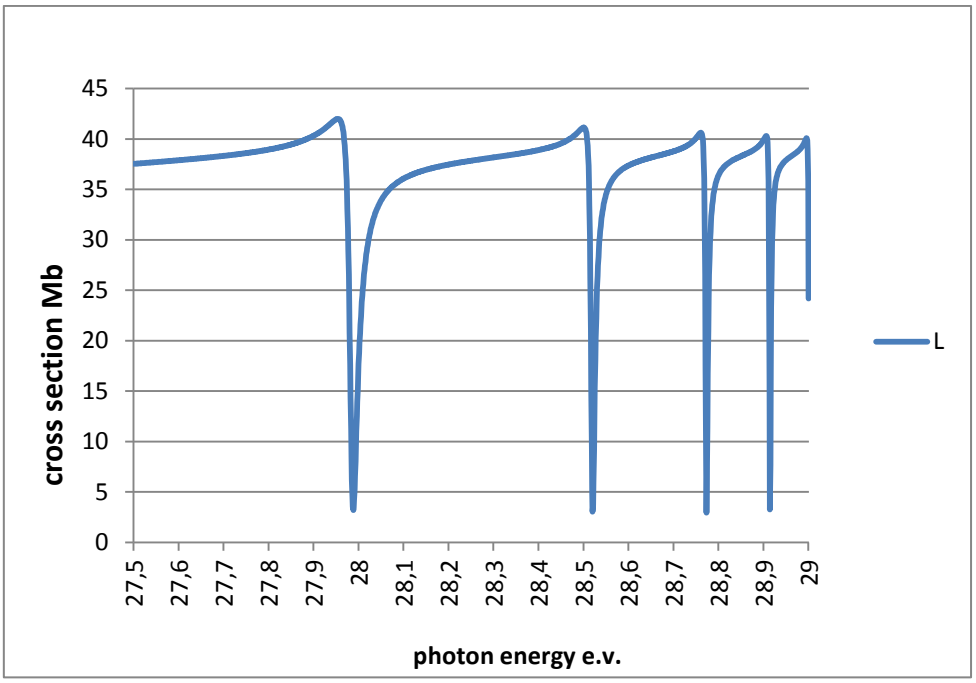


Рис. 1. Полное сечение резонансной фотоионизации атома аргона

Таблица 1

Оценка значений энергий E_r, ширин Γ_r резонансов и соответствующих параметров Фано q_r, ρ^2

Порядковый номер резонанса	E_r, эВ	Γ_r, эВ	q_r	ρ^2
5	27.98	0.0265	– 0.479	0.910
6	28.52	0.0129	– 0.365	0.918
7	28.77	0.00731	– 0.340	0.921

Оптимизация параметров резонансов может быть выполнена подбором функциональной зависимости $\sigma_\alpha^{dir}(E)$ с использованием метода наименьших квадратов.

В случае наличия перекрывающих резонансных структур в сечениях фотоионизации использование фановских форм сталкивается с рядом затруднений, которые связаны с неоднозначностью определения параметров и последующими сложностями при проведении оптимизации. Такая ситуация характерна, на пример, для атома бериллия [6].

Из рисунка видно, резонансный спектр атома бериллия в указанной области энергий формируется из перекрывающихся широких резонансов, соответствующих 2pns ^{1}P состояниям и проявляющихся на их фоне узких 2pnd^{1}P резонансов. В отличии от аналогичного случая в спектре атома гелия, в бериллии выход на области фона прямых переходов не представляется возможным. В связи чем, в данной работе предлагается схема проведения анализа резонансной кривой основанная на использовании выражения (26). Последовательность действий (алгоритм) следующая:

1. На основе однорезонансных формул (30-32) производится оценка положений и ширин резонансов в обрабатываемой области энергий. Параметр σ_m^{dir} выбирается исходя из метода наименьших квадратов.

2. Полученные положения и ширины подставляются в формулу (26). Функция $\sigma_\alpha^{dir}(E)$ аппроксимируется полиномом. В связи с тем, что коэффициенты полинома, а также параметры

$P_{m\alpha}$ и $Q_{m\alpha}$ входят в выражение (26) линейно, задача приближения кривой по методу наименьших квадратов сводится к решению системы линейных уравнений.

3. Полученные параметры $P_{m\alpha}$ и $Q_{m\alpha}$ подставляются в (29) для величин q_m и ρ_m^2, которые подставляются в (31-32) для получения следующей оценки положений и ширин.

4. Процедура повторяется до достижения критерия сходимости.

Таким образом, на основе представления комплексных энергий предложена схема обработки резонансных сечений ионизации для общего случая перекрывающихся резонансов. Схема дает возможность определить параметры Фано в произвольном случае и получить данные по прямому процессу в рассматриваемой области энергий.

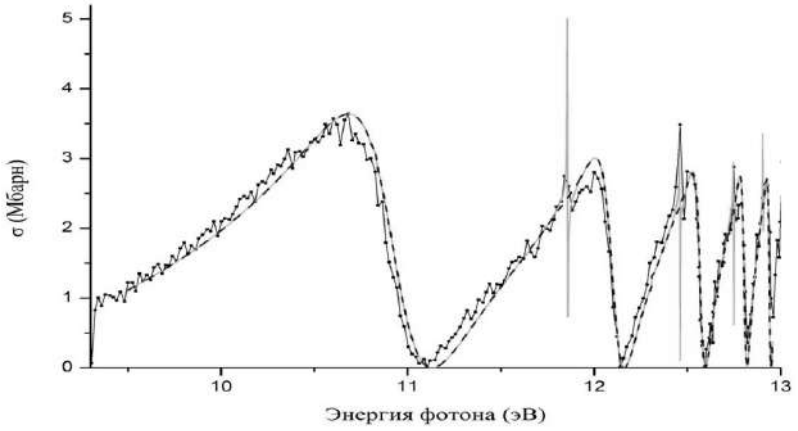


Рис. 2. Полное сечение фотоионизации бериллия (эксперимент [6]) между первым и вторым порогами

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Fano U. Phys. Rev. A, 1961, V. 124, № 6, p. 1866-1874.
2. Starace A. F. Phis. Rev. B, 1972, V5, № 5, p. 1773-1784.
3. Бурков С. М., Страхова С. И. Вестник МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 1984. Т. 25. №3. С. 42-49.
4. Burkov S. M., Strakhova S. I. Zajac T. M. – J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1990. V. 23. P. 3677-3690.
5. Burkov S. M. at all - IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 875 (2017) 022009
6. R. Wehliz, D. Lukic, and J.B. Bluett., Physical Review. A 68, 052708 (2003).

МОДЕЛИРОВАНИЕ СДВИГОВОГО РАЗРУШЕНИЯ В СПЛАВЕ TiAl ПРИ ЛЕГИРОВАНИИ ВОЛЬФРАМОМ И ХРОМОМ

А. А. Гниденко

ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВО РАН,
г. Хабаровск, e-mail: agnidenko@mail.ru

Методами квантово-механических расчетов исследовано сдвиговое разрушение в интерметаллидном сплаве γ-TiAl при наличии вакансионных дефектов, а также в присутствии вольфрама и хрома. Рассмотрены энергетически более выгодные замещения атомов Ti атомами W и атомов Ti и Al атомами Cr в кристаллической решетке γ-TiAl. Моделирование сдвига осуществлялось в плоскости скольжения (111) *в двух направлениях* – [110] *и* $[11\bar{2}]$. *Проведена численная оценка влияния на снижение сопротивляемости сдвигу наличия дефектов в решетке γ-TiAl. Установлено, что и хром, и вольфрам, занимая вакансию по титану, могут компенсировать данный дефект, увеличивая модуль сдвига для системы скольжения* $\{111\}\langle 110\rangle$.

© Гниденко А. А., 2018

Благодаря сочетанию ряда эксплуатационных свойств, таких как жаропрочность, низкая плотность, трещиностойкость и устойчивость к окислению [1] сплавы алюминида титана привлекают внимание исследователей на протяжении последних 30 лет. Долгое время использование данных сплавов было ограничено относительно низкой вязкостью разрушения при комнатной температуре. Исследования, направленные на попытку увеличить пластичность и уменьшить размер зерен в сплаве, в первую очередь, были сосредоточены на контроле микроструктуры и легировании TiAl различными добавками. В частности, небольшие добавки бора и вольфрама ведут к улучшению ламинарной структуры в TiAl сплаве, обеспечивая сопротивляемость укрупнению в слоистой структуре α_2-фазы (Ti_3Al) [2]. Также, согласно ряду исследований внедрение вольфрама в TiAl усиливает трещиностойкость, сопротивляемость окислению и прочность [3,4]. Легирование $\gamma+\alpha_2$ сплавов хромом улучшает пластичность алюминида титана при комнатной температуре, повышает вязкость разрушения и сопротивляемость окислению [5, 6]. В представленной работе проведено пошаговое моделирование сдвигового разрушения в TiAl (γ-фаза) при наличии дефектов вакансионного типа, а также, в присутствии атомов вольфрама и хрома, для оценки влияния данных легирующих элементов на сопротивляемость сдвигу в TiAl сплаве.

Квантово-механические расчеты, представленные в работе, были выполнены с использованием пакета программ ABINIT [7], основанным на теории функционала плотности, совмещенной с методом псевдопотенциала. Энергия обрезания базиса плоских волн в расчетах составляла 22 Хартри, было использовано приближения обобщенных градиентов (GGA) в форме PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof), набор k-точек был сформирован с помощью процедуры Монкхорста-Пэка. Для генерирования псевдопотенциалов алюминия, титана, вольфрама и хрома использовалась программа FHI98pp [8]. Были проведены тестовые расчеты на корректное описание свойств γ-TiAl, а также объемно-центрированных кубических решеток Cr и W, таких как параметры кристаллической решетки и объемный модуль упругости. Результаты тестовых расчетов и сопоставление с литературными данными приведены в таблице 1. Мы получили хорошее согласование по параметрам решетки, с типичным для GGA приближения незначительным (в пределах 1-2%) завышением данных величин. Значения объемных модулей упругости также хорошо согласуются с экспериментальными данными, кроме величины для объемно-центрированной кубической решетки хрома; однако в расчетных работах, выполненных в рамках аналогичных подходов, получают сопоставимое по величине значение [14].

Известно, что основные модели деформации в γ-TiAl – это скольжение и двойникование, и тот и другой процесс задействуют плоскость (111), обладающую плотной упаковкой. Для моделирования сдвигового разрушения мы выбирали модель исходя из результатов тестирования «слэба» для качественного описания поверхности (111). На основе тестовых расчетов мы выбрали «слэб»-модель из 12 атомных слоев с вакуумным промежутком в 14,8 Å (для исключения взаимного влияния атомов нижнего и верхнего слоя).

Таблица 1

Тестовые расчеты. Параметры решетки (a, c) и объемный модуль упругости (B)

		Расчет	Эксперимент
γ-TiAl	a, Å	4,04	3,98 [9]
	c, Å	4,11	4,08 [9]
	B, ГПа	110	112 [10]
W (ОЦК)	a, Å	3,16	3,17 [11]
	B, ГПа	318	323 [12]
Cr (ОЦК)	a, Å	2,89	2,91 [13]
	B, ГПа	242	190 (250) [12] ([14])

Атомы 6 верхних слоев с фиксированным шагом смещались вдоль определенного направления, это позволило нам получить зависимость полной энергии от величины сдвига и оценить величины энергетических барьеров. При этом атомы в 3-х верхних и 3-х нижних слоях были зафиксированы в своих положениях, а атомы в слоях между ними могли менять свое по-

ложение в процессе структурной релаксации. Было рассмотрено два направления: направление скольжения [110] – наикратчайшее расстояние между атомами, лежащими в плоскости (111); и направление $[11\bar{2}]$, в котором, наоборот, расстояние между соседними атомами является наибольшим. Для исследования влияния вакансионных дефектов и примесей вольфрама и хрома был использован «слэб» из 13 атомных слоев. Вакансия создавалась путем удаления атома из центрального слоя. Мы рассмотрели вакансии образованные как удалением атома титана, так и удалением атома алюминия. Квантово механические расчеты, выполненные для целого ряда переходных металлов в TiAl [15,16] свидетельствуют о том, что замещение атома титана вольфрамом энергетически более выгодно, в то время как хром равновероятно может замещать как титан, так и алюминий. Поэтому при моделировании было рассмотрено замещение вольфрамом только атома титана в центральном слое, а для хрома было рассмотрено замещение, и титана, и алюминия. На рис. 1 приведены используемые для моделирования модели, сориентированные в двух направлениях.

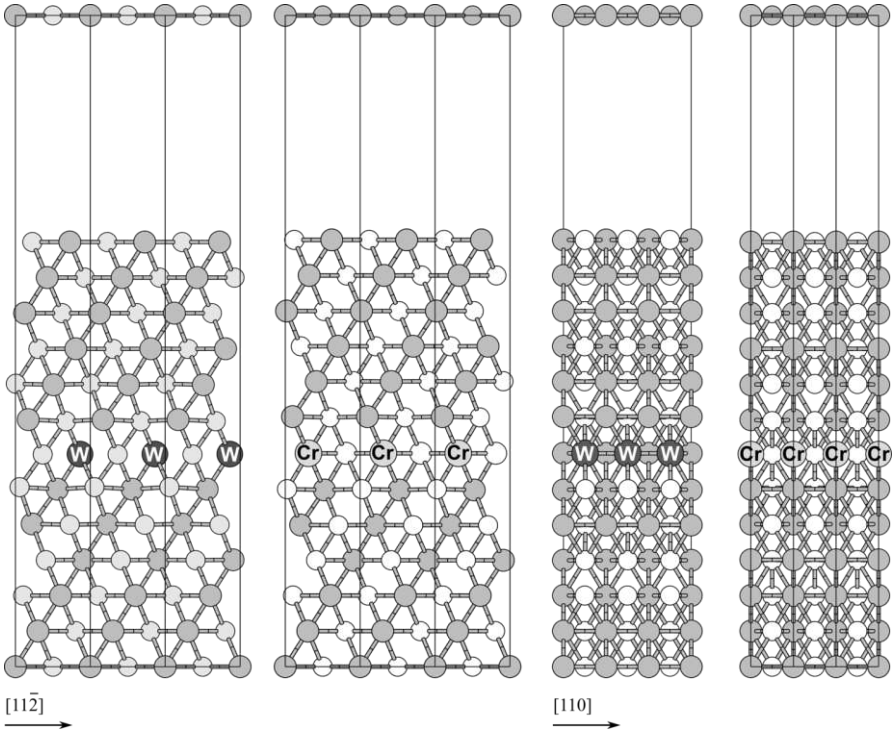


Рис. 1. «Слэб»-модели для исследования сдвига в γ-TiAl вдоль двух направлений. Светлым цветом показаны атомы Al, серым – Ti, атомы замещения W и Cr обозначены символами

На рис. 2 представлены зависимости изменения энергии относительно сдвига, приведенного к периоду решетки в выбранном направлении. Пики данных кривых соответствуют критическим точкам, до которых происходит накопление напряжений при смещениях. Следующий сдвиговый шаг приводит к снижению (как правило, очень резкому) энергии системы, что соответствует разрыву и образованию новых межатомных связей. Энергетический барьер в случае сдвига вдоль направления [110] для идеальной структуры γ-TiAl примерно в 1,4 раза ниже по сравнению с направлением $[11\bar{2}]$, что вполне закономерно. Также можно отметить различную периодичность пиков относительно величины смещения: в случае направления [110] их периодичность близка к периоду кристаллической решетки, в то время как для направления $[11\bar{2}]$ периодичность пиков выглядит более хаотичной, и становится, по меньшей мере, в 2 раза ниже относительно периода решетки в данном направлении.

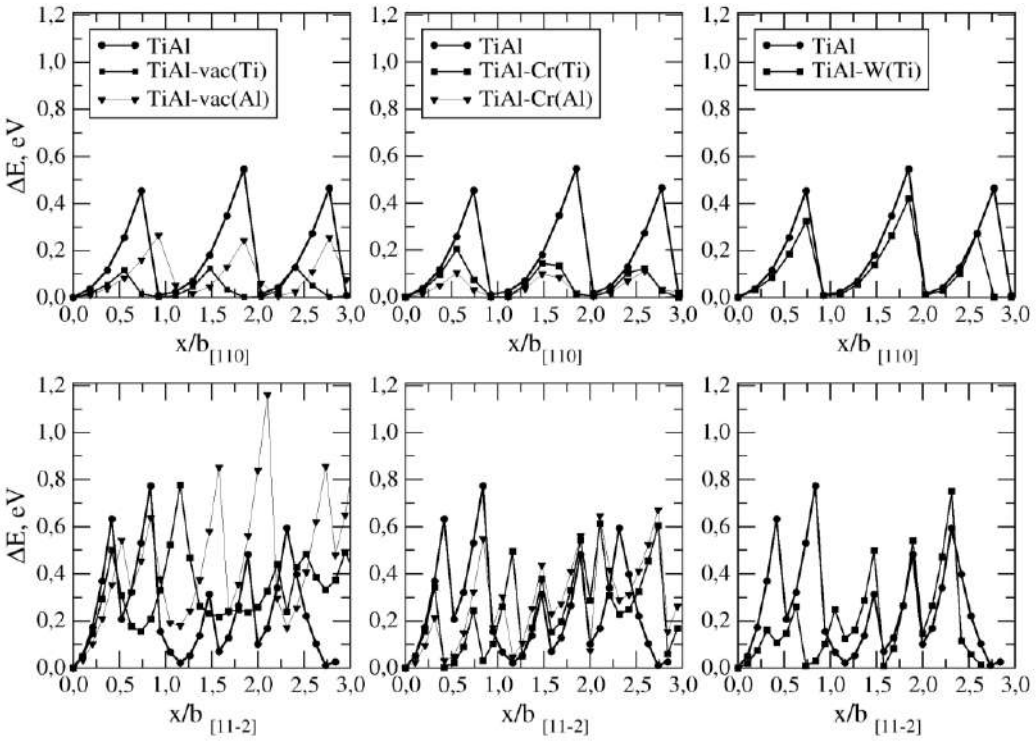


Рис. 2. Изменение полной энергии от величины относительного смещения при сдвиге в γ-TiAl (идеальном и дефектном) вдоль направлений $[11\bar{2}]$ и [110]

Дефекты в разной степени снижают сопротивляемость сдвигу. Присутствие вольфрам имеет наименьшее влияние на уменьшение сопротивляемости сдвигу вдоль направления [110]. Кривые, построенные для сдвига в TiAl при наличии атомов замещения хрома, имеют свои характерные особенности, однако качественно повторяют зависимости, полученные для идеального алюминида титана и TiAl с вольфрамом. Энергетические барьеры при этом становятся ниже, особенно в случае замещения хромом атома алюминия.

Для более детальной оценки влияния дефектов на сдвиговую деформацию в TiAl, мы вычислили модуль сдвига. Для его расчета рассматривался начальный участок кривой изменения полной энергии от величины смещения, в каждом отдельном случае до первого пика; соответствующая зависимость касательного напряжения на данном участке аппроксимировалась линейной зависимостью.

Полученные нами значения модуля сдвига и соответствующего ему предельного напряжения для каждого случая приведены в таблице 2. Данные величины согласуются с приведенными выше результатами. Замещая атомы в γ-TiAl вольфрам и хром создают дефектность, которая ведет к снижению сопротивляемости сдвигу. Максимальное снижение модуля сдвига, практически в 3 раза, соответствует случаю, когда хром замещает атом алюминия в решетке γ-TiAl. В остальных случаях модуль сдвига снижается в 1,2-1,9. Исключение составляет лишь случай замещения хромом титана для направления $[11\bar{2}]$, в данной конфигурации модуль сдвига сопоставим со значением для идеальной структуры γ-TiAl, хотя предельное напряжение становится в 1,4 раза меньше. Если же сопоставлять величины модуля сдвига при наличии вакансионных дефектов и при заполнении этих дефектов атомами хрома и вольфрама, то можно отметить, что в случае сдвига вдоль направления [110] и хром, и вольфрам, частично компенсируют уменьшение сопротивляемости сдвигу, вызванное наличием в TiAl вакансии по титану. Модуль сдвига при этом увеличивается с 12-14 ГПа до 25-26 ГПа (рассчитанное значение для бездефектной решетки γ-TiAl составляет 31,2 ГПа). Для направления $[11\bar{2}]$, как уже было отмечено ранее, только хром, замещающий титан компенсирует вакансионный дефект.

Представленные расчеты были выполнены с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Центр данных ДВО РАН» [17].

Таблица 2

Рассчитанные величины модулей сдвига и соответствующих значений предельного напряжения для всех рассмотренных случаев

	G, GPa	Предельное напряжение, GPa		G, GPa	Предельное напряжение, GPa
$TiAl_{[110]}$	31,2	4,2	$TiAl_{[11-2]}$	43,0	5,6
$TiAl_{[110]}$ – vac(Ti)	14,6	1,3	$TiAl_{[11-2]}$ – vac(Ti)	37,8	4,3
$TiAl_{[110]}$ – vac(Al)	12,5	1,9	$TiAl_{[11-2]}$ – vac(Al)	27,4	3,9
$TiAl_{[110]}$ – W(Ti)	25,2	2,9	$TiAl_{[11-2]}$ – W(Ti)	21,8	1,8
$TiAl_{[110]}$ – Cr(Ti)	26,4	2,3	$TiAl_{[11-2]}$ – Cr(Ti)	44,5	4,0
$TiAl_{[110]}$ – Cr(Al)	13,3	1,2	$TiAl_{[11-2]}$ – Cr(Al)	28,0	2,5

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications. Edited by Leyens C., Peters M. Wiley – 2003. 513 pp – ISBN: 9783527305346.
2. Maziasz P. J., Ramanujan R. V., Liu C. T., and Wright J. L. Effects of B and W Alloying Additions on the Formation and Stability of Lamellar Structures in TwoPhase γ-TiAl // Intermetallics. 1997. Vol. 5. P. 83-95.
3. Larson D. J., Liu C. T. & Miller M. K. Tungsten segregation in $\alpha_2+\gamma$ titanium aluminides // Intermetallics – 1997. Vol. 5. P. 497-500.
4. Hashimoto K., Hirata H., Mizuhara Y. Phase Stability and High Temperature Tensile Properties of W doped gamma-TiAl // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 2011. Vol. 646. P. №7.8.1.-№7.8.6.
5. Zheng Y., Zhao L., and Tangri K. Microstructure evolution during heat treatment of a Cr-bearing Ti_3Al+TiAl alloy // Scr. Metall. Mater. 1992. Vol. 26. P. 219-224.
6. Hamzah E., Kanniah M., and Harun M. Effect of chromium addition on microstructure, tensile properties and creep resistance of as-cast Ti-48Al alloy // J. Mater. Sci. 2007. Vol. 42. P. 9063-9069.
7. X. Gonzea, B. Amadond, P.-M. Angladee, J.-M. Beukena, F. Bottind, P. Boulangera, F. Brunevalq, D. Calistej, R. Caracasl, M. Côtéo, T. Deutschj, L. Genovesei, Ph. Ghosezk, M. Giantomassia, S. Goedeckerc, D.R. Hamannm, P. Hermetp, F. Jolletd, G. Jomardd, S. Lerouxd, M. Mancinid, S. Mazevetd, M.J.T. Oliveiraa, G. Onidab, Y. Pouillona, T. Rangela, G.-M. Rignanesea, D. Sangallib, R. Shaltafa, M. Torrentd, M.J. Verstraetea, G. Zerahd and J.W. Zwanziger. ABINIT: First-principles approach to material and nanosystem properties. // Computer Phys. Comm. 2009. Vol. 180. P. 2582-2615.
8. Fuchs M., Scheffler M. Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density functional theory // Comp. Phys. Commun. 1999. Vol. 119. P. 32-67.
9. A Handbook of Lattice Spacing and Structure of Metals and Alloys / W. B. Pearson. Pergamon Press, Oxford. 1967. p. 1026.
10. Tanaka K., Koiwa M.. Single-crystal elastic constants of intermetallic compounds // Intermetallics. 1996. Vol. 4. P. S29-S39.
11. Handbook Committee of American Society for Metals, Metals Handbook, Vol. II, 9th ed. ~ASM, Metals Park, Ohio, 1979.
12. Hull A. W., Davey W. P. Crystal structure of chromium. Phys. Rev. 1919 – Vol. 14. p. 540-540
13. G. Simmons, Wang H. Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A Handbook. M.I.T. Press. 1971. 370 pp. – ISBN: 9780262190923.
14. Olsson P., Abrikosov I., Vitos L. and Wallenius J. Ab initio formation energies of Fe-Cr alloys // J. Nucl. Mater. 2003. Vol. 321. P. 84-90.
15. Song Y., Guo Z. X., and Yang R. First principles studies of TiAl-based alloys // J. Light Met. 2002. Vol. 2. P. 115-123.
16. C. Jiang. First-principles study of site occupancy of dilute 3d, 4d and 5d transition metal solutes in $L1_0$ TiAl // Acta Materialia. 2008. Vol. 56. P. 6224-6231.
17. Центр коллективного пользования "Центр данных ДВО РАН" [Электронный ресурс]: сайт. Хабаровск: ВЦ ДВО РАН. – URL: http://lits.ccfebras.ru (дата обращения: 25.06.2018)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ПРОТОНОВ НА ОКСИД ЦИНКА В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ GEANT4

А. Н. Дудин, В. В. Нещименко

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: andrew.n.dudin@gmail.com

*Представлены результаты физико-математического моделирования воздействия пуска быстрых протонов с энергией от 50 до 200 кэВ с частицами оксида цинка (ZnO) в программном комплексе Geant4 с использованием метода Монте-Карло. В качестве мишени используется ZnO с плотностью 5,61 г/см^3. Исходные данные для моделирования: геометрия мишени – куб со стороной 1000 нм; пучок сечением 1000 нм с энергией 50 кэВ падает на мишень по нормали к поверхности YZ; флюенс пучка 1*10^6 см$^{-2}$. Эффективный пробег протонов в ZnO составил для 50 кэВ – 0,00044 мм, для 100 кэВ – 0,00074 мм, для 150 кэВ – 0,00098 мм, для 200 кэВ пучок не задерживается образце. Глубина концентрации максимально накопленной энергии в образце для протонов с энергетикой 50 кэВ составляет 0,00008 мм, с 100 кэВ – 0,00006 мм, с 150 кэВ – 0,00014 мм, а с 200 кэВ – 0,00048 мм. Результаты исследований могут быть использованы в космической технике при разработке радиационно-стойких терморегулирующих покрытий и радиоэлектронных узлов космических аппаратов.*

Введение. Оксид цинка представляет собой широкозонный полупроводник, обладающий уникальными электрофизическими и оптическими свойствами и относящийся к группе прозрачных проводящих оксидов. Материалы на основе оксида цинка применяются в космической технике для изготовления оптоэлектронных преобразователи, светодиодов, а также в пигментах для покрытий космических аппаратов [1, 2] Это обусловлено его высокой фото- и радиационной стойкостью, а также высокими фото-эмиссионными характеристиками.

Физические эксперименты и натурные испытания, связанные с исследованием изменения рабочих характеристик в различных полях внешних воздействий сталкивается с проблемами описания получаемых закономерностей, что связано со сложными механизмами иерархической самоорганизации дефектов в сложных конденсированных системах. Описание подобных процессов возможно с помощью численных методов для изучения случайных процессов. Такой метод был реализован в пакете Geant4 [3], разработанная в Европейском центре ядерных исследований (ЦЕНР). Метод Монте-Карло, используемый в система библиотек Geant4, является одним из самых эффективных способов моделирования прохождения частиц через вещество. Применения данного метода, дает возможность с высокой точностью оценить траекторию частицы, потерю энергии на каждом шаге моделирования и проектировать изделия космической техники с проведения меньшего количество лабораторных экспериментов и натурных испытаний.

В данной работе представлены результаты физико-математического моделирования воздействия пучков протонов (основной частью космического ионизирующего излучения) различных энергий с мишенью из оксида цинка, с целью определения эффективного пробега протонов различных энергий и глубины максимальной концентрации накопленной энергии внутри исследуемого объекта.

Постановка задачи. Исходный объект моделирования помещен в мировой объем, наполненный вакуумом. В качестве мишени для расчетов использовались частицы оксида цинка с характерной структурой вюрцита и плотностью 5,61 г/см^3. Для генерации пучка протонов используется общий источник частиц. В качестве исходных данных были приняты следующие условия: геометрия мишени – куб со стороной 1000 нм; пучок сечением 1000 нм с энергией 50 кэВ падает на мишень по нормали к поверхности YZ, без какой-либо дисперсии; флюенс частиц 10^6 см$^{-2}$. Схема взаимного расположения пучка протонов и мишени представлена на рис. 1. При моделировании учитывались процессы используемы в наборе физики QGSP_BIG_EMY [4]: ионизация среды, множественное рассеивание частиц на атомах мишени, упругие и неупругие потери энергии, тормозное излучение.

© Дудин А. Н., Нещименко В. В., 2018

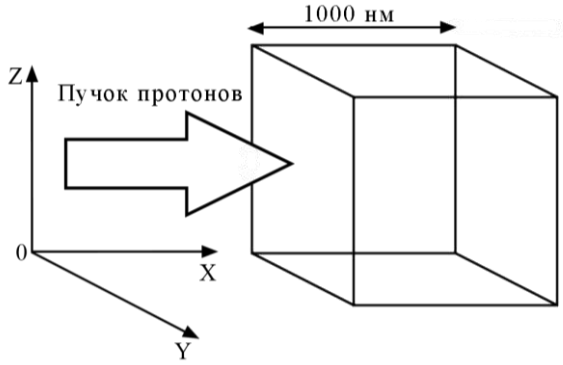


Рис. 1. Схема взаимной ориентации пучка протонов и мишени из ZnO

Результаты исследования и их обсуждение. Результаты моделирования прохождения пучка протонов с энергиями 50, 100, 150, 200 кэВ через ZnO с толщиной 1000 нм, представлены на рисунке 2. Как можно видеть, что при своем движение через мишень протоны рассеиваются, их траектория становиться очень сложной - происходит каскадное распределение ионов в веществе.

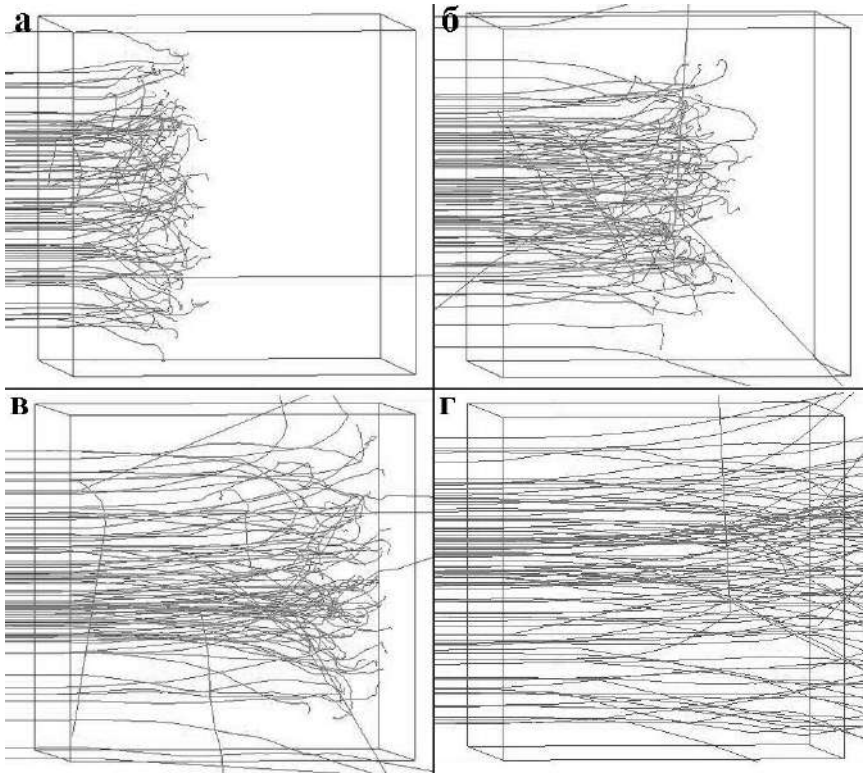


Рис. 2. Моделирование прохождения гауссово пучка протонов через ZnO с энергиями:
а – 50 кэВ; б – 100 кэВ; в – 150 кэВ; г – 200 кэВ

Для характеристики поглощённой энергии частиц в среде используется тормозная способность [5]:

$$S_j(E) = n_0 \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0)\sigma_n^{(j)}, \quad (1)$$

где $\sigma_n^{(j)}$ – эффективное сечение процесса возбуждение частицей сорта j (в нашем случае протоном) энергетического состояния с среде с энергией ε_n; ε_0 – энергия основного состояния; n_0 – число атомов в единице объема вещества.

Скорость поглощения энергии в единице массы, т.е. скорость накопления дозы $D(x)$ в точке x определяется как:

$$D(x) = \frac{1}{\rho}\sum_j \int d\Omega dE\ f_j(x, E, \Omega) S_j(E), \quad (2)$$

где ρ плотность вещества; $f_j(x, E, \Omega)$ – функция распределения частиц сорта j. Интегрирование здесь производиться по энергии E и телесному углу Ω.

Поскольку функции распределения $f_j(x, E, \Omega)$ являются линейными функциями источников частиц, выражения для расчета скорости накопления дозы излучения в точке x можно записать в виде [5]:

$$D(x) = \sum_j \int_\Gamma dl \int d\Omega dE \; R_j(x, \Gamma, E, \Omega)\xi_j(\Gamma, E, \Omega), \quad (3)$$

где $\xi_j(\Gamma, E, \Omega)$ – функция распределения падающих на поверхность образца в точке x частиц сорта j. Интегрирование здесь производиться по E, Ω и внешней поверхности образца Г.

Функция $R_j(x, \Gamma, E, \Omega)$, имеющая смысл функции отклика, определяется значениями тормозной способности $S_j(E)$ в различных точка моделируемого объекта, а так же геометрией облучаемой границы объекта.

В разработанной модели учитываться накопленная энергия поглощенных протонов. По оси X мишень, представленная ZnO, разбивалась на 50 срезов равной длины (по 20 нм). В процессе движения частицы через вещество, если происходила потеря энергии, то данное значение фиксировалось в ячейке с номером, соответствующим координате X данной частицы. Соответственно учитывалась потерянная энергия каждой выпущенной частицы на каждом шаге моделирования. На рисунке 3 представлено графическое распределение накопленной энергии протонов по глубине образца, смоделированное с использованием пакета Geant4.

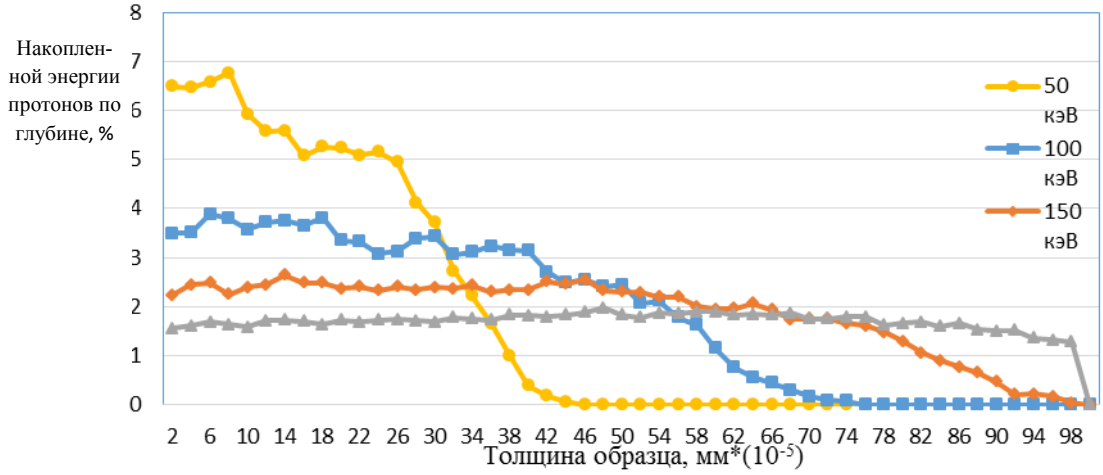


Рис. 3. Распределение переданной протонами энергии атомам мишени по глубине

Из представленной зависимости на рис. 3 можно видеть характер распределения поглощённой энергии то толщине образца. Как видно, для протонов с энергией 200 кэВ полоса максимума уширяется и охватывает более глубинные слои, по сравнению с остальными энергиями. Появления максимума, который отчетливо виден при энергии протонов энергии 50 кэВ, связано с развитием процесса ионизации в образце. Процессы же, связанные с поглощением и рассеиванием протонов, объясняют спад на кривой распределения. Из рисунка 3 следует, что глубина концентрации максимально накопленной энергии в образце для протонов с энергетикой 50 кэВ составляет 0,00008 мм, с 100 кэВ – 0,00006 мм, с 150 кэВ – 0,00014 мм, а с 200 кэВ – 0,00048 мм.

Заключение. Получены закономерности пробега протонов в зависимости от энергий частиц для объемной мишени оксида цинка микронных размеров. Установлено распределение переданной протонами энергии атомам мишени по глубине. Показано, что мишень с толщиной 1 мкм способна поглотить энергию протонов до 200 кэВ. Данные результаты могут быть использованы в космической технике при разработке радиационно-стойких терморегулирующих покрытий и радиоэлектронных узлов космических аппаратов.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Kiomarsipour N., Razavia R.S., Ghani K. Improvement of spacecraft white thermal control coatings using the new synthesized Zn-MCM-41 pigment // Dyes and Pigments. 2013. V. 96. P.403-406.
2. Singh S.C. Zinc oxide nanostructures. synthesis, characterizations and device applications // Journal of Nanoengineering and Nanomanufacturing. 2013. V.3. P.1-28.
3. Agostinelli S., Allison J., Amak, K., Apostolakis J. et al. Geant4 - a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2003. V.506. P.250.
4. Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Recent developments in Geant4 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2016. V.835. P. 186.
5. Компьютерное моделирование распределения поглощенной дозы и внедренного заряда в элементах конструкции космических аппаратов / Л. С. Новиков, В. Н. Милеев, А. А. Маклецов и др. // Модель космоса. Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов. 2007. С. 450-465.

ПОТЕНЦИАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ КВАЗИШТУРМОВСКИХ ФУНКЦИЙ

А. С. Зайцев, А. И. Андреев, Е. И. Крамарь, С. А. Зайцев

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: zaytsevsa@pnu.edu.ru

Обсуждается двухчастичная проблема рассеяния заряженных частиц в параболических координатах. В частности, волновая функция континуума ищется в виде разложения по так называемым параболическим квазиштурмовским (КШ) функциям. В работе приводится аналитическое выражение для амплитуды рассеяния. Эффективность метода демонстрируется на примере расчета фазы s-волнового рассеяния на комбинации кулоновского потенциала и потенциала Юкавы.

Введение. Описание динамики процессов в атомах в присутствии линейно поляризованного электромагнитного поля зачастую приобретает простоту и компактность при использовании параболических координат, выбор которых учитывает осевую симметрию системы [1]. С другой стороны, для избранной формулировки проблемы требуется получить выражения основных квантовомеханических операторов и характеристик рассеяния. В данной работе приводится выражение для амплитуды рассеяния в системе заряженных частиц с дополнительным короткодействующим потенциалом.

Исходное уравнение Шредингера преобразуется в неоднородное уравнение, решение которого удовлетворяет граничным условиям на бесконечности в виде расходящейся сферической волны. Для нахождения решения используется разложение по базису так называемых параболических КШ функций [1].

Эффективность такого подхода иллюстрируется на примере рассеяния заряженных частиц с учетом короткодействующего потенциала Юкавы. В работе используются атомные единицы $e = m_e = \hbar = 1.$

Постановка задачи

Уравнение Шредингера

$$\left(\hat{H}_C + \hat{V} - E\right)\psi^{(+)}\left(\vec{r}\right) = 0, \tag{1}$$

где кулоновский гамильтониан

$$\hat{H}_C = -\frac{1}{2\mu}\Delta + \frac{Z}{r}, \tag{2}$$

$\hat{V}$ – короткодействующий потенциал системы, который полагается сферически симметричным, т. е. $\hat{V}(\vec{r}) = \hat{V}(r)$. Таким образом, в системе имеется выделенное направление вдоль волнового вектора $\vec{k}$, $E = k^2/2\mu$, которое мы выберем в качестве оси z и будем рассматривать задачу в параболических координатах (ξ, η, φ), задаваемых следующим образом: $x = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi$, $y = \sqrt{\xi\eta}\sin\varphi$ и $z = (\xi - \eta)/2$ [2].

Цилиндрическая симметрия системы предполагает отсутствие зависимости волновой функции $\psi^{(+)}$ от угла φ. Таким образом, уравнение (1) преобразуется к виду

$$\left(\frac{4}{(\xi+\eta)}\hat{h} + \hat{V}\right)\psi^{(+)}(\xi,\eta) = 0, \tag{3}$$

где $\hat{h}$ – оператор, задаваемый выражением

$$\hat{h} = \frac{1}{2\mu}\left[-\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + k\beta - \frac{(\xi+\eta)}{4}k^2\right], \tag{4}$$

$\beta = \dfrac{\mu Z}{k}$ – параметр Зоммерфельда.

Будем искать решение уравнения (4) в виде суммы кулоновской волны $\psi_C^{(+)}$ [2]

$$\psi_C^{(+)}(\xi,\eta) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{1}{2}\pi\beta}\,\Gamma(1+i\beta)e^{i\frac{k}{2}(\xi+\eta)}\,{}_1F_1(-i\beta, 1; ik\eta), \tag{5}$$

где ${}_1F_1$ – вырожденная гипергеометрическая функция [3], и рассеянной волны ψ_{sc}, т.е. положим:

$$\psi^{(+)} = \psi_C^{(+)} + \psi_{sc}. \tag{6}$$

В результате уравнение Шредингера (1) преобразуется в неоднородное уравнение

$$\left(\frac{4}{(\xi+\eta)}\hat{h} + \hat{V}\right)\psi_{sc}(\xi,\eta) = -\hat{V}\psi_C^{(+)}(\xi,\eta). \tag{7}$$

Заметим, что представляя волновую функцию в виде (6), мы тем самым задаем граничные условия, которым удовлетворяет решение уравнения (7). А именно, функция ψ_{sc} в асимптотической области $r \to \infty$ ведет себя как расходящаяся сферическая волна.

Параболические квазиштурмовские функции

Было бы естественно использовать для нахождения решения (7) базисные функции с аналогичным асимптотическим поведением. Для построения базисных функций мы используем соответствующую кулоновскую функцию Грина [1]:

$$G^{(+)}(k;\vec{r},\vec{r}') = \frac{1}{2\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')}G^{|m|(+)}(k;\xi,\eta;\xi',\eta'). \tag{8}$$

Напомним, что в нашей задаче можно ограничиться единственным слагаемым $G^{0(+)}$ в разложении (8), удовлетворяющим уравнению

$$\hat{h}G^{0(+)}(k;\xi,\eta;\xi',\eta') = \delta(\xi-\xi')\,\delta(\eta-\eta'), \tag{9}$$

для которого имеется интегральное представление [1]

$$\begin{aligned} G^{0(+)}(k;\xi,\eta;\xi',\eta') = -i\mu k\int_0^{\infty} ds\sinh(s)\left(\coth\left(\frac{s}{2}\right)\right)^{-2i\beta} e^{i\frac{k}{2}(\xi+\xi'+\eta+\eta')\cosh(s)} \\ \times I_0\left(-ik\sqrt{\xi\xi'}\sinh(s)\right)I_0\left(-ik\sqrt{\eta\eta'}\sinh(s)\right), \end{aligned} \tag{10}$$

где I_ν – модифицированная функция Бесселя [3].

Мы предлагаем строить искомые базисные функции, используя набор квадратично интегрируемых так называемых лагерровских функций [4]

$$\left|n_1, n_2\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\phi_{n_1}(\xi)\phi_{n_2}(\eta), \tag{11}$$

где

$$\phi_n(s) = \sqrt{2b}\, e^{-bs} L_n(2bs). \tag{12}$$

Здесь: L_n – полиномы Лагерра; b – масштабный параметр. Определим так называемые параболические квазиштурмовские (КШ) функции следующим образом

$$Q^{(+)}_{n_1 n_2}(k;\xi,\eta) = \hat{G}^{(+)}\rho\left|n_1, n_2\right\rangle, \tag{13}$$

$$\rho(\xi,\eta) = \frac{4}{\xi+\eta}. \tag{14}$$

Используя (10), можно получить интегральное представление КШ функций [1]

$$\begin{aligned} Q^{(+)}_{n_1,n_2}(k;\xi,\eta) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\mu(1+\varsigma)e^{-b(\xi+\eta)}\int_0^1 ds\,(1-s)^{i\beta}(1-\varsigma s)^{-i\beta}(1-s-\varsigma s)^{n_1+n_2} \\ &\times \exp\left[2b(\xi+\eta)\frac{\varsigma s}{(1+\varsigma)}\right] L_{n_1}\left(2b\xi\frac{(1-s)(1-\varsigma s)}{(1-s-\varsigma s)}\right) L_{n_2}\left(2b\mu\frac{(1-s)(1-\varsigma s)}{(1-s-\varsigma s)}\right), \end{aligned} \tag{15}$$

где

$$\varsigma = \frac{b+i\dfrac{k}{2}}{b-i\dfrac{k}{2}}. \tag{16}$$

Из (14) можно получить главный член асимптотики при $r\to\infty$:

$$Q^{(+)}_{n_1 n_2}(k;\xi,\eta) \to A^{(+)}_{n_1,n_2}(\theta)\frac{\exp\{i[kr-\beta\ln(2kr)]\}}{r}, \tag{17}$$

где амплитуда $A^{(+)}_{n_1,n_2}$ задается выражением

$$\begin{aligned} A^{(+)}_{n_1,n_2}(\theta) &= \frac{i}{\sqrt{2\pi}}\frac{\mu}{k}\varsigma^{-i\beta}(\varsigma^{-1}-\varsigma)(-\varsigma)^{n_1+n_2}\sum_{\nu_1=0}^{n_1}\sum_{\nu_2=0}^{n_2} c^{(n_1)}_{\nu_1} c^{(n_2)}_{\nu_2}\Gamma(i\beta+\nu_1+\nu_2+1) \\ &\times (1-\varsigma^{-2})^{\nu_1+\nu_2}\left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)^{2\nu_1}\left(\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)^{2\nu_2}. \end{aligned} \tag{18}$$

Здесь

$$c^{(n)}_\nu = (-1)^\nu \frac{n!}{(n-\nu)!(\nu!)^2} \tag{19}$$

коэффициенты при s^ν в полиноме Лагерра $L_n(s)$.

Решение уравнения

Будем искать решение уравнения (7) в виде разложения

$$\psi_{sc}(\xi,\eta) = \sum_{n_1,n_2=0}^{N-1} C_{n_1,n_2} Q^{(+)}_{n_1,n_2}(k;\xi,\eta). \tag{20}$$

Для того, чтобы получить матричное уравнение относительно коэффициентов C_{n_1,n_2} воспользуемся матричным представлением операторов $\hat{V}$ и $\hat{G}^{(+)}$:

$$\hat{V} = \sum_{n_1,n_2=0} \sum_{n'_1,n'_2=0} \rho(\xi,\eta) \left| n_1, n_2 \right\rangle \left\langle n_1, n_2 \left| \hat{V} \right| n'_1, n'_2 \right\rangle \left\langle n'_1, n'_2 \right| \rho(\xi',\eta'), \tag{21}$$

$$\hat{G}^{(+)} = \sum_{n_1,n_2=0} \sum_{n'_1,n'_2=0} \left| n_1, n_2 \right\rangle \left\langle n_1, n_2 \left| \rho(\xi,\eta) \hat{G}^{(+)} \rho(\xi',\eta') \right| n'_1, n'_2 \right\rangle \left\langle n'_1, n'_2 \right|. \tag{22}$$

Подставляя (19) и (20) в (7), а также используя (21) в определении (13), получим уравнение

$$\left(\bar{I} + \bar{V}\,\bar{G}\right)\bar{C} = -\bar{V}\,\bar{S}\,. \tag{23}$$

В разложениях (19), (20) и (21) мы ограничивали верхние пределы суммирования некоторым фиксированным значением $(N-1)$. В результате (22) содержит единичную матрицу $\bar{I}$, а также матрицы потенциала $\bar{V}$ (20) и функции Грина $\bar{G}$ (21) размерами $\left[(N\times N)\times(N\times N)\right]$. Соответственно, в левой части уравнения присутствует вектор $\bar{C}$ длины $(N\times N)$ искомых коэффициентов, в правой части фигурирует вектор $\bar{S}$ с элементами

$$S^{(+)}_{n_1,n_2} \equiv \left\langle n_1, n_2 \left| \rho \psi^{(+)}_C \right\rangle = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{1}{2}\pi\beta} \varsigma^{-i\beta} \Gamma(1+i\beta) \frac{\left(1+\frac{1}{\varsigma}\right)(1+\varsigma)}{2b} \right. \tag{24}$$
$$\times (-\varsigma)^{n_1-n_2}\, {}_2F_1\left(-n_2, -i\beta; 1; 1-\varsigma^2\right),$$

где ${}_2F_1$ – гипергеометрическая функция Гаусса [3].

Заметим, что для элементов матрицы функции Грина $\bar{G}$ также имеется аналитическое выражение (см., например, [1]). В свою очередь, для получения элементов матрицы $\bar{V}$ необходимо вычислить двойные интегралы:

$$V_{n_1,n_2;\,n'_1,n'_2} = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{(\xi+\eta)}{4} d\xi\, d\eta\, \phi_{n_1}(\xi) \phi_{n_2}(\eta) V(r) \phi_{n'_1}(\xi) \phi_{n'_2}(\eta). \tag{25}$$

Пример

В качестве иллюстрации работы метода мы рассмотрели s-волновое рассеяние в системе с $Z=1$, $\mu=1$ и импульсом $k=1$. Влияние среды имитируется короткодействующим потенциалом типа Юкавы:

$$V = \frac{e^{-1.3r}}{r}. \tag{26}$$

Значение масштабного параметра базиса (12) было выбрано из соображений наиболее адекватного описания потенциала (26) и положено равным $b=1.3$.

Напомним, что присутствие короткодействующего потенциала приводит к добавочной (по сравнению с чисто кулоновским рассеянием) амплитуде [5]

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_\ell (2\ell+1) e^{2i\sigma_\ell} \left(e^{2i\delta_\ell} - 1\right) P_\ell(\cos(\theta)). \tag{27}$$

Таким образом, из разложения (20) с учетом асимптотического поведения (17) и нормировки кулоновского решения (5) следует выражения для амплитуды (27):

$$f^N(\theta) = (2\pi)^{3/2} \sum_{n_1,n_2=0}^{N-1} C_{n_1,n_2} A^{(+)}_{n_1,n_2}(\theta). \tag{28}$$

В свою очередь значение, в частности, фазы s-волнового рассеяния δ^N определяется из выражения

$$e^{2i\delta^N} = 1 + ik \frac{\Gamma(1-i\beta)}{\Gamma(1+i\beta)} (2\pi)^{3/2} \sum_{n_1,n_2=0}^{N-1} C_{n_1,n_2} \int_0^\pi A^{(+)}_{n_1,n_2} \sin(\theta) d\theta. \tag{29}$$

Поведение фазы δ^N, полученной с использованием различного числа ($N\times N$) базисных КШ функций (13), представлено на рис. 1.

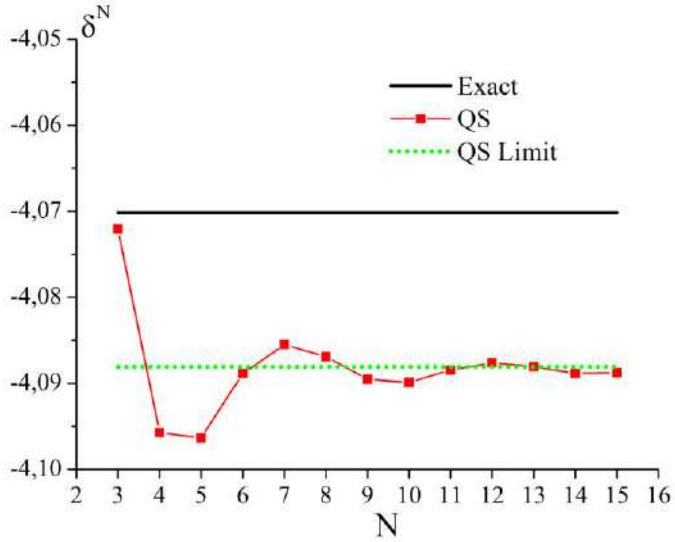


Рис. 1. Сходимость фазы рассеяния δ^N с остом модельного пространства базисных функций (13). Сплошная линия – точный результат; ломаная линия – наши расчеты; пунктирная линия – предельное значение рассчитанной фазы

Как следует из результатов расчетов, значения фаза рассеяния довольно быстро сходятся с ростом N к истинному значению. Отклонение от точной величины можно отнести на счет погрешностей, возникающих в результате аппроксимации двойного интеграла (25) квадратурной суммой Гаусса-Лагерра, используемой в наших вычислениях.

Заключение. В данной работе предлагается метод решения задачи потенциального рассеяния в представлении параболических квазиштурмовских функций. Дано определение базисных функций, приведены аналитические выражения для главного члена их асимптотики, на основании которых получена формула для амплитуды рассеяния. Эффективность подхода иллюстрируется на примере вычисления наиболее чувствительной к погрешностям метода характеристики – фазы рассеяния. Показано, что в рамках предложенного метод удается достичь высокой скорости сходимости результатов с ростом размеров базисного пространства с удовлетворительной точностью.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Zaytsev A. S., Zaytsev S. A., Ancarani L. U., Kouzakov K. A. Phys. Rev. A.V. 97. 2018. PP. 043417-1–043417-11.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит. 1989. 768 с.
3. Справочник по специальным функциям. Под редакцией Абрамовица М. и Стиган И. М.: Наука. 1979. 832 с.
4. P. C. Ojha. J. Math. Phys. V. 28. 1987. PP. 392-396.
5. Тейлор Д. Ж. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М.: Мир. 1975. 565 с.

ИЗУЧЕНИЕ МНОГОСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫМИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

В. Ю. Капитан[1,2], А. В. Пержу[1], Ф. А. Садаев[1], Е. В. Васильев[1], К. В. Нефедев[1,2]

[1]ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет»
[2]ФГБУН «Институт прикладной математики» ДВО РАН
г. Владивосток, e-mail: kapitan.vyu@dvfu.ru

В физике конденсированных сред усиливается влияние компьютерного моделирования, что позволяет использовать новые методы для изучения сложных наносистем и способствует открытию новых явлений и материалов. В настоящей работе представлены результаты моделирования многослойных магнитных пленок, которые представляют собой комбинацию ультратонких магнитных и немагнитных слоев. Компьютерное моделирование таких структур в рамках модели Гейзенберга было выполнено методами Монте-Карло.

Введение. Многослойные структуры представляют собой структуры чередующихся магнитных и немагнитных слоев. Были проведены теоретические исследования свойств многослойных структур в зависимости от толщины магнитного и немагнитного слоев, их количества и концентрации. Необходимость изучения магнитных многослойных структур объясняется перспективами их практического применения в качестве технологической базы для создания новой среды хранения.

Уровень развития вычислительной техники и суперкомпьютерных технологий в настоящее время позволяет использовать новые классы алгоритмов для решения сложных задач численного моделирования и оперирования сверхбольшими объемами данных. Поэтому на сегодняшний день поиск новых и развитие существующих методов исследования магнитных явлений является актуальной задачей.

Подходы к моделированию многослойных структур. Модель Гейзенберга. Моделирование выполнялось в рамках 3D модели Гейзенберга. Программное обеспечение было разработано на новом перспективном языке программирования Rust и обладает большой гибкостью в настройке различных параметров моделируемых структур и типов взаимодействий между элементами системы. В рамках нашей модели многослойной структуры, магнитный слой мультислойной структуры имеет размеры N×N×L и представляет собой, систему спинов Гейзенберга помещённых в узлы простой кубической решетки, в которой спин имеет до 6 ближайших соседей в своей пленке, а также взаимодействует посредством дальнодействующего прямого обмена со всеми спинами, входящими в соседние магнитные плёнки. Немагнитные слои уменьшают энергию парных взаимодействий между спинами разных плёнок, в зависимости от их толщины. В разработанном нами программном обеспечении это достигается за счёт уменьшения значения межпленочного обменного интеграла J_{12}. Внутри плёнок ферромагнитное взаимодействие, а между плёнками антиферромагнитное.

$$H = -J_1 \sum_{<i,j>} S_i S_j - J_{12} \sum_{<i,k>} S_i S_k - A \sum_i S_i - h \sum_i S_i , \quad (1)$$

спин $S_i = \{S_i^x, S_i^y, S_i^z\}$ вводится как трехмерный единичный вектор в соответствии с формулами (2 - 4).

$$S_i^x = \sin(\theta)\cos(\varphi), \quad (2)$$

$$S_i^y = \sin(\theta)\sin(\varphi), \quad (3)$$

$$S_i^z = \cos(\theta), \quad (4)$$

Созданное программное обеспечение для моделирования многослойных структур, было верифицировано на анизотропной модели Гейзенберга для системы спинов 10×10×10, в сравнении с известными результатами для данной модели [1], было получено совпадение значения

© Капитан В. Ю., Пержу А. В., Садаев Ф. А., Васильев Е. В., Нефедев К. В., 2018

критической температуры Tc=1.443(3).

Результаты моделирования многослойных пленок. С помощью алгоритма Метрополиса для Монте Карло моделирования были изучены системы спинов в рамках модели Гейзенберга помещенные в узлы простой кубической решетки и изучены их термодинамические характеристики, на примере системы размера $10 \times 10 \times 10$ частиц [2], см. рис. 1.

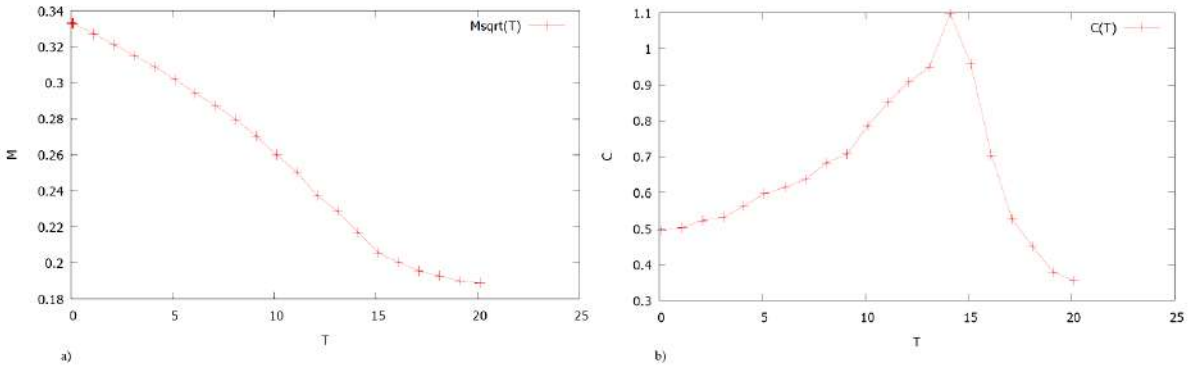


Рис. 1. Температурная зависимость: а) намагниченности системы; б) теплоемкости системы

Кроме того, было разработано приложение, которое позволяет визуализировать численные данные и представлять их в виде, удобном и понятном для пользователя. Визуализация данных происходит в разработанном авторами веб-приложении, что позволяет просматривать результаты, на любом устройстве в сети и не требует установки на ПК, а необходим только браузер, см. рис 2.

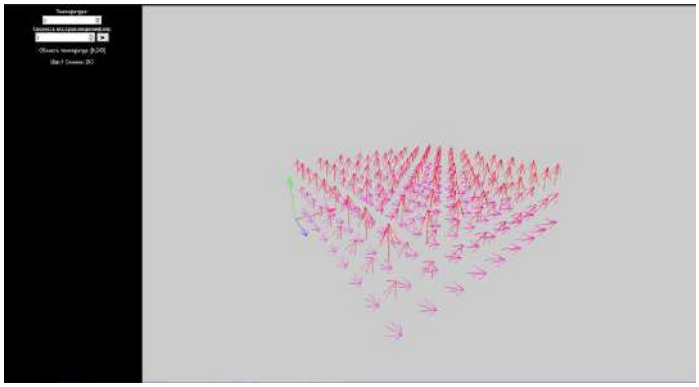


Рис. 2. Пример визуализации системы магнитных спинов Гейзенберга

Заключение. В рамках модели Гейзенберга решетчатые спиновые системы с прямым коротко- и дальнодействующими обменными взаимодействиями изучались методом Монте-Карло (алгоритм Метрополиса). Были изучены системы многослойных пленок с чередующимися магнитными и немагнитными слоями. Были исследованы термодинамические свойства таких систем. В будущем мы планируем исследовать подобные магнитные многослойные структуры с целью изучения свойств и параметров нового класса магнитных объектов - магнитных скирмионов. Скирмионы предложены в качестве элементов для создания перспективных носителей информации, работающих на новых принципах - энергонезависимой памяти и магнитной логики, благодаря своей топологической природе, наноразмерам и чрезвычайно низкому электрическому току, необходимому для движения скирмионов [3-5].

Благодарности. *Данная работа была выполнена при финансовой поддержке госзадания МОН РФ №3.7383.2017/8.9.*

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Chen K., Ferrenberg A. M., Landau D.P. Physical Review B, 48(5), 3249 (1993).
2. Kapitan V. Yu, Perzhu A. V., Nefedev K. V. //Journal of Nano-& Electronic Physics, Vol. 9 № 5, 05015(4pp), 2017
3. Rossler U. K., Bogdanov N., Pfleiderer C. // Nature. 2006. 442, pp. 797-801
4. Fert A., Cros V. & J. Sampaio// Nat. Nanotechnol. 2013. 8, pp. 152-156
5. Wiesendanger R. //Nature Reviews Materials. 2016. Vol. 1. p. 16044

ПРОЕКТИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГЕНЕРАТОРА

А. И. Колпаков, В. П. Зыков

ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет»
г. Курск, e-mail: artem.kolpakov.96@mail.ru

В статье показана возможность спроектировать и смоделировать термоэлектрический генератор, который основывается на диапазоне температур, производимых в промышленности, с целью создания оптимальной мощности термоэлектрогенератора.

Производственная или технологическая отрасль потребляют огромное количество энергии, и около половины ее, в конечном счете, выделяется в окружающую среду в виде отработанного тепла (дым из дымовой трубы и т.д.). Возникает острая необходимость в преобразовании данного отработанного тепла в полезную энергию, например в электрическую для питания небольших приборов или даже на освещение. Существует много технологий, которые преобразуют тепло в электрическую энергию; они отличаются друг от друга по отношению к интенсивности отработанного тепла, например некоторые из таких технологий не подходят для использования их в условиях низкой температуры, другие требуют перемещения частиц для превращения отработанного тепла в электрическую энергию, а другие не являются экологически чистыми. В данной статье рассматривается технология, основанная на термоэлектрическом эффекте. Эта технология является интересной, для прямого преобразования тепла в электрическую энергию. Использование термоэлектрических генераторов предоставляет ряд преимуществ, таких как энергоснабжение и уменьшение выбросов отработанного тепла [1]; можно использовать в условиях низкой температуры, а также они работают на возобновляемых источниках энергии и не создают шума.

Потребление энергии является важным параметром, отражающим влияние определенного сектора на экономический рост и загрязнение окружающей среды в регионе. Существующие отчеты различных агентств по энергетической статистике показывают, что как промышленная деятельность, так и энергетический сектор (электростанции, нефтеперерабатывающие заводы, коксовые печи и т. д.) являются наиболее энергоемкими секторами по всему миру. Следовательно, эти сектора ответственны за выпуск большого количества промышленных отходов тепла в окружающую среду с помощью выхлопных газов, охлаждающих сред и тепла, теряемого с поверхностей горячего оборудования и продуктов с подогревом.

Восстановление и повторное использование промышленных отходов тепла обеспечит возрастание интереса для низкоуглеродных и менее дорогостоящих энергетических ресурсов. Более того, снижение воздействия промышленных отходов тепла на окружающую среду и затрат может в то же время повысить конкурентоспособность сектора [2]. Более того, мировой спрос на энергию возрастет почти на 35% к 2030 году по сравнению с уровнем 2005 года или до 95% без использования энергоэффективных технологий. Большие усилия были направлены на повышение эффективности преобразования энергии, но значительная часть энергии по-прежнему теряется в виде газа, жидкости и твердого тела, что требует большого объема утилизации отходов [3]. Термоэлектричество, которое непосредственно генерирует электрическую энергию из источников отработанного тепла, показывает многообещающие результаты, вносит жизненно важный вклад

© Колпаков А. И., Зыков В. П., 2018

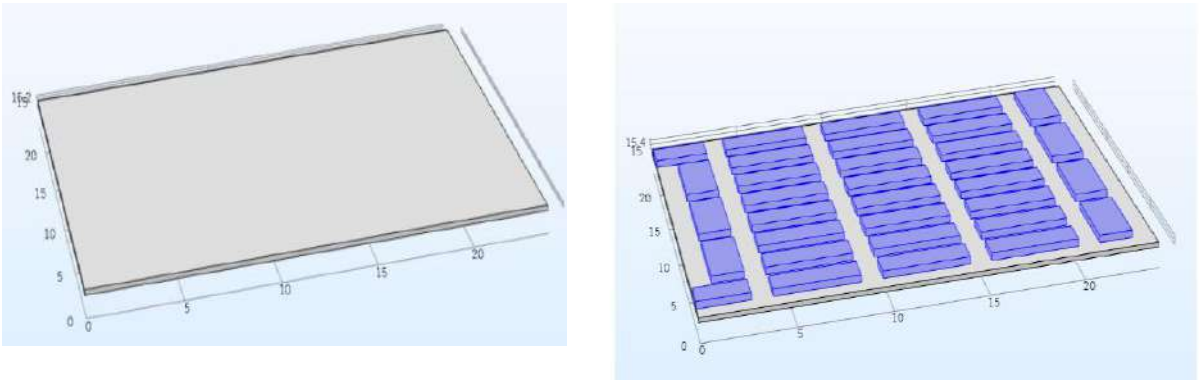
в сокращение выбросов парниковых газов и обеспечивает более чистые формы энергии [4]. Термоэлектрический генератор можно использовать для преобразования тепла в электричество через эффект Зеебека, как показано на рис. 1.

Рис. 1. Термоэлектрическая генерация электроэнергии предлагает способ возврата огромной части энергии потерянной во время промышленной деятельности

Для проектирования и моделирования термоэлектрического генератора использована система аппаратного проектирования COMSOL Multiphysics. COMSOL Multiphysics – программная платформа широкой направленности, в основе которой лежат развитые численные методы моделирования и симуляции задач физического характера. Использование COMSOL Multiphysics позволяет рассчитать многие физические явления. Наличие более чем 30 загружаемых надстроек, содержащих инструменты для расчета химии, физики жидкостей, электродинамики и химии позволяет ещё больше расширить возможности программы. Загружаемые продукты подключаются к вашему COMSOL Multiphysics с помощью программ CAD и ECAD [5]. Проблемы, решаемые нами в реальной жизни, всегда базируются на мультифизических явлениях. Поэтому необходимо одновременное решение задачи с точки зрения двух или более разделов физики. Данная программа обладает удобным интерфейсом и включает в себя широкий набор инструментов для быстрого и эффективного анализа.

Для того что бы начать проектирование термоэлектрического генератора необходимо выбрать модуль Thermoelectric effect, который используется для моделирования эффектов Зеебека, Пельтье и Томсона. Типичные задачи решаемы с помощью данного модуля – это стационарное моделирование, моделирование во временной области во всех измерениях пространства, возможность моделировать теплопередачу в твердых телах и электрическое течение. Таким образом, может быть выполнено упрощённое моделирование термоэлектрического генератора. COMSOL Multiphysics моделирует термоэлектрический генератор, особенности материала модели, механику модели, поддерживает симуляцию и специальные команды.

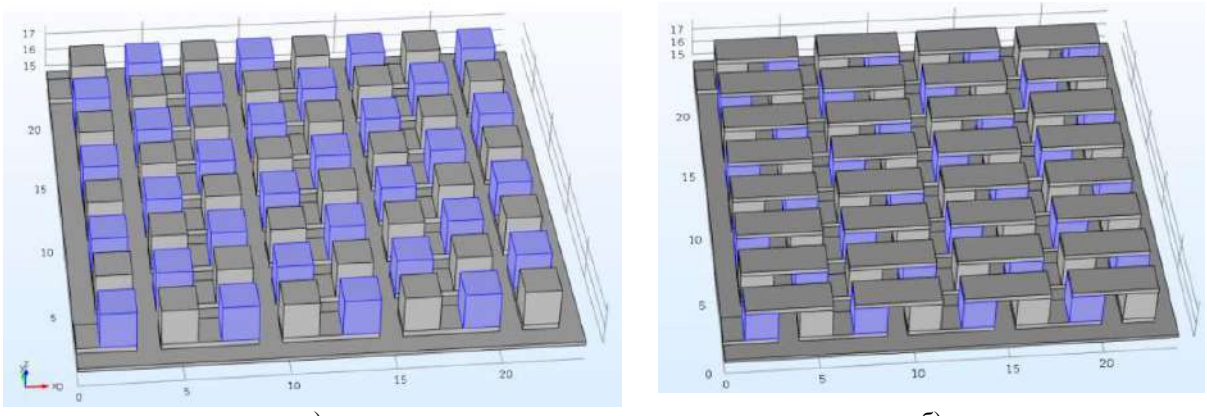
Сначала моделируется холодная сторона подложки с характерными размерами 24.5 мм×24 мм×0.2 мм (рис. 2 а), затем моделируется проводящие дорожки (рис. 2 б).



а) б)

Рис. 2. а – холодная сторона подложки,
б – подложка с проводящими дорожками (голубые) на холодной стороне

Следующим шагом идет моделирование p-n переходов. P-n пары на рис. 3 а) смоделированы термически параллельно и электрически упорядоченно, на рисунке 3 б) показаны термоэлектрические мостики (P-N), которые следует сделать из материала с высоким коэффициентом Зеебека, высокой электропроводностью и низкой теплопроводностью в качестве такое материала использовалась медь.



а) б)

Рис. 3. а – построение p-n пар, б – создание медных горячих пластинок на горячей стороне

На последнем шаге создается радиатор с целью сохранения у более холодной стороны более низкой температуры. Пластины предназначены для увеличения скорости теплопередачи. После успешного создания модели следует задать устойчивость к нагрузкам, температуру горячей и холодной стороны (коэффициент эффективной теплопередачи радиатора), учесть присутствие воздуха между пластин. Устойчивость к нагрузкам определяется геометрией модели и тем, какой материал выбран пользователем. В результате получается трехмерная модель термоэлектрического генератора (рис. 4).

Показано, что тепловые выбросы фабрик бесполезны и приводят к глобальному потеплению. Существует множество методов снизить нагрев окружающей среды заводами, одним из которых является использование термоэлектрического генератора. Помимо борьбы с глобальным потеплением, его можно использовать в качестве возобновляемого источника энергии. Был смоделирован термоэлектрический генератор, теплообменники на обеих сторонах, радиатор, устройство которого адаптировано для применения в реальных системах и учитывает специфику выбросов тепла фабриками, учитывает температурный диапазон работы. Выполнять симуляции в Comsol Multyphysics удобно, поскольку на создание прототипа не расходуется материал, а любые параметры могут быть изменены по желанию пользователя.

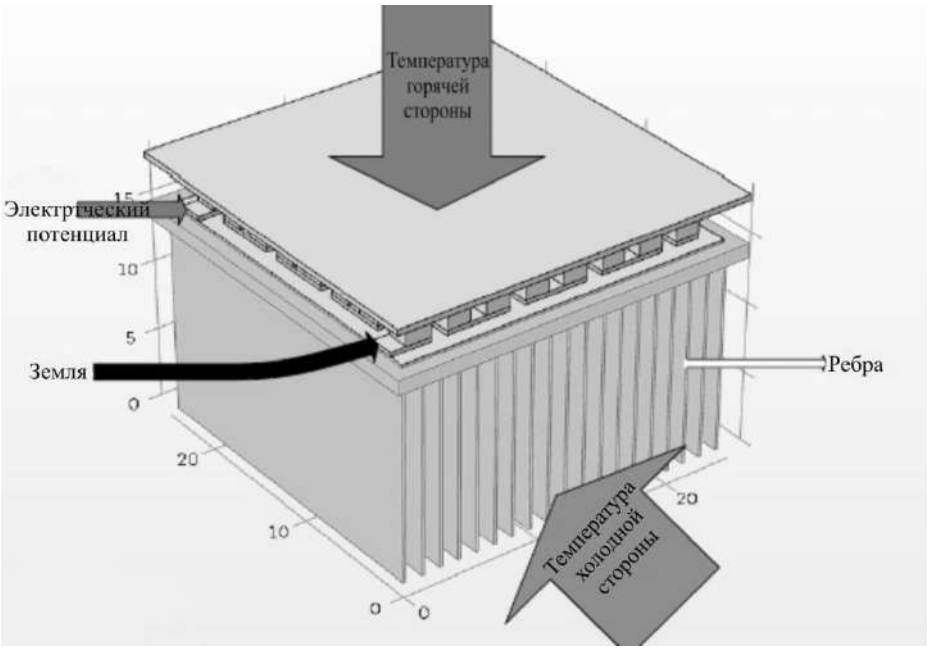


Рис. 4. Полностью смоделированная в COMSOL система с указанием ключевых параметров

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Jiin-Yuh Jang, Ying-Chi Tsai/ Optimization of thermoelectric generator module spacing and spreader thickness used in a waste heat recovery system // Elsevier. 2012. №. 51. P. 677-689.
2. Laia Miró, Jaume Gasia, Luisa F. Cabeza/ Thermal energy storage (TES) for industrial waste heat (IWH) recovery: A review // Elsevier. 2016. p. 285.
3. Tongcai Wang, Weiling Luan, Wei Wang, Shan-Tung Tu/ Waste heat recovery through plate heat exchanger based thermoelectric generator system // Elsevier. 2014. p. 860.
4. Fitriani, R.Ovik, B.D.Long, M.C.Barma, M.Riaz, M.F.M.Sabri, S.M.Said/ A review on nanostructures of high-temperature thermoelectric materials for waste heat recovery // Elsevier. 2016. p. 636.
5. COMSOL Inc, "COMSOL," [Online]. Available: https://www.comsol.com/comsol-multiphysics. [Accessed 08 March 2017].

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ ПАРАМЕТРОВ МАЛЫХ КЛАСТЕРОВ МЕТАЛЛОВ МЕДИ И НИКЕЛЯ

А. П. Кузьменко, Лин Ко Ко , Н. А. Хохлов

ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет»
г. Курск, e-mail: nikolakhokhlov@yandex.ru

Рассчитаны энергетические характеристики и геометрии малых кластеров металлов Cu_n и Ni_n (n=2-8) в рамках теории функционала плотности, методом решения системы самосогласованных уравнений Кона–Шэна, Для расчета использовался пакет ABINIT. Рассчитанные величины энергий связи хорошо согласуются с экспериментальными данными. Обсуждается использование результатов расчета для объяснения кластерных эффектов, возникающих при магнетронном напылении пленок никеля и меди.

Теоретическое исследование малых металлических кластеров из одинаковых атомов (Me_n) представляет значительный интерес в связи с возможностью их использования в качестве катализаторов в различных химических процессах [1,2]. Уточнение деталей перехода для раз-

© Кузьменко А. П., Лин Ко Ко, Хохлов Н. А., 2018

личных металлов из молекулярной фазы в твердую фазу посредством кластеризации, также, очевидно, является важной задачей теоретической физики. Экспериментальные трудности при описании малых металлических кластеров, стимулируют потребность в теоретических расчетах, которые могли бы предсказать свойства определенного кластера. Следует отметить, что практически все однородно ядерные двухатомные кластеры (молекулы) металлов (Me_2) хорошо изучены экспериментально [3,4]. В то же время, для таких кластеров теоретические расчеты (например, энергий диссоциации) дают результаты, зачастую противоречащие и друг другу, и экспериментальным данным [5,6]. Расчеты свойств кластеров никеля и меди проводились ранее с использованием различных методов, в том числе в приближениях: одноэлектронных электронов [7], Хартри-Фока [8], метода молекулярной динамики с сильной связью [9], и др. [10–17]. Имеются, однако, существенные расхождения между результатами, даже предсказываемая геометрия кластеров различна. В частности, для кластеров Ni_4 и Ni_5 в [18] были получены плоские конфигурации, а в [19] – тетраэдр и трехгранная пирамида соответственно.

Далее приведем основные положения используемого нами подхода [20]. В ТФП используется приближение в котором ядра системы, считаются неподвижными и решается уравнение Шредингера для системы N электронов (приближение Борна– Оппенгеймера):

$$\hat{H}\Psi(r_1,..r_N) \equiv \left[\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{p_i^2}{2m_e}+V(r_i,\mu_i)\right)+\sum_{i>j}V\left(r_i,\mu_i;r_j,\mu_j\right)\right]\Psi(r_1,..r_N)=E\Psi(r_1,..r_N), \quad (1)$$

где оператор Гамильтона действующий на многоэлектронную волновую функцию $\Psi\left(r_1,..r_N\right)$ записан в виде суммы одноэлектронных операторов кинетической и потенциальной энергий, а также электрон-электронного взаимодействия: $\frac{p_i^2}{2m_e}$, $V(r_i,\mu_i)$ и $V\left(r_i,\mu_i;r_j,\mu_j\right)$, соответственно. r_i – радиус-вектор i-го электрона, μ_i – проекция спина. В отсутствии магнитного поля, основное состояние многоэлектронной системы может быть однозначно описано электронной плотностью:

$$n(r) \equiv N\int \Psi^*(r,r_2,..r_N)\Psi(r,r_2,..r_N)d^3r_2...d^3r_N. \quad (2)$$

которая однозначно соответствует системы электронов волновой функции в приближении Хартри–Фока. Очевидно, что и все наблюдаемые величины для многоэлектронного состояния взаимно однозначно соответствуют электронной плотности (2), т. е. являются ее функционалами.

В подходе Кона–Шэма ТФП выражение для полной энергии многоэлектронной системы для функционала энергии основного состояния записывается в виде [20]:

$$E_{KS}=T_S[n]+\int drV_{ext}(r)n(r)+E_H[n]+E_N+E_{XC}[n]. \quad (3)$$

где $V_{ext}(r)$ — внешний потенциал внешними полями (в том числе ядрами). Этот потенциал не зависит от спинов электронов. E_N – энергия кулоновского взаимодействия ядер (зависит от их взаимного расположения, предполагается классической величиной). В результате такой группировки, сумма слагаемых $V_{ext}(r), E_N$, E_H формирует нейтральную группу. Кинетическая энергия невзаимодействующих частиц $T_S[n]$ определяется как функционал орбитальных собственных функций. Этот функционал является функционалом плотности $n(r,\sigma)$, для каждого значения проекции спина σ. В результате перегруппирования слагаемых энергии (3), корреляционные и обменные эффекты описываются обменно-корреляционной энергией $E_{XC}[n]$. Из выражений различных слагаемых полной энергии (Хоэнберга–Кона и Кона–Шэма [20]) следует:

$$E_{XC}=\langle T\rangle-T_S[n]+\langle V_{\text{int}}\rangle+E_H[n]-E_H[n]. \quad (4)$$

В этом выражении [n] обозначает функционал плотности $n(\vec{r},\sigma)$, который зависит от пространственных координат $\vec{r}$ и от спина σ. Это выражение явно показывает, что $E_{XC}[n]$

является функционалом плотности. Если такой функционал определен, то можно найти точную энергию основного состояния, а также электронную плотность (решив уравнения Кона–Шэна для независимых частиц). Уравнения Кона–Шэна записывают в виде системы уравнений Шредингера:

$$\left(H_{KS}^{\sigma}-\varepsilon_i^{\sigma}\right)\Psi_i^{\sigma}(\vec{r})=0, \tag{5}$$

где ε_i^{σ} – собственные значения энергии, H_{KS}^{σ} – эффективный потенциал Кона–Шэна:

$$H_{KS}^{\sigma}(\vec{r})=-\frac{\Delta}{2}+V_{KS}^{\sigma}(\vec{r}). \tag{6}$$

Потенциал Кона–Шэна записывают в виде:

$$V_{KS}^{\sigma}(\vec{r})=V_{ext}(\vec{r})+V_H(\vec{r})+V_{XC}^{\sigma}(\vec{r}). \tag{7}$$

Слагаемые, входящие в это выражения: внешнее поле, потенциал Хартри и обменно-корреляционный потенциал, соответственно. Система уравнений Кона–Шэма (5) является самосогласованной и может быть решена методом итераций. В результате решения восстанавливаются одноэлектронные волновые функции, энергия основного состояния системы и функционал $n(\vec{r},\sigma)$. Параметры элементарной ячейки и координаты ядер варьируются для определения глобального минимума энергии.

Расчеты были выполнены с использованием пакете ABINIT, международного общего проекта Université Catholique de Louvain, Corning Incorporated и других [21]. Код ABINIT распространяется на условиях открытого лицензионного соглашения GNU, позволяющего свободно использовать, копировать, распространять и модифицировать программы входящие в пакет. Для расчетов изолированных кластеров была задана кубическая ячейка со сторонами 11 Å и энергиями обрезания базиса плоских волн 45 Хартри. Были использованы псевдопотенциалы из [22]. Число энергетических зон, для которых вычислялись волновые функции и соответствующие собственные значения, равнялось 80 для кластера Cu_8 (псевдопотенциал с 18-ю валентными электронами) и 76 для Ni_8 (псевдопотенциал с 18-ю валентными электронами).

Геометрии рассчитанных кластеров представлены на рисунке. В табл. 1 и 2 приведены результаты расчетов энергии диссоциации кластера приходящейся на один атом (D_e) и минимальной длины связи (R_e) с результатами других авторов и экспериментальными данными [6,18–19,23]. Наши расчеты, в целом, находятся в хорошем согласии с данными экспериментов.

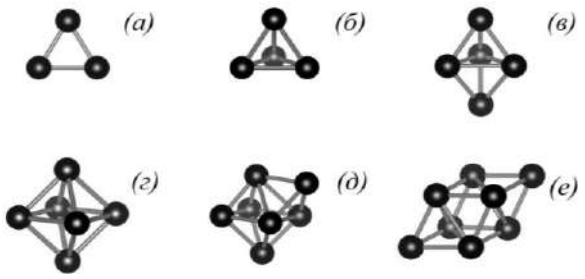


Рис. Геометрические структуры, полученные для кластеров металлов (масштабы для меди и никеля отличаются в соответствии с табл. 1 и 2).

В ходе расчёта установлено, что D_e растет по мере увеличения размера кластера n, постепенно приближаясь к энергии диссоциации для соответствующих кристаллов. При этом величина R_e при n=8 отличается от соответствующей величины для кристалла меньше чем на 10%. D_e растет медленнее, достигая 51% для никеля и 54% для меди при n=8. Оба металла обладают кубической гранецентрированной кристаллической решеткой.

Нами были рассчитаны энергетические характеристики и геометрии малых кластеров металлов Cu_n и Ni_n ($n=2$-8). Сравнение показало хорошее согласие рассчитанных параметров кластеров с экспериментальными данными. В процессе расчетов было обнаружено наличие нескольких локальных минимумов энергии для разные геометрий кластеров Me_n с $n>3$. Это может объяснить несоответствия между результатами других авторов и экспериментальными данными.

Таблица 1

Сравнение рассчитанных параметров кластеров меди Cu_n с результатами других авторов и экспериментальными данными. Энергия диссоциации для кристаллов ($Cu_{кр}$) рассчитана из величины энтальпии формирования газовой фазы при T=0 K

	Метод	Cu_2	Cu_3	Cu_4	Cu_5	Cu_6	Cu_7	Cu_8	$Cu_{кр}$
D_e(eV/n)	Наш расчет	1.06	1.21	1.33	1.56	1.71	1.81	1.83	3.48
	Расчет [5]	1.13	1.11	1.59	1.73				
	Эксп.	1.02 ±0.08	1.06 ±0.12	1.48 ±0.14	1.55 ±0.14	1.72 ±0.17	1.85 ±0.21	2.00 ±0.23	3.50
R_e (Å)	Наш расчет	2.27	2.38	2.43	2.44	2.44	2.39	2.41	2.58
	Эксп.								2.56

Таблица 2

То же, что в табл. 1 для кластеров никеля Ni_n

	Метод	Ni_2	Ni_3	Ni_4	Ni_5	Ni_6	Ni_7	Ni_8	$Ni_{кр}$
D_e(eV/n)	Наш расчет	1.02	1.35	1.55	1.79	1.93	2.10	2.21	4.31
	Расчет [18]	2.1	2.5	2.77	2.90	3.03	2.27	2.48	
	Эксп.	1.03							4.44
R_e (Å)	Наш расчет	2.16	2.26	2.36	2.36	2.37	2.38	2.38	2.52
	Расчет [18,23]	2.01	2.15	2.2	2.36	2.43	2.36	2.36	
	Эксп.	2.16							2.49

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Liu C., Yang B., Tyo E.C., et al./ Carbon Dioxide Conversion to Methanol over Size-selected Cu4 Clusters at Low Pressures // J. Am. Chem. Soc. 2015. Vol. 137(27). P. 8676-8679.
2. Reetz M.T., Breinbauer R., Wedemann P., Binger P./ Nanostructured nickel-clusters as catalysts in [3+2] cycloaddition reactions // Tetrahedron. 1998. Vol. 54. P. 1233-1240.
3. Kant A., Lin S.S./ Dissoziationsenergien von homonuklearen, zweiatomigen Molekülen der Seltenen Erden //Monatsh. Chem. 1972. Vol. 103. P. 757-777.
4. Huber K. P., Herzberg G./ Molecular Spectra and Structure, IV. Constants of Diatomic Molecules// New York. 1979. 689 PP.
5. Spasov V.A., Lee T.-H., Ervin K.M./ Threshold collision-induced dissociation of anionic copper clusters and copper cluster monocarbonyls// J. Chem. Phys. 2000. Vol. 112. P. 1713-1721.
6. Kabir M., Abhijit Mookerjee A./ Structure and stability of copper clusters: A tight-binding molecular dynamics study// Phys. Rev. A 2004. Vol. 69. P. 043203(10pp).
7. Nygren M. A., SiegbahnPEM, Wahlgren U., et al. / Theoretical Ionization Energies and Geometries for Ni_n, ($4 \le n \ge 9$) // J. Phys. Chem. 96, 1992, p. 3633.
8. Pastor G. M., Dorantes-Davila J. and Bennemann K. H. / Size and structural dependence of the magnetic properties of small 3d-transition-metal clusters // Phys. Rev. B 40, 1989, p.7642.
9. Lathiotakis N. N., Andrioties A. N., Menon M., et al. / Structure and Stability of Ni Clusters: A Tight-Binding Molecular-Dynamics Study // Europhys. Lett. 29, 1995, p.135.
10. Stave M. S. and DePristo A. E. J. / / The structure of Ni_N and Pd_N clusters: $4 \le N \le 23$ // Chem. Phys. 97, 1992, p.3386.
11. Russier V., Salahub D. R. and Mijoule C. / Theoretical determination of work functions and adsorption energies of atoms on metal surfaces from small-cluster calculations: A local-spin-density approach // Phys. Rev. B 42, 1990, p. 5046.

12. Pacchioni G., Chung S., Krueger S. and Ro¨sch N. / On the evolution of cluster to bulk properties: a theoretical LCGTO-LDF study of free and coordinated Nin clusters (n=6-147) // Chem. Phys. 184, 1994, p.125.
13. Daw M. S., Foiles S. M. and Baskes M. I. / The embedded-atom method: a review of theory and applications // Mater. Sci. Rep. 9, 1993, p. 251.
14. Grigoryan V. G. and Springborg M. / A theoretical study of the structure of Ni clusters (Ni_N)// Phys. Chem. 3, 2001, p.5135.
15. DoyeJPK and Wales D. J. / Global minima for transition metal clusters described by Sutton–Chen potentials // New J. Chem. 1998, p.733.
16. Stoltze P. / Simulation of surface defects // J. Phys.: Condens. Matter 6, 1994, p.9495.
17. Kress J. D. and DePristo A. E. / Corrected effective medium method. I. One-body formulation with applications to atomic chemisorption and diatomic molecular potentials // J. Chem. Phys. 87, 1987, p.4700.
18. Reddy B. V., Nayak S. K., Khanna S. N., et al./ Physics of Nickel Clusters. 2. Electronic Structure and Magnetic Properties // J. Phys. Chem. A 1998. Vol. 102. P. 1748-1759.
19. Luo Ch./ The structure of small nickel clusters: Ni2–Ni19// Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2000. Vol. 102. P. 1748-1759.
20. Martin R. M. / Electronic Structure. Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press, 2004, 642 pp.
21. Gonze X., Rignanese G.-M., Verstraete M., et al / A brief introduction to the ABINIT software package // Zeit. Kristallogr. 220, 2005, p. 558.
22. D. R. Hamann / Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials // Department of Physics and Astronomy, Rutgers University, Piscataway, NJ 08854-8019 and Mat-Sim Research LLC, P. O. Box 742, Murray Hill, NJ, 07974
23. Luo Ch./ Energies and structural properties of nickel clusters determined by tight-binding simulations: Ni4-Ni55 // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 10 (2002) 13-20.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА СИНГУЛЯРНОГО АНАЛИЗА ПРИ ОБРАБОТКЕ АКУСТИКО-ЭМИССИОННЫХ ДАННЫХ

М. И. Куценко, В. Н. Овчарук

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: fensaleg@mail.ru, ovaler@ya.ru

В статье рассмотрены результаты сингулярного спектрального анализа (ССА) акустико-эмиссионных (АЭ) сигналов. Анализ произведён для сигналов, полученных при механическом трении деталей металлических конструкций, растрескивании шлаковой корки, от имитатора Су-Нильсена и при процессах трещинообразования. Приведены сингулярные спектры и аддитивные составляющие АЭ выборок. Осуществлён расчёт энергетического вклада аддитивных компонент в полную энергию исследуемых сигналов. Процесс перевода анализируемого АЭ ряда в траекторную матрицу основан на применении метода «Гусеница». Сделан вывод о различии энергетических характеристик аддитивных составляющих и поведения сингулярных спектров относительно каждого класса сигналов. Исследования произведены в рамках задачи обнаружения и идентификации. На основе полученных данных сформулирована методология применения метода ССА для определения источника сигнала.

Введение. Частотные искажения являются главной проблемой, связанной с применением традиционных методов спектрального анализа, основанных на преобразовании Фурье [1, 2, 3]. Проходя через систему «объект-преобразователь» акустический сигнал претерпевает существенные изменения частотной характеристики, что вместе с шумовой составляющей электрического тракта (приёмный преобразователь, предварительный усилитель) вносит значительную погрешность [1, 4]. Поэтому, не смотря на все достоинства, вопрос об исключительности метода частотного анализа при исследовании сигналов АЭ может быть сдвинут в сторону неопределённости. Таким образом открывается интерес к методам, математическая природа которых в корне отличается от частотных преобразований. К одним из таких относится метод ССА.

© Куценко М. И., Овчарук В. Н., 2018

В общих чертах целью метода является разбиение временного ряда на аддитивные интерпретируемые составляющие. Особенностью метода является отсутствие требования к наличию каких-либо предварительных знаний о его модели. При таких предположениях метод позволяет решать различные задачи: сглаживание временного ряда, выделение полезного сигнала, удаление шумовой составляющей. Конечный результат ССА сигнала всегда представлен его разложением в некоторую сумму временных последовательностей [5], чем и является по природе зарегистрированный датчиком АЭ сигнал. Данный факт предполагает получение совершенно новых данных при исследовании сигналов АЭ, а также отсутствие прямой зависимости результатов от частотных искажений.

Теоретические основы ССА. ССА методом «Гусеница» представляет собой довольно сложное преобразование, состоящее из нескольких этапов. Первым шагом происходит разбиение одномерного ряда, описывающего сигнал, в многомерный (траекторная матрица) в соответствии с «длинной гусеницы». Затем осуществляется сингулярное разложение траекторной матрицы, результатом которого является множество собственных чисел и векторов. Их произведение образует так называемые «собственные тройки» - прообразы аддитивных компонент сигнала [6]. По значению собственного числа определяется величина вклада компоненты в исходный сигнал. Поведение собственных векторов соответствует динамике компоненты [5]. Далее осуществляется группировка собственных троек по некоторому признаку. На завершающем этапе каждая матрица сгруппированного разложения переводится в одномерный ряд, соответствующий временной форме аддитивной компоненты [6]. Таким образом конечный результат сингулярного преобразования сигнала всегда представлен его разложением в некоторую сумму временных последовательностей.

Результаты сингулярного анализа АЭ сигналов. В качестве математического обеспечения, реализующего сингулярное преобразование, были использованы программные комплексы, разработанные в среде NI LabVIEW 2013. За принцип группировки собственных троек принята одна из основных задач ССА – выделение из сигнала тренда и периодических составляющих. Предполагается, что для разных типов сигналов динамика таких компонент, а также динамика сингулярных спектров в итоге будет различаться.

Для анализа используются сигналы, полученные от следующих источников: трение деталей металлических конструкций [4, 7], растрескивание шлаковой корки, образованной при остывании сварного шва [7], источник Су-Нильсена [7, 8], процессы трещинообразования [7]. Сигналы оцифрованы с частотой 2 МГц. Поскольку записанные АЭ сигналы представлены значительным количеством отсчётов, а метод ССА требователен к вычислительным ресурсам, исследуемые выборки ограничены окном размером в 800 отсчётов. При данной частоте дискретизации это соответствует 400 μс и позволяет, как минимум, охватить область прихода сигнала. Такая длина окна определена в ходе исследований, как оптимальный параметр сингулярного разложения для получения достаточной разделимости компонент. Длина гусеницы для обеспечения оптимальности результатов, согласно теории [6], равняется половине длины окна и составляет 400 отсчётов. Для каждого типа сигнала исследовано 5 разных дискретных выборок.

На рис. 1 приведены сингулярные спектры сигналов, представленные совокупностью собственных чисел в порядке убывания. Для большей наглядности при сравнении формы кривых спектральные характеристики нормированы по максимальному значению.

Для сигнала, полученного при механическом трении (Friction) характерен резкий спад спектральных характеристик. Это объясняется малым количеством значимых сингулярных чисел. Спектры сигналов, полученных при растрескивании шлаковой корки (Slag), отличаются меньшей степенью затухания. Однако в целом динамика кривых аналогична поведению спектров для сигнала трения. Спектральные характеристики сигналов, зарегистрированных от источника Су-Нильсена (Hsu-Nielsen), характерны медленным затуханием и большим количеством значимых сингулярных чисел. Спектры сигналов, полученных при образовании трещины (Fracture formation) в целом идентичны результатам для сигналов от источника Су-Нильсена с небольшими различиями в количестве значимых собственных чисел.

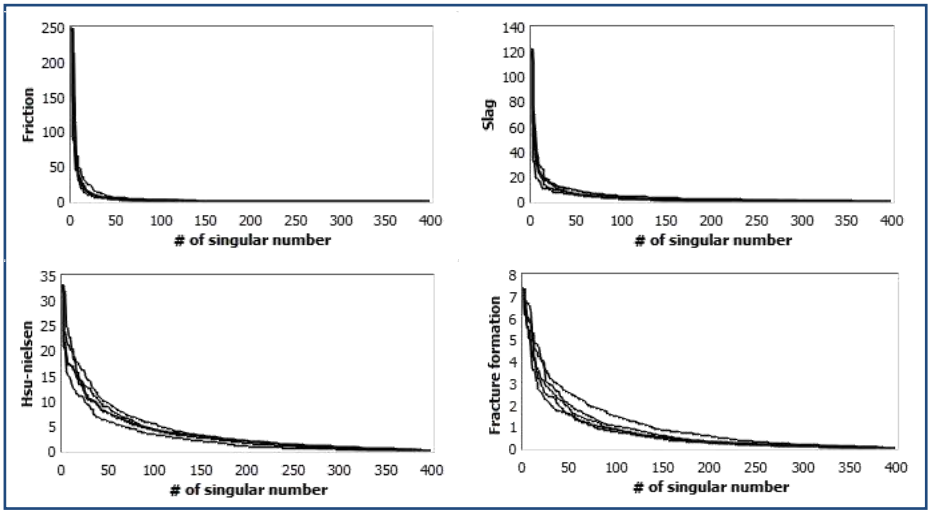


Рис. 1. Нормированные сингулярные спектры сигналов

Однако на основе сингулярного спектра невозможно однозначно идентифицировать АЭ сигналы. В качестве дополнительного исследования была произведена группировка собственных троек, затем реализовано суммирование и восстановление компонент внутри группы для получения общих трендовой, колебательной и широкополосной составляющих. В табл. 1 приведены значения относительно энергетического вклада аддитивных составляющих в процентном соотношении от всей энергии исходного сигнала. Усреднённые данные представлены курсивом. Также в таблице отражено количество значимых собственных чисел λ (диапазон собственных чисел сингулярного спектра, компоненты разложения которых суммарно заключают в себе 95 % энергии исследуемого сигнала).

Таблица 1

Энергетический вклад аддитивных составляющих

Сигнал	Количество значимых λ		*E* тренда, %		*E* колебательной составляющей, %		*E* широкополосной составляющей, %	
Трение	3	*7*	97.90	*94.84*	0.00	*0.78*	2.10	*4.38*
	9		96.10		0,00		3.90	
	10		93.80		3.90		2.30	
	8		90.90		0.00		9.10	
	7		95.50		0.00		4.50	
Шлак	64	*34*	61,70	*68.96*	19,50	*15.38*	18,80	*15.66*
	25		67,20		4,50		28,30	
	23		70,10		20,20		9,70	
	33		82,90		6,70		10,40	
	27		62,90		26,00		11,10	
Су-Нильсен	122	*113*	18,80	*25.08*	9,30	*3.64*	71,90	*71.28*
	119		33,40		0,00		66,60	
	105		28,90		0,00		71,10	
	114		15,90		8,40		75,70	
	104		28,40		0,50		71,10	
Трещина	100	*107*	0,80	*5.12*	10,50	*15.08*	88,70	*79.80*
	141		0,00		11,10		88,90	
	73		1,10		26,30		72,60	
	124		6,00		8,10		85,90	
	96		17,70		19,40		62,90	

На основе табличных данных можно сделать следующие выводы. Для сигналов трения трендовые компоненты заключают в себе более 90 % энергии исследуемого сигнала. Вклад колебательной составляющей отсутствует, вклад широкополосной пренебрежимо мал. Для сигналов, полученных при растрескивании шлаковой корки, основная энергия (> 60 %) также заключена в трендовой составляющей. Однако вклад колебательной и широкополосной составляющей в данном случае значителен и распределён в равной степени (~ 15 %). Большая часть энергии сигналов, полученных от имитатора Су-Нильсена и при возникновении трещин, сконцентрирована в широкополосной составляющей (> 70 %). Однако для сигналов от Су-Нильсена оставшаяся доля энергии заключена в тренде, а для сигналов, полученных при трещинообразовании – в колебательной составляющей.

На рис. 2 приведён пример разложения сигнала механического трения (Friction) и разрушения шлака (Slag). На верхней плоскости осциллограммы отображена временная форма сигнала. На нижней – компоненты разложения: тренд (trend), колебательная (oscillation) и широкополосная (broadband). В обоих случаях низкочастотный тренд практически полностью повторяет динамику исходных сигналов. Однако в отличие от сигнала трения значительную часть сигнала разрушения шлака описывают колебательная и широкополосная составляющие.

На рис. 3 изображён пример разложения сигнала от имитатора Су-Нильсена и сигнала, полученного при образовании трещины. В данном случае очевидно преобладание широкополосной составляющей. Однако для сигнала от источника Су-Нильсена характерно значительное влияние трендовой компоненты. Для сигнала от трещины тренд на фоне колебательной составляющей незаметен. Выводы, сделанные на основе графиков разложения, соответствуют данным энергетического вклада, приведённым в табл. 1.

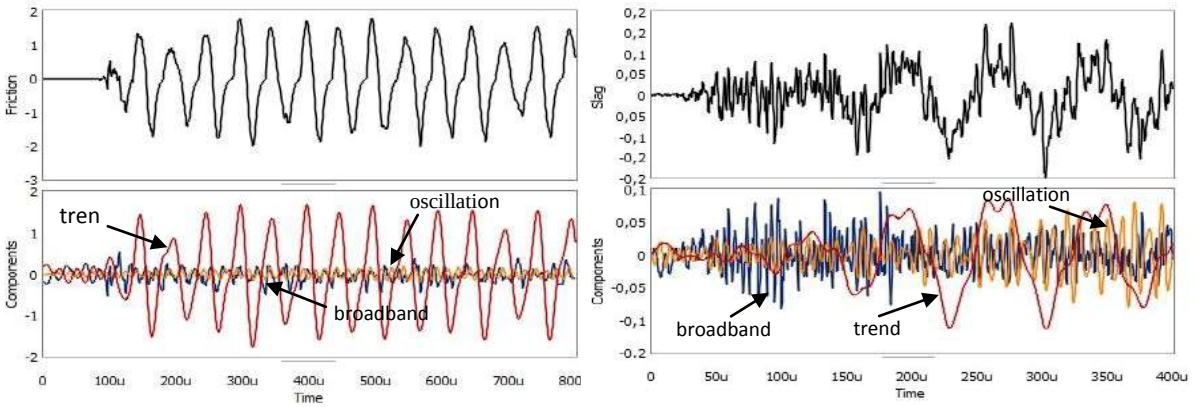


Рис. 2. Трение (слева) и разрушение шлаковой корки (справа)

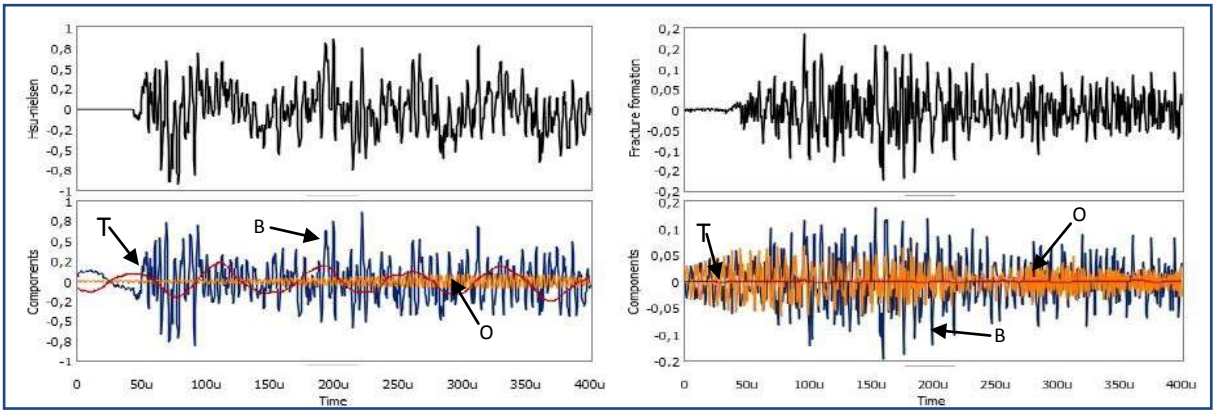


Рис. 3. Источник Су-Нильсена (слева) и разрушение металла (справа)

Заключение. В ходе исследования выявлена прямая связь между типом сигнала и степенью затухания сингулярного спектра (количеством значимых собственных чисел). Для низкочастотных сигналов механического трения и растрескивания шлаковой корки характерно преобладание трендовых составляющих и малое количество значимых собственных чисел. Для сигналов, полученных от имитатора Су-Нильсена и при образовании трещины характерно преобладание широкополосных компонент с разной степенью влияния трендов и колебательных составляющих. Степень затухания сингулярных спектров для таких сигналов значительно ниже, чем для сигналов трения и разрушения шлака. Данные различия в динамике результатов могут быть использованы при решении задачи идентификации сигналов АЭ.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Овчарук В. Н. Акустико-эмиссионные методы исследования свойств керамических материалов. Хабаровск: Изд-во ТОГУ. 2010. 201 с.
2. Давыдова Д. Г. Помехоустойчивый метод обнаружения сигнала от дефекта в системах акустико-эмиссионного контроля технологического оборудования // Дисс. на соискание учёной степени кандидата технических наук: 05.26.30, УФА. 2015. 127 с.
3. Bigus G. A., Travkin A. A. An evaluation of the flaw-detection characteristics for the detection of fatigue cracks by the acoustic-emission method in samples made of steel 20 that have a cast structure. Russian Journal of Nondestructive Testing, January 2015, Volume 51, Issue 1, pp 32-38. DOI: 10.1134/S1061830915010027.
4. Овчарук В. Н. Концепция построения акустико-эмиссионных диагностических систем. Хабаровск: Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, 2015. 253 с.
5. Данилов Д. Л., Жиглявский А. А. (ред.) Главные компоненты временных рядов: метод «Гусеница», СПб: Пресском, 1997, 308 с.
6. Голяндина Н. Э. Метод «Гусеница»-SSA: анализ временных рядов: учеб. пособие. СПб., 2003. 87 с.
7. Овчарук, В. Н. Использование метода акустической эмиссии при контроле и испытаниях промышленных объектов. Хабаровск: Изд-во ТОГУ, 2016. 232 с.
8. Yuriy Purisev. Analysis of Energy and Spectral Characteristics of Acoustic Emission Signals from the Hsu-Nielsen Source. Yuriy Purisev, V. N. Ovcharuk, Maskim Kutsenko. 2016 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON). Proceedings. Moscow: National Research University "Higher School of Economics". Russia, Moscow, May 12−14, 2016. DOI: 10.1109/ SIBCON.2016.7491695.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ $n\alpha$ В МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧЕ МЕТОДОМ АССС

А. И. Мазур, А. С. Алипченко

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: mazur@khb.ru

В рамках модельной задачи рассеяния нейтронов на α-частице рассчитаны сдвиги фаз рассеяния и волновые функции в парциальной волне $3/2^-$. Резонансные энергии и ширины, полученные методом АССС согласуются с точными значениями, рассчитанными на основе положения полюсов S-матрицы.

Резонансы представляют собой одно из самых интересных явлений в природе. Проявления резонансных процессов в природе очень разнообразны. В интересующем нас случае рассеяния квантовых частиц резонансы проявляются в виде острых пиков в полном сечении рассеяния как функции энергии сталкивающихся частиц. Четко выделенным максимумам сечений соответствуют долгоживущие, почти связанные состояния, состоящие из мишени и налетающей частицы. Если энергия налетающей частицы близка к резонансной, то квантовая система, состоящая из падающей частицы и мишени, находится в так называемом метастабильном состоянии, которое распадается спустя достаточно продолжительный промежуток времени. Другим ярким примером резонансных явлений может служить распад

© Мазур А. И., Алипченко А. С., 2018

радиоактивных ядер или нестабильных частиц.

Исследование резонансов является одним из актуальных направлений современной физики. В последнее время в ядерной физике большое внимание уделяется развитию безмодельных (ab initio) подходов к теории рассеяния, в которых единственной входной информацией является нуклон-нуклонное взаимодействие. Значительный прогресс описания трехнуклонных и четырехнуклонных систем был достигнут на основе уравнений Фаддеева и Фаддеева-Якубовского [1]. Для описания рассеяния в системах, состоящих более чем из четырёх нуклонов предложены такие методы ab initio, как метод гиперсферических гармоник, который представлен в обзоре [2], метод интегральных преобразований Лоренца [3], метод Монте-Карло с функциями Грина GFMC (Green Function's Monte Carlo, GFMC) [4], и др.

Свойства ядерных резонансов могут быть исследованы с помощью модели оболочек, учитывающей Гамовские состояния, в частности версией ab initio такой модели, не использующей понятия инертного кора (No-core Gamow Shell Model, NCGSM) [5]. Существует подход в котором детально разработанная и апробированная для расчета энергий связанных состояний модель оболочек без инертного кора (No-Core Shell Model, NCSM) [6,7] комбинируется с методом резонирующих групп (Resonant Group Method, RGM [8]). Очень перспективным является подход, объединяющий NCSM и J-матричный формализм [9-12], с помощью которого на основе чисто микроскопических расчетов в NCSM [13] с реалистическим взаимодействием JISP16 [14,15] описаны как резонансные состояния ядер ^{5}Li и ^{5}He, проявляющиеся в рассеянии нуклонов на α-частице, так и нерезонансное рассеяние этих систем.

Несмотря на все это, по-прежнему актуальным направлением является развитие простых подходов анализа резонансных состояний, позволяющих без использования больших численных ресурсов получать разумные оценки резонансных состояний. К таким подходам относится метод аналитического продолжения по константе связи взаимодействия (АССС) [16]. В представленной работе метод АССС применяется для исследования модельной задачи рассеяния нейтрона на α-частице. Численное решение уравнения Шредингера проводится с помощью метода Нумерова. Точные значения энергии и ширины резонанса, с которыми сравниваются результаты, полученные в методе АССС, определены с помощью метода, основанного на теореме Коши.

Метод аналитического продолжения по константе связи (Analytical Continuation in the Coupling Constant, АССС) основан на наблюдении, что резонансное состояние можно получить из связанного состояния, если интенсивность притягивающего взаимодействия между частицами становится меньше [16].

Рассмотрим систему двух частиц, которая не имеет связанного состояния, но в рассеянии которых наблюдается резонанс (именно такими свойствами обладает система $n\alpha$). Пусть нам известен потенциал взаимодействия $V(r)$ этих частиц. Введем в рассмотрение вспомогательный потенциал $\lambda V(r)$. При увеличения константы связи λ от исходного значения $\lambda = 1$ энергия резонанса будет уменьшаться. При некотором пороговом значении $\lambda = \lambda_0$ резонанс исчезает, вместо него появляется связанное состояние. С дальнейшим ростом λ энергия этого связанного состояния E_b по абсолютной величине будет расти.

Обозначим набор энергий связи, рассчитанных при различных значениях $\lambda > \lambda_0$ как $E_0(\lambda_i)$ $(i = 1,2, \dots, d;\ d$ – число данных). Этот набор можно аппроксимировать рядом Тейлора по степеням $(\lambda - \lambda_0)^{1/2}$, при этом первый член должен быть пропорционален первой степени $(\lambda - \lambda_0)$ [16]

$$E_0(\lambda) = a(\lambda - \lambda_0) + b(\lambda - \lambda_0)^{3/2} + c(\lambda - \lambda_0)^2 + \cdots . \quad (1)$$

Используя аналитическое продолжение (1) в область аргументов $\lambda < \lambda_0$, получим комплексные значения $E(\lambda)$. В этом и заключается метод АССС. Действительная часть $E(\lambda)$ при $\lambda = 1$ ассоциируется с энергией резонанса $E_r = \mathrm{Re}[E(\lambda = 1)]$, а мнимая – с его шириной $\Gamma = 2\mathrm{Im}[E(\lambda = 1)]$.

Рассмотрим рассеяние $n\alpha$ в рамках модельной задачи с потенциалом Вудса-Саксона [17]

$$V_{n\alpha} = \frac{V_0}{1+\exp\left[\frac{r-R_0}{\alpha_0}\right]} + \frac{(ls)}{r}\frac{d}{dr}\left[\frac{V_{ls}}{1+\exp\left[\frac{r-R_1}{\alpha_1}\right]}\right], \quad (2)$$

хорошо воспроизводящего экспериментальные данные нейтронов на α-частице (V_0 =–43 МэВ, R_0=2 фм, α_0=0.7 фм; V_{ls}=–43 МэВ, R_1=1.7 фм, α_1=0.35 фм).

Собственные значения гамильтониана с потенциалом (2) находились численным решением уравнения Шредингера для связанных состояний. При $\lambda < 1.1$ связанные состояния отсутствуют. Графически зависимость $E_b(\lambda)$ представлена на рис. 1 символами. Для построения гладких кривых использовались разные варианты разложения (1).

Результаты анализа резонанса $3/2^-$ модельной задачи в рамках метода АССС представлены в таблице 2. Помимо значений энергий и ширин в разных вариантах параметризации зависимости $E_b(\lambda)$ в таблице 1 приведены параметры метода АССС и стандартное отклонение (*rms*), достигнутое в результате подгонки параметров АССС.

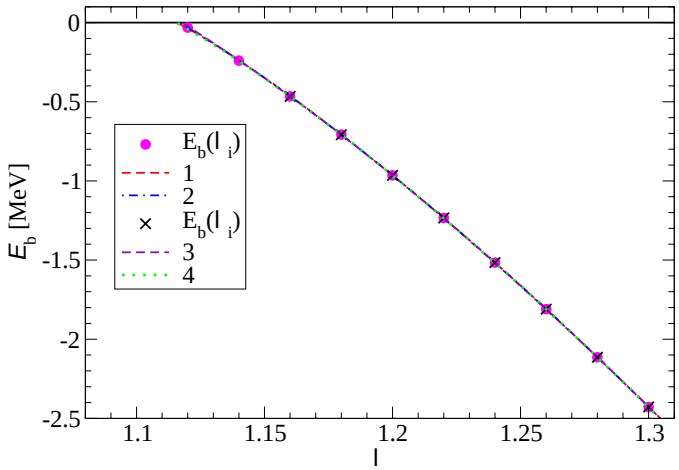


Рис. 1. Зависимость $E_b(\lambda)$ для резонанса $3/2^-$ модельной задачи. Символы – собственные энергии модельной задачи. Кривые представляют различные варианты анализа резонанса $3/2^-$ методом АССС

Вариант 1 расчета в АССС проведен для $d = 10$ входных данных и простейшей параметризацией $E_b(\lambda)$ с двумя членами: в разложении (1). В варианте 2 для тех же входных данных использовалась трехпараметрическая подгонка. В вариантах 3 и 4 отброшены два первых собственных значения с $\lambda = 1.12$ и 1.14, соответствующие слабосвязанным состояниям.

Таблица 1

Сравнение энергий и ширин резонанса $3/2^-$ модельной задачи, рассчитанных методом АССС с экспериментальными значениями [18]. Во второй колонке приведено число входных данных, в колонках с третьей по седьмую – параметры АССС

Вариант	d	λ_0	a	b	c	*rms*, МэВ	E_r, МэВ	Γ, МэВ
Эксперим.							0.837	0.781
1	10	0.1159	-7.943	-12.20	0	0.045	0.921	0.960
2	10	0.1167	-9.054	-6.602	-7.451	0.0053	0.954	0.526
3	8	0.1143	-7.383	-13.20	0	0.0006	0.840	1.021
4	8	0.1155	-8.238	-9.882	-3.699	0.0002	0.901	0.776

Из представленных расчетов следует, что для получения более точных результатов методом АССС необходимо учитывать большее число членов разложения (1). Кроме того, в процедуре подгонки параметров нельзя учитывать слабосвязанные состояния со значениями масштабного параметра λ, близкими к критическому значению λ_0.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1980. 400 с.
2. Leidemann W., Orlandini G. Modern ab initio approaches and applications in few-nucleon physics with A ≥ 4 // Prog. Part. Nucl. Phys. 2013. V. 68. P. 158-214.
3. Efros V. D., Leidemann W., Orlandini, G. Barnea N. The Lorentz integral transform (LIT) method and its applications to perturbation-induced reactions // J. of Phys. G. 2007. V. 34. P. 459-528.
4. Nollett K. M., Pieper S. C., Wiringa R. B., Carlson J. Quantum Monte Carlo calculations of neutron-alpha scattering // Phys. Rev.Lett. 2007. V. 9. P. 1-4.
5. Papadimitriou G., Rotureau J., Michel N., Płoszajczak M., Barrett B. R. Ab initio no-core Gamow shell model calculations with realistic interactions // Phys. Rev. C. 2013. V. 88. P. 1-15.
6. Zheng D. C., Barrett B. R., Vary J. P., Haxton W. C. C.-L. Song. Large-basis shell model studies of light nuclei with a multivalued S-matrix effective interaction // Phys. Rev. C. 1995. V. 52. P. 2488-2498.
7. Barrett B. R, Navratil P., Vary J. P. Ab initio no core shell model // Progr. Part. Nucl. Phys. 2013. V. 69. P. 131-181.
8. Вильдермут К., Тан Я. М. Единая теория ядра. М.: Мир, 1980. 502 с.
9. Shirokov A. M., Mazur A. I., Mazur I. A., Vary J. P. Shell model states in the continuum // Phys. Rev.C 94. 2016. P. 064320-1–064320-24.
10. Mazur I. A., Shirokov A. M., Mazur A. I., Vary J. P. Description of Resonant States in the Shell Model // Phys. Part. Nucl. 2017. V. 48. P. 84-89.
11. Блохинцев Л. Д., Мазур А. И., Мазур И. А., Савин Д. А., Широков А. М. Метод SS-HORSE исследования резонансов // Ядерная Физика. 2017. Т. 80. С. 102-117.
12. Блохинцев Л. Д., Мазур А. И., Мазур И. А., Савин Д. А., Широков А. М. Метод SS-HORSE исследования резонансов: рассеяние заряженных частиц // Ядерная Физика. 2017. Т. 80. С. 619-631.
13. Barrett B. R, Navratil P., Vary J. P. Ab initio no core shell model // Progr. Part. Nucl. Phys. 2013. V. 69. P. 131-181.
14. Shirokov A. M., Vary J. P., Mazur A. I., Zaytsev S. A., Weber T. A. Novel NN interaction and the spectroscopy of light nuclei // Phys. Lett. B. 2005. V. 621. P. 96-101.
15. Shirokov A. M., Vary J. P., Mazur A. I., Weber T. A. Realistic nuclear Hamiltonian: Ab exitu approach // Phys. Lett. B. 2007. Vol. 644. P. 33-37.
16. Krasnopolsky V. M., Kukulin V. I. Theory of resonance states based on analytical continuation in the coupling constant // Phys. Lett. A. 1978. V. 69. P. 251-254.
17. Bang J., Gignoux C. A realistic three-body model of ^{6}Li with local interactions // Nucl. Phys. A. 1979. V. 313. P. 119-140.
18. Csoto A., Hale G. M. *S*-matrix and *R*-matrix determination of the low-energy ^{5}He and ^{5}Li resonance parameters // Phys. Rev. C. 1997. V. 55. P. 536-539.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ В ПОЛЮСНОМ РАЗЛОЖЕНИИ S-МАТРИЦЫ

А. И. Мазур, **А. О. Белозеров**

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: mazur@khb.ru

Предложен комплекс программ, моделирующий квантовое рассеяние нейтральных частиц на основе полюсного разложения S-матрицы.

Наиболее важным в квантовой физике экспериментальным методом является эксперимент по рассеянию [1, 2]. В классической постановке эксперимента по рассеянию свободно движущаяся частица в момент времени $t = 0$ попадает в область взаимодействия с мишенью. После вылета из области взаимодействия движение частицы снова становится свободным.

В квантовой теории рассеяния состояния до и после рассеяния описываются волновыми

© Мазур А. И., Белозеров А. О., 2018

функциями свободных частиц. Основной задачей квантовой теории рассеяния является нахождение оператора волнового рассеяния – S-матрицы, который связывает эти волновые функции. Полюсы S-матрицы в зависимости от их положения на плоскости комплексных значений импульсов ассоциируются с резонансными, связанными, и другими состояниями квантовой системы [1,2].

В прямой постановке задачи S-матрица находится в результате решения уравнения Шредингера с известным взаимодействием сталкивающихся частиц, и только затем определяются энергии связанных состояний и характеристики резонансов, т.е. положения полюсов S-матрицы. В данной работе мы не решаем уравнение Шредингера, а исследуем свойства квантовых систем, обусловленных наличием одного или нескольких полюсов S-матрицы, исходя только из ее аналитических свойств.

На плоскости комплексных значений импульса $q = k + i\gamma$ S-матрица является аналитической функцией (энергия сталкивающихся частиц в системе центра масс $E = \hbar^2 q^2/(2m)$, m – приведенная масса) и обладает следующими свойствами симметрии [1,2]:

$$S_l(-k) = \frac{1}{S_l(k)}; \quad S_l(k^*) = \frac{1}{S_l{}^*(k)}; \quad S_l(-k^*) = S_l{}^*(k). \tag{1}$$

Особыми точками на плоскости q являются полюсы и нули S-матрицы. В зависимости от положения, согласно теории рассеяния [1,2], полюсу q_p могут соответствовать связанное, резонансное, ложное или виртуальное состояния.

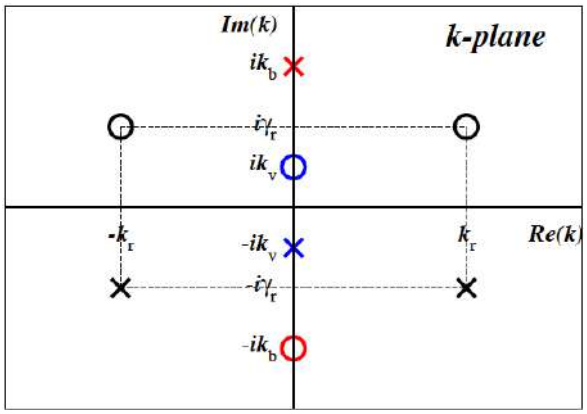


Рис. 1. Комплексная плоскость импульсов
и положение полюсов различных физических состояний

Физическим резонансным состояниям отвечают полюсы, лежащие в четвертом квадранте плоскости $q = k + i\gamma$. Вследствие свойств симметрии (1), каждому резонансному полюсу соответствует симметрично расположенные полюс в третьем квадранте и два нуля S-матрицы в верхней полуплоскости комплексных значений импульса. Энергия и ширина резонансных состояний

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2m}(k_r^2 - \gamma_r^2), \quad \Gamma = \frac{2\hbar^2}{m} k_r \gamma_r. \tag{2}$$

Полюсы, не отвечающие резонансным состояниям, могут находиться только на мнимой оси импульса. При этом полюсы, расположенные на положительной полуоси в точках $q = \gamma_b$ или $q = \gamma_f$, отвечают связанным или ложным состояниям соответственно, а полюсы на отрицательной мнимой полуоси $q = \gamma_v$ – виртуальным состояниям. Энергии этих состояний равны

$$E_b = -\frac{\hbar^2\gamma_b^2}{2m}; \quad E_f = -\frac{\hbar^2\gamma_f^2}{2m}; \quad E_v = -\frac{\hbar^2\gamma_f^2}{2m}. \tag{3}$$

Возможные варианты положения полюсов S-матрицы представлены на рис. 1 крестиками; соответствующие нули S-матрицы обозначены кружками.

Для исследования резонансов удобно использовать полюсное разложение S-матрицы:

$$S(q) = \Theta(\mathrm{q})\mathrm{S}_{p_1}(q)\mathrm{S}_{p_2}(q)\ldots\ , \tag{4}$$

где $\Theta(q)$ – некоторая гладкая функция импульса q, а полюсные члены $S_p(q)$ для разных типов состояний (связанное, резонансное, и т. д.) в соответствие со свойствами симметрии (1) имеют вид:

$$S_{b(f)}(k) = \frac{q_{b(f)} - ik}{q_{b(f)} + ik};\quad S_v(k) = \frac{q_v + ik}{q_v - ik};\quad S_r(k) = \frac{(k + q_r)(k - q_r^*)}{(k - q_r)(k + q_r^*)}. \tag{5}$$

S-матрица в парциальной волне l связана со сдвигом фаз $\delta_l(q)$:

$$S_l(q) = e^{-2i\delta_l}.$$

Следовательно, в соответствие с (4), сдвиг фаз $\delta_l(q)$

$$\delta_l(q) = \varphi(\mathrm{q}) + \delta_{p_1}(q) + \delta_{p_2}(q)\ldots\ , \tag{6}$$

где $\delta_{p_i}(q)$ – вклады полюсных членов соответственно для связанных, ложных, виртуальных и резонансных полюсов, имеющих следующие выражения при действительных значениях энергий:

$$\begin{gathered}\delta_b(E) = \pi - \operatorname{arctg}\sqrt{\frac{E}{|E_b|}};\quad \delta_f(E) = -\operatorname{arctg}\sqrt{\frac{E}{|E_f|}};\\ \delta_v(E) = \operatorname{arctg}\sqrt{\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{E_v}}};\quad \delta_r(E) = -\operatorname{arctg}\left(\frac{2k\gamma_r}{k^2 - k_r^2 - \gamma_r^2}\right).\end{gathered} \tag{7}$$

Дополнительное слагаемое π в случае связанного состояния обусловлено теоремой Левинсона [1, 2].

Реально в физических процессах в поведении сдвигов фаз ярко проявляется ограниченное число состояний. Вклад состояний, лежащих далеко от рассматриваемой области энергий, согласно (5) проявляется в виде гладкой функции $\varphi(E)$. Сдвиг фазы, отвечающий первому сомножителю в (4), также представляет гладкую функцию энергии, и его удобно представить в виде Паде-аппроксиманта

$$\varphi(E) = \frac{c_1\sqrt{E} + c_3\left(\sqrt{E}\right)^3 + \cdots + c_k\left(\sqrt{E}\right)^k}{1 + d_1E + d_2E^2 + \cdots + d_nE^n}. \tag{8}$$

Для моделирования поведения сдвигов фаз и полных сечений рассеяния частиц, соответствующих квантовым системам с различными полюсами S-матрицы и их комбинациями, на языке C++ был разработан комплекс программ. Графический интерфейс комплекса представлен на рис. 2.

Интерфейс предусматривает возможность ввода положений полюсов как численно, так и графически, посредством указания соответствующей точки на комплексной плоскости. В последнем случае для добавления полюса необходимо нажать левую кнопку мыши в необходимой точке, а для его удаления – правую кнопку мыши. Численно положение полюса можно задать вводом действительного и мнимого значений импульса, или значений энергии и ширины резонанса.

Слева под комплексной осью импульсов, демонстрирующей положение полюсов, можно ввести диапазон рассматриваемых энергий, шаг изменения энергии и приведенную массы сталкивающихся частиц. Правее находится кнопка, отвечающая за выбор единиц измерения сдвига фаз (градусы или радианы). Кнопка **Add** позволяет добавить новый полюс, кнопка **Graph** запускает процедуры расчета сдвигов фаз и сечений и построения графиков, кнопка **Clear** удаляет построенные на правых панелях графики и точки, отмечающие положения полюсов.

В центре интерфейса находится таблица, в которой выводятся значения ширины и энергии, соответствующих заданному выше полюсу. Справа – графики зависимости сдвигов фаз (вверху) и сечений (внизу) от энергии в системе центра масс (до пяти различных кривых).

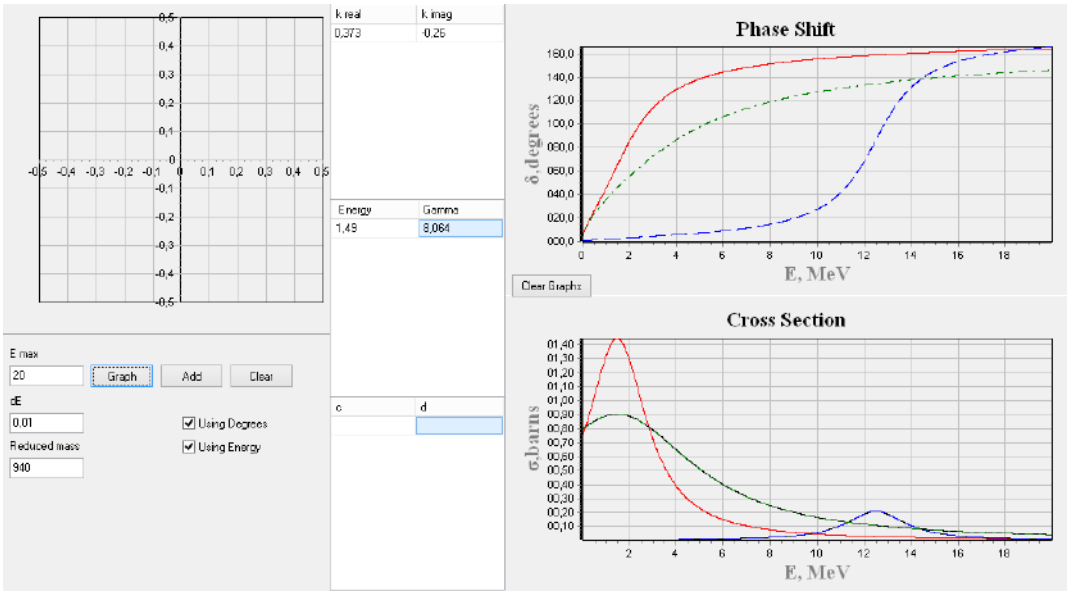


Рис. 2. Внешний вид графического интерфейса

Зависимости сдвигов фаз и сечений рассеяния от энергии частиц в системе центра масс в наиболее простых случаях, когда S-матрица имеет один резонансный полюс, представлены в правой части рис. 2. Сплошная линия соответствует резонансу с энергией $E_r = 1.5$ МэВ и шириной $\Gamma = 3.1$ МэВ. Положение резонанса E_r примерно совпадает с максимумом в сечении рассеяния и переходом сдвига фаз через $\pi/2$, его ширина Γ – ширине кривой сечения на уровне, совпадающем с половиной его максимального значения. При увеличении ширины (штриховая кривая на рис. 2, резонанс $E_r = 1.5$ МэВ, $\Gamma = 8.1$ МэВ) резонанс становится менее выраженным: пик в сечении рассеяния становится ниже и более широким, а сдвиг фаз возрастает более плавно. Сдвиг резонанса в область более высоких энергий ($E_r = 12.5$ МэВ, $\Gamma = 3.1$ МэВ, штрих-пунктирная линия) приводит к уменьшению абсолютного значения сечения при сохранении формы кривой.

Особенности поведения сдвигов фаз в системе с комбинацией узкого и широкого резонансов представлена на левой панели рис. 3. Сдвиги фаз, обусловленные только узким (E_r =0.25 МэВ, $\Gamma = 0.41$ МэВ) резонансом показаны кривой с длинными штрихами; широким (E_r =4.3 МэВ, $\Gamma = 7.5$ МэВ) – кривой с короткими штрихами. Сплошная линия представляет сдвиги фаз в случае, когда S-матрица включает оба полюса. Сдвиг положения узкого резонанса относительно широкого на $\Delta E = 4$ и 8 МэВ приводит к “скольжению” фазы узкого резонанса по кривой широкого (штрих-пунктирная и штрих-штрих-пунктирная кривые соответственно).

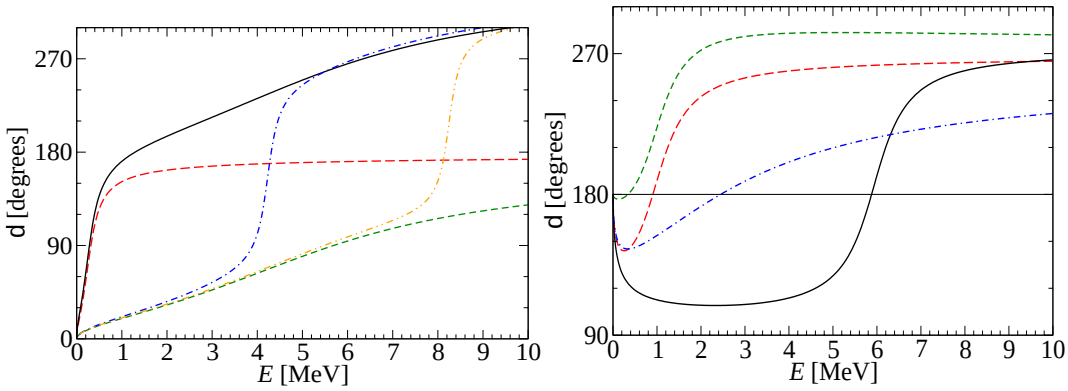


Рис. 3. Сдвиги фаз в случаях комбинаций узкого и широкого резонансов (слева) и связанного и резонансного состояния (справа)

Поведение фазы, обусловленное наличием связанного и резонансного состояния, существенным образом зависит от величины энергии E_{b} связанного состояния (правая панель рис. 3). Если энергия E_{b} достаточно велика, поведение фазы практически не отличается от случая "чистого" резонанса (штриховая кривая на рис. 3, справа) с $E_{\mathrm{b}} = 1.9$ МэВ, E_r =0.96 МэВ, Г =1.2 МэВ). Уменьшение энергии связи приводит к заметным изменениям в поведении фазы рассеяния (кривая с длинными штрихами на том же рисунке соответствует E_{b} =0.13 МэВ). Сдвигу резонанса на ΔE =5 МэВ соответствует сплошная кривая, широкому резонансу (случай E_{b} =0.13 МэВ, E_r =0.96 МэВ, Г =6.2 МэВ) – штрих-пунктирная кривая.

Варианты комбинации виртуального и резонансного состояний представлены на левой панели рис. 4. Поведение фазы в случае комбинации резонанса (с энергией E_r =1.24 МэВ и шириной Г =1.8 МэВ) и виртуального состояния (энергия $E_{\mathrm{v}} = -0.29$ МэВ) представлено на рисунке сплошной кривой. Для сравнения поведения фазовых сдвигов по отдельности для резонансного и виртуального состояний показаны кривыми с короткими и длинными штрихами соответственно. С ростом энергии виртуального состояния по абсолютной величине его влияние на резонансное поведение фазы ослабевает (штрих-пунктирная кривая соответствует случаю с $E_{\mathrm{v}} = -3.15$ МэВ). Сдвиг резонансного состояния в область больших энергий (E_r =4.0 МэВ, Г =2.3 МэВ при неизменной энергии виртуального состояния$E_{\mathrm{v}} = -0.29$ МэВ) продемонстрирован штрих-штрих-пунктирной кривой.

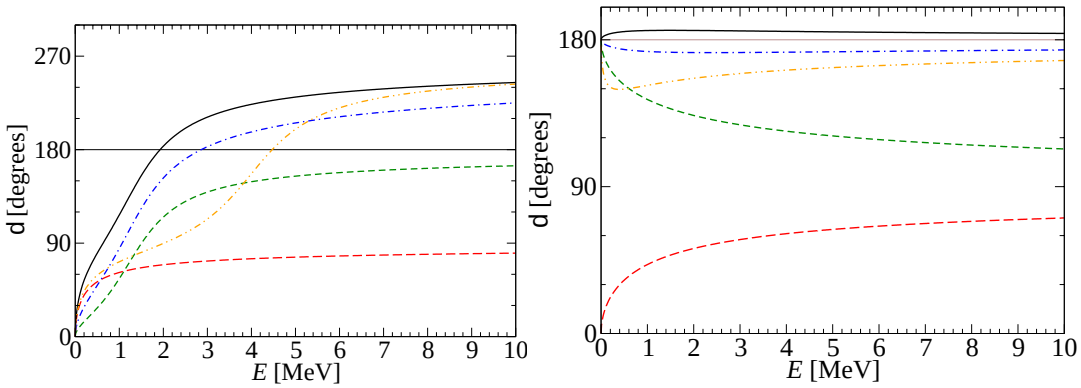


Рис. 4. Сдвиги фаз. Слева: комбинация виртуального и резонансного состояний; справа: комбинация связанного и виртуального состояний

Поведение сдвигов фаз в случае комбинации виртуального и связанного состояний представлено на правой панели рис. 4. Здесь кривыми с короткими и длинными штрихами показано поведения сдвигов фаз, обусловленных наличием только связанного ($E_{\mathrm{b}} = 1.8$ МэВ), или только виртуального ($E_{\mathrm{v}} = -1.2$ МэВ) состояний. Сплошная кривая соответствует комбинации обоих полюсов. Штрих-пунктирная кривая отражает изменение сдвигов фаз при изменении энергии виртуального состояния ($E_{\mathrm{v}} = -3.2$ МэВ). Последняя – штрих-штрих-пунктирная кривая соответствует случаю одновременного изменения энергий связанного и виртуального состояний ($E_{\mathrm{v}} = -0.29$ МэВ, $E_{\mathrm{b}} = 0.13$ МэВ).

Более реалистическое описание поведения сдвигов фаз возможно только с учетом вклада удаленных полюсных членов с помощью параметризации (8).

Разработанный комплекс программ может оказаться полезным для предварительной оценки характеристик рассеяния реальных квантовых систем, в частности, в рамках метода SS-HORSE (*Single-State Harmonic Oscillator Representation of Scattering Equations)* [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969. 607 с.
2. Дж. Тейлор. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М.: Мир, 1975. 567с.
3. Мазур А. И., Мазур И. А., Широков А. М. Резонансное и нерезонансное рассеяние в микроскопических подходах. Метод SS-HORSE. Хабаровск: Изд-во ТОГУ, 2017. 148 с.

МЕТОД ПОИСКА ПОЛЮСОВ S-МАТРИЦЫ НА ОСНОВЕ ТЕОРЕМЫ КОШИ

А. И. Мазур, Е. А. Мазур

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: mazur@khb.ru

Предложен численный метод поиска полюсов S-матрицы на комплексной плоскости импульсов с помощью теоремы Коши. Метод апробирован на модельной задаче рассеяния $n\alpha$.

В квантовой теории [1-3] состояния двух взаимодействующих частиц в зависимости от энергии относительного движения делятся на связанные состояния и состояния рассеяния. Связанные состояния возникают, если взаимодействие частиц является притягивающим. Энергетический спектр связанных состояний является дискретным, собственные энергии $E_\lambda < 0$, а соответствующие собственные функции экспоненциально затухают вне области действия потенциала. Существуют также так называемые ложные и виртуальные состояния с отрицательными значениями энергии, но другим асимптотическим поведением. Если же энергия относительного движения частиц положительная ($E > 0$), то говорят о состояниях рассеяния. Энергетический спектр в этом случае непрерывный.

Среди состояний рассеяния принято выделять резонансные состояния. Резонансы проявляются в виде острых пиков в полном сечении рассеяния как функции энергии сталкивающихся частиц. Четко выделенным максимумам сечений соответствуют долгоживущие, почти связанные состояния системы двух частиц. Если энергия налетающей частицы близка к резонансной, то квантовая система находится в так называемом метастабильном состоянии, которое распадается спустя достаточно продолжительный промежуток времени. Одним из примеров резонансных процессов является распад радиоактивных ядер или нестабильных частиц.

В квантовой теории рассеяния большую роль играет матрица рассеяния, или S-матрица, которая связывает асимптотики волновых функций частиц до и после рассеяния. В случае упругого рассеяния S-матрица представляет собой аналитическую функцию на всей плоскости комплексных значений импульса за исключением точек, соответствующих положениям полюсов, и удовлетворяет свойствам симметрии (символ (*) означает комплексное сопряжение) [1-3]:

$$S_l(-k) = \frac{1}{S_l(k)}; \quad S_l(k^*) = \frac{1}{S_l{}^*(k)}; \quad S_l(-k^*) = S_l{}^*(k). \tag{1}$$

Из свойств симметрии (1) следует, что S-матрица может иметь полюсы только в нижней полуплоскости комплексной плоскости импульсов, или на ее мнимой оси [1-3]. При этом оказывается, что связанным (b) и ложным (f) состояниям отвечают полюсы S-матрицы, расположенные на положительной полуоси мнимых значений k, виртуальным (v) состояниям – на отрицательной полуоси. Возможные положения полюсов S-матрицы на комплексной плоскости k показаны на рис. 1 крестиками. На этом же рис. приведены положения нулей S-матрицы (кружки), обусловленные симметрией (1) .

Полюсы в нижней полуплоскости $k = \kappa_r \equiv k_r - i\gamma_r$ ($k_r,\ \gamma_r > 0$) в силу симметрии (1) являются парными с полюсами $k = -\kappa_r^* \equiv -k_r - i\gamma_r$ и ассоциируются с резонансными состояниями с энергией и шириной

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2m}(k_r^2 - \gamma_r^2), \quad \Gamma = \frac{2\hbar^2}{m} k_r \gamma_r. \tag{2}$$

S-матрица $S_l(k)$ связана с парциальной амплитудой рассеяния $f_l(k)$ и сдвигом фаз $\delta_l(k)$ в парциальной волне l:

$$S_l(k) = 1 + 2ikf_l(k) = e^{-2i\delta_l}. \tag{3}$$

Очевидно, что полюсы S-матрицы совпадают с полюсами парциальной амплитуды рассеяния.

© Мазур А. И., Мазур Е. А., 2018

Амплитуду рассеяния, в свою очередь, можно выразить через функцию эффективного радиуса $K_l(k)$. В случае рассеяния нейтральных частиц

$$f_l(k) = \frac{k^{2l}}{K_l(k) - ik^{2l+1}}, \quad K_l(k^2) = k^{2l+1}\cot\delta_l(k). \tag{4}$$

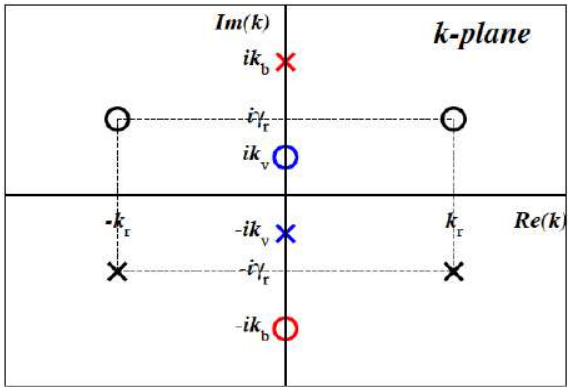


Рис. 1. Положения полюсов (крестики) и нулей S-матрицы на комплексной плоскости импульса (кружочки)

Важно, что функция эффективного радиуса – четная функция по импульсу.

В задаче рассеяния заряженных частиц необходимо использовать кулоновски-перенормированную амплитуду рассеяния [4,5]:

$$\tilde{f}_l(k) = \frac{k^{2l}}{\widetilde{K}_l(k) - 2\eta k^{2l+1} H(\eta)\left(c_{l\eta}\right)^{-1}}, \tag{5}$$

где

$$c_{l\eta} = \prod_1^l \left(1 - \frac{\eta^2}{n^2}\right)^{-1}, \quad l > 0; \qquad c_{0\eta} = 1,$$

$\eta = Z_1 Z_2 e^2 \mu/k$ – параметр Зоммерфельда, μ – приведенная масса,

$$H(\eta) = \Psi(i\eta) + (2i\eta)^{-1} - \ln(i\eta),$$

$\Psi(z)$ – логарифмическая производная Гамма-функции [6]. Кулоновски-модифицированная функция эффективного радиуса имеет вид

$$\widetilde{K}_l(k^2) = k^{2l+1}\left(c_{l\eta}\right)^{-1}\left\{\frac{2\pi\eta}{\exp(2\pi\eta) - 1}\left[\cot\delta_l - i\right] + 2\eta H(\eta)\right\}, \tag{6}$$

и также является четной функцией по k.

Таким образом, поиск положения полюсов S-матрицы (амплитуды рассеяния) сводится к решению трансцендентного уравнения на комплексной плоскости. Для заряженных частиц это уравнение имеет вид

$$\widetilde{K}_l(k^2) - 2\eta k^{2l+1} H(\eta)\left(c_{l\eta}\right)^{-1} = 0, \tag{7}$$

а в случае рассеяния нейтральных частиц ($\eta = 0$) оно упрощается:

$$K_l(k^2) - ik^{2l+1} = 0. \tag{8}$$

Метод поиска корней функции комплексного аргумента основан на теореме Коши [7] о логарифмических вычетах. Для любой аналитической функции $f(z)$ интеграл от ее аналитической производной по замкнутой кривой C, ограничивающей некоторую область D дает число корней N в этой области

$$N = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f'(z)}{f(z)} dz. \quad (9)$$

Здесь контур интегрирования обходится по часовой стрелке. Если $N = 0$, то в выбранной области D корни отсутствуют. Если $N = 1$, в данной области есть один простой корень z_0, и его положение определяется интегралом

$$z_0 = \frac{1}{2\pi i} \oint z \frac{f'(z)}{f(z)} dz \quad (10)$$

Численная процедура определения положения полюсов S-матрицы иллюстрируется на рис. 2 на примере резонансных состояний. Разобьем интересующую нас область четвертого квадранта плоскости комплексных значений импульсов на прямоугольники, и будем использовать эти прямоугольники как замкнутые контуры при вычислении интегралов (8). Если для данного прямоугольника результат вычисления интеграла (8) $N = 0$, переходим к следующему прямоугольнику. Если $N = 1$, то для этого же контура с помощью интеграла (9) определяем положение полюса S-матрицы, и затем переходим к следующему контуру интегрирования. Если $N > 1$, возможны 2 варианта. В первом имеется N простых корней, которые можно найти, разбивая область D на более мелкие области. В противном случае в области находится кратный корень. Процедура его расчета более сложная, но такие полюсы S-матрицы, если они и есть, могут появиться только в специфических задачах.

Таким образом, мы можем определить положения полюсов S-матрицы во всей интересующей нас области. Полностью аналогично определяются положения полюсов, отвечающих связанным, виртуальным и ложным состояниям. В этом случае области D охватывают мнимую полуось импульсов.

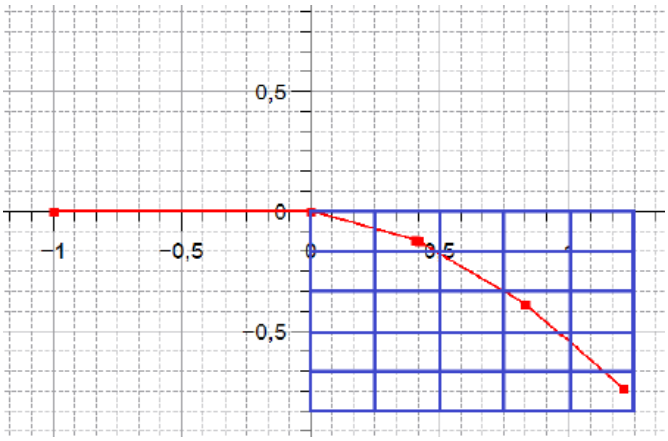


Рис. 2. Иллюстрация метода поиска полюсов S-матрицы

Представленный метод нахождения полюсов S-матрицы апробирован на модельных задачах [8,9] и использовался для анализа резонансов в рассеянии нуклонов на α-частице [10,11] на основе *ab initio* расчетов ядер ^{5}He, ^{5}Li и ^{4}He в модели оболочек без инертного кора [12] с реалистическим взаимодействием JISP16 [13] , а также исследовании резонанса тетранейтрона [14]. Комплекс программ, реализующий метод, зарегистрирован в реестре программ для ЭВМ [15].

ЛИТЕРАТУРА

1. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969. 607 с.
2. Тейлор Дж. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М.: Мир, 1975. 567 с.
3. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971. 544 с.
4. Hamilton J., Øverbö I., Tromborg B. Coulomb corrections in non-relativistic scattering // Nucl. Phys. B.

1973. V. 60. P. 443-477.
5. Блохинцев Л. Д., Мухамеджанов А. М., Сафронов А. Н. Кулоновские эффекты в ядерных реакциях с заряженными частицами // ЭЧАЯ. 1984. Т. 15. С. 1296-1377.
6. Digital Library of Mathematical Functions [Электронный ресурс]: Режим доступа: http://dlmf.nist.gov/.
7. Свешников А. Г., Тихонов А. Н. Теория Функций комплексной переменной. М.: Наука, 1967. 304 с.
8. Блохинцев Л. Д., Мазур А. И., Мазур И. А., Савин Д. А., Широков А. М. Метод SS-HORSE исследования резонансов // Ядерная Физика. 2017. Т. 80. С. 102-117.
9. Блохинцев Л. Д., Мазур А. И., Мазур И. А., Савин Д. А., Широков А. М. Метод SS-HORSE исследования резонансов: рассеяние заряженных частиц // Ядерная Физика. 2017. Т. 80. С. 619-631.
10. Shirokov A. M., Mazur A. I., Mazur I. A., Vary J. P. Shell model states in the continuum // Phys. Rev. C 94. 2016. P. 064320-1– 064320-24.
11. Mazur I. A., Shirokov A. M., Mazur A. I., Vary J. P. Description of Resonant States in the Shell Model // Phys. Part. Nucl. 2017. V. 48. P. 84-89.
12. Barrett B. R., Navratil P., Vary J. P. Ab initio no core shell model // Progr. Part. Nucl. Phys. 2013. V. 69. P. 131-181.
13. Shirokov A. M., Vary J. P., Mazur A. I., Weber T. A. Realistic nuclear Hamiltonian: Ab exitu approach // Phys. Lett. B. 2007. V. 644. P. 33-37.
14. Shirokov A. M., Papadimitriou G., Mazur A. I., Mazur I. A., Roth R., Vary J. P. Prediction for a Four-Neutron Resonance // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 117. P. 6.
15. Мазур А. И., Мазур Е. А. Подпрограмма расчета положения полюсов S-матрицы и резонансных характеристик рассеяния квантовых частиц // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018616932 от 09.06.2018.

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ МАССИВА ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОПРОВОЛОК

А. Г. Макаров[1,2], К. В. Шаповалова[1,2], К. В. Нефедев[1,2]

[1]ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет»
[2]ФГБУН «Институт прикладной математики» ДВО РАН
г. Владивосток, e-mail: makarov.ag@dvfu.ru

В данной работе исследуется гистерезисное поведение намагниченности в одномерных структурах, состоящих из тонких нанопроволок пермаллоя. Показано, что дипольное взаимодействие в квазипериодических массивах нанопроволок пермаллоя конечной длины может быть причиной наблюдаемого поведения намагниченности.

Одной из интересных структур являются искусственные спиновые системы, где большие магнитные моменты монодоменных зерен значительно увеличивают магнитостатические взаимодействия по отношению к атомным системам. Они позволяют исследовать влияние дальнодействия на основное магнитное состояние, особенно фрустрацию намагниченности, существующую в системах искусственного спинового льда, которые имеют конкурирующие дипольные взаимодействия.

В статье исследуется процесс перемагничивания периодических и квазипериодических структур, состоящих из широких и узких нанопроволок пермаллоя, выстроенных в ленту. Созданные массивы нанопроволок пермаллоя шириной 350 нм и 700 нм были расположены в периодической и квазипериодической (в соответствии с правилом Фибоначчи) структуре. Толщина каждой полосы 50 нм, а их длина 5 мкм. Ленты схематически показаны на рис. 1.

Для моделирования переключения намагниченности в магнитных нанопроволоках, расположенных в периодических и квазипериодических последовательностях, мы рассмотрели следующую упрощенную модель. Магнитные конфигурации и их энергии изучались с применением модели Изинга цепочки связанных дипольным взаимодействием макроспинов, в зависимости от силы внешнего магнитного поля. В нашей модели широкие и узкие

© Макаров А. Г., Шаповалова К. В., Нефедев К. В., 2018

нанопроволоки соответствуют макроспинам больших и маленьких магнитных моментов m_i, где i обозначает узел решетки.

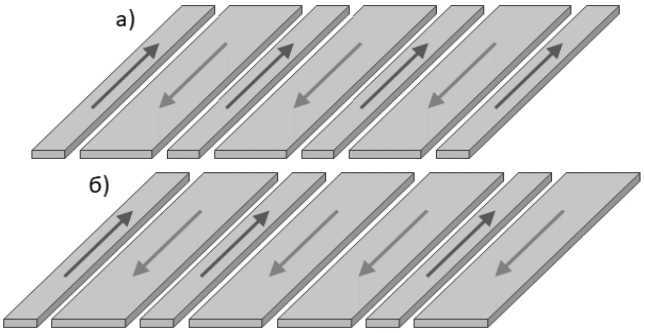


Рис. 1. Фрагмент а) периодической и б) квазипериодической (Фибоначчи) структуры широких и узких нанопроволок

Чтобы учесть разницу в анизотропии формы между широкими и узкими нанопроволоками, мы снизили внешнее поле каждого макроспина соответствующим полем переключения. Поле переключения $H_{sw,i}$ для одиночной (широкой и узкой) нанопроволоки было извлечено из микромагнитных симуляций, выполненных для изолированных нанопроволок.

Для каждой магнитной конфигурации в рассматриваемой макроспиновой модели вычисляем магнитную энергию:

$$E = k\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{m_i m_j}{\left|x_i - x_j\right|^3} - \sum_i m_i\left|H_{ext} + H_{sw,i}\right|, \qquad (1)$$

где m_i принимает значения $V_i M_S$ и $-V_i M_S$ для параллельного и антипараллельного выравнивания намагниченности по отношению к направлению внешнего магнитного поля соответственно, V_i – объем i-й магнитной нанопроволоки, а $M_S = 0.8\times10^6$ А/м - намагниченность насыщения пермаллоя. Символ x_i обозначает положение *i*-го магнитного момента. В реальных образцах на концах нанопроволок ожидается неколлинеарная конфигурация намагниченности, поэтому будет уменьшено блуждающее магнитное поле, создаваемое магнитными нанопроволоками [1], что может значительно уменьшить дипольные взаимодействия между ними. Чтобы включить этот эффект, мы ввели параметр *k*, который при $0 \le k < 1$ ослабляет силу дипольной связи между магнитными моментами в моделируемой системе.

Мы использовали метод Монте-Карло (МК), основанный на алгоритме Метрополиса [2,3], чтобы найти последовательность магнитных конфигураций, которые минимизируют магнитную энергию (1) при постепенном изменении внешнего магнитного поля. Детально МК метод с включенным дипольным взаимодействием представлен в работах [4,5] для разных моделей.

Для построения петли гистерезиса изменяли внешнее магнитное поле от 800 Э до -800 Э и обратно, с шагом 1 Э. На каждом шаге, т.е. для каждого рассматриваемого значения поля, находим магнитную конфигурацию, соответствующую локальному минимуму энергии для всех переходов из конфигурации, достигнутой на предыдущем этапе. Это изменение магнитных конфигураций, вызванное почти непрерывным изменением H_{ext}, позволяет определить зависимость магнитного момента от внешнего поля: $M\left(H_{ext}\right)/M_S = \sum_i m_i \Big/ \sum_i \left|m_i\right|$. Численные расчеты проводились для периодических и квазипериодических последовательностей, состоящих из 144 магнитных моментов.

Путем изменения размеров нанопроволок (длины или толщины) мы можем изменить силу магнитостатических взаимодействий между ними в ленте. Уменьшение взаимодействия также уменьшает различия между квазипериодическими и периодическими структурами. Эти различия исследованы с использованием численного МК моделирования и анализа рассеянного магнитного поля в системах.

На рис. 2 представлено влияние силы дипольных взаимодействий на петлю гистерезиса, полученную при МК моделировании. Для невзаимодействующих нанопроволок (k = 0) перемагничивание следует за двумя этапами процесса, разделенным плато, размер которого равен разности между анизотропиями широких и узких нанопроволок. Увеличение параметра k растягивает процесс размагничивания. Перемагничивание узких полос переходит к более высоким значениям H_{ext} с увеличением k, тогда как для широких полос поле начала переключения принимает более низкие значения. Интересно, что начало плато (прекращение переключения широких нанопроволок) остается почти в том же положении. Тем не менее, плато увеличивается с увеличением взаимодействия между магнитными моментами.

На рис. 2 также можно видеть дополнительное узкое плато в квазипериодической структуре на уровне M = 0.05 M_S при k = 0.1 и 0.2, которое увеличивается с k и представляет состояние, где из широких нанопроволок только вторая из пары еще не переключена. Детальное обследование при k = 0.1 и k = 0.2 позволяет также идентифицировать некоторые дополнительные шаги в обращении широких полос (при M = 0.4 M_S и 0.6 M_S) и узких полос (при M = -0.65 M_S). Они указывают на части петли гистерезиса, где можно ожидать влияние дальнего порядка, когда будут увеличены эффективные магнитостатические взаимодействия между нанопроволоками. Интересно, что при очень сильных дипольных взаимодействиях k > 0.25 сценарий перемагничивания изменяется (см. кривую для k = 0.3). В этом случае структура стремится начать перемагничивание с узких полос. Снижение значения k при МК моделировании приводит к уменьшению взаимодействия между нанопроволоками в ленте.

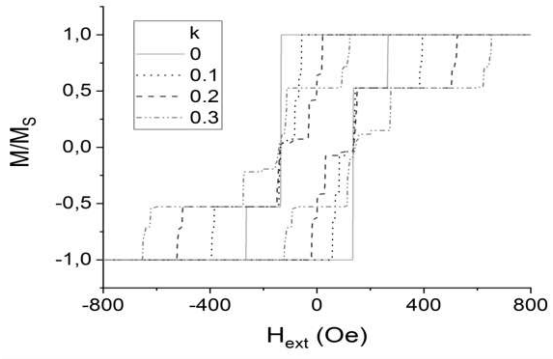


Рис. 2. Сравнение петель гистерезиса для разных значений параметра k, полученных с помощью Монте-Карло моделирования магнитных моментов в квазипериодических (Фибоначчи) цепочках

Сравнение гистерезисных петель для периодической и квазипериодической структуры, полученной с помощью МК моделирования при k = 0.05, показано на рисунке 3. В периодической структуре нет дополнительной фазы плато, что связано с отсутствием пар широких полос. Как правило, широкие полосы прекращают перемагничиваться при более высоком H_{ext} в квазипериодической, чем в периодической структуре.

Таким образом, мы исследовали петли гистерезиса в массиве нанопроволок пермаллоя в зависимости от периодического или квазипериодического порядка, и от магнитостатического взаимодействия между полосами. Различия между периодическими и квазипериодическими структурами связаны с парами двух широких нанопроволок, расположенных рядом друг с другом, и магнитостатическим взаимодействием между ними, которое предпочитает антипараллельную конфигурацию и вызывает переключение второй нанопроволоки при более высоких полях. Хотя это поведение видно только в том случае, если сила взаимодействия достаточно сильна, и исчезает при понижении дипольного взаимодействия.

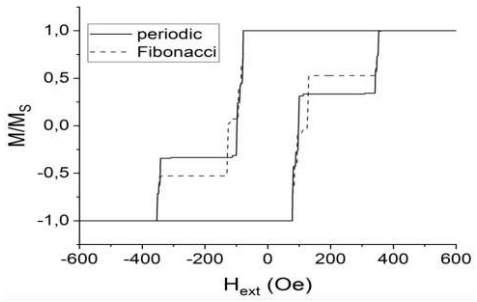


Рис. 3. Сравнение петель гистерезиса, полученных при МК моделировании для периодического и квазипериодического (Фибоначчи) порядка магнитных моментов в цепочке. Параметр *k* фиксируется при 0.05

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00713 мол_а.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Hartmann U. Origin of Brown's coercive paradox in perfect ferromagnetic crystals // Physical Review B. 1987. Vol. 36. No. 4. P.2331.
2. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Equation of state calculations by fast computing machines // The journal of chemical physics. 1953. Vol. 21. No. 6. P.1087-1092.
3. 3. Landau D. P., Binder K. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics // Cambridge university press. 2014.
4. Shevchenko Y., Makarov A., Nefedev K. Effect of long-and short-range interactions on the thermodynamics of dipolar spin ice // Physics Letters A. 2017. Vol. 381. No. 5. P.428-434.
5. Shevchenko Y. A., Makarov A. G., Andriushchenko P. D., Nefedev K. V. Multicanonical sampling of the space of states of H(2,n)-vector models // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2017. Vol. 124. No. 6. P.982-993.

КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УЛЬТРАЗВУКА В COMSOL MULTIPHYSICS

Б. М. Молоканов, К. А. Драчёв, В. И. Римлянд

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: project1326@mail.ru

Рассмотрена возможность применения вычислительных методов программной платформы COMSOL Multiphysics для решения задач распространения ультразвука в твёрдых телах. Разработана упрощенная двумерная модель на основе использования стандартного интерфейса Solid Mechanics.

В настоящее время метод конечных элементов (МКЭ) является распространенным инструментом для решения теоретических и практических задач физики твердого тела и акустики [1-4]. Высокая стоимость проведения экспериментальных измерений, необходимость ведения больших баз измерительных данных, осуществления их статистического анализа приводят к целесообразности использования методов математического моделирования распространения акустических волн. Развитие современной компьютерной техники и программного обеспечения позволяет проводить расчеты большинства физических явлений с помощью виртуальной математической модели. Математическая модель позволяет описать физические процессы, происходящие в твердом теле при распространении упругих волн. Для создания модели можно использовать различные программные пакеты, в нашей работе применялась универсальная программная платформа COMSOL Multiphysics.

© Молоканов Б. М., Драчев К. А., Римлянд В. И., 2018

Распространение акустических волн описывается в COMSOL Multiphysics системой дифференциальных уравнений в частных производных, решаемых методом конечных элементов в одном, двух и трех измерениях. Универсальный интерфейс позволяет быстро создавать математическую модель, задавая исходные данные в виде граничных условий, свойств материалов, внешних воздействий и параметров расчета. В нашем случае, расчет проводится для физических величин, характеризующих свойства материалов и сред применительно к волновой теории ультразвука и механики твердого тела. Для этого использовался интерфейс Solid Mechanics основанный на решении уравнений Навье и предназначенный для общего структурного анализа модели и вычисления таких параметров как смещение, напряжение и деформации:

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla \sigma + F_v$$

где σ – механическое напряжение, F_v – сторонние силы, u – вектор смещения, ρ – плотность среды.

Кроме акустических задач данный интерфейс позволяет решать задачи из области механики. Расчет математической модели проводится во временном модуле (Time Depend). Шаг по времени для расчета модели задаются оператором. Следует отметить, что с уменьшением шага по времени увеличивается время расчета модели и требуются большие расчетные мощности компьютера.

Для возбуждения акустической волны в модели используется точечный источник. В качестве сигнала применен синусоидальный импульс полного периода для получения сигнала, наиболее похожего на используемый сигнал в экспериментальных измерениях:

$$F(t) = A_0 \sin\left(2\pi f t + \frac{\pi}{2}\right)$$

где A_0 – амплитуда сигнала, f – рабочая частота излучателя. Фаза $\pi/2$ используется для упрощения отображения шагов в двумерной модели. В расчётах это учитывается. Результатом расчета являются изображения распространения акустического поля, полученные через дискретные промежутки времени. Общее время расчета и время дискретизации задается оператором.

Численное моделирование в двухмерном варианте было проведено для образца 100×100 мм (двумерной плоскости) из стали (E=200 ГПа, μ = 0,25, ρ = 7800 кг/м^3). На рис. 1 продемонстрирована «фотография» распространения акустического поля через 1,6 мкс после начала действия возбуждающей силы. Источник этой силы расположен в верхнем левом углу расчетной области. Амплитуда источника составляет 10 Н, рабочая частота 5 МГц.

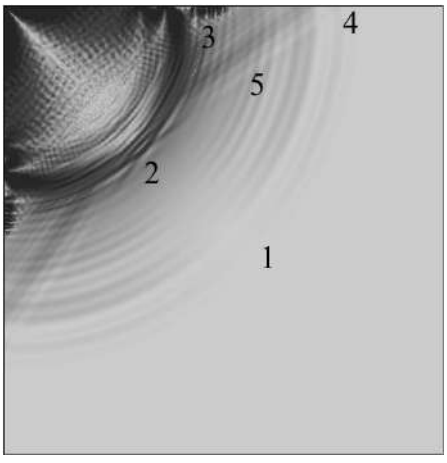


Рис. 1. Волны в стали от точечного источника, расположенного на границе расчетной области (E=200 ГПа, μ = 0,25, ρ = 7800 кг/м^3, t = 1,6 мкс)

Источник силы возбуждает продольные 1 (5552 м/с) и поперечные волны 2 (3493 м/с). На поверхности расчетной области образуются волны Рэлея 3 (3100 м/с) и головная волна 4 (5448 м/с), формирующая дополнительный фронт поперечных волн 5. Справочные данные для скоро-

стей продольных и поперечных волн в данной стали составляют 5547 м/с и 3397 м/с соответственно. Скорость распространения упругих волн рассчитывалась вручную по «фотографии» распространения акустического поля, записанной для определенного временного отрезка.

При решении задачи для нескольких контактирующих расчетная область может быть разбита на несколько областей с различными физико-механическими свойствами. На рисунке 2 показано акустическое поле, формирующееся в модели состоящей из двух материалов – эпоксидная смола (область 1) и сталь (область 2). Линией показано расположение границы раздела двух сред. Из рисунка видно различие в величине скорости продольных волн в стали и эпоксидной смоле, а также возникающая от границы раздела отраженная волна.

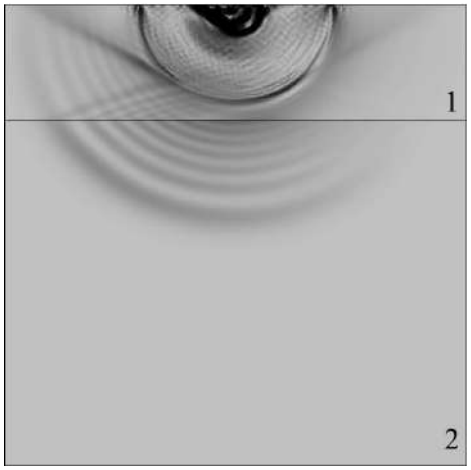
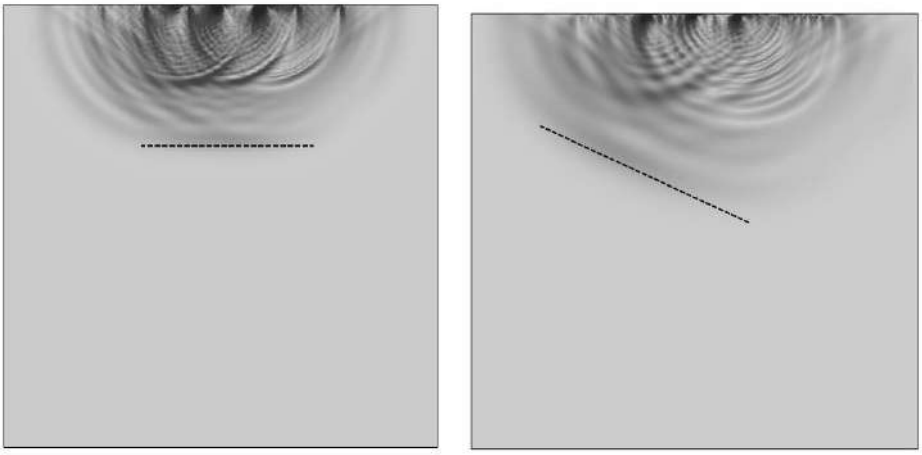


Рис. 2. Волны от точечного источника, расположенного на границе расчетной области на 1,6 мкс

С помощью средств COMSOL Multiphysics в модели можно задавать несколько одиночных точеных источников колебаний, формируя необходимое направление распространения волнового фронта (рис. 3). Возбуждающий импульс последовательно подается на все излучающие источники с определенной задержкой. Время задержки подачи возбуждающего сигнала на источники рассчитываются с учетом требуемого угла излучения.



а) *б)*

Рис. 3. Волновой фронт, формируемый тремя точечными источниками:
а) без задержки на отдельных источниках; *б*) с задержкой на отдельных источниках
(пунктиром показан волной фронт продольной волны).

Описанный комплекс моделирования МКЭ позволяет проанализировать распространение упругих волн в твердом теле. Отметим, что моделирование волновых процессов в программе COMSOL Multiphysics не позволяет полностью учитывать все особенности распространения волн в твердом теле. В данной работе расчет математической модели распространения акустических волн в твердом теле является упрощенным, в нем необходимо учесть дополнительные

тензоры напряжений и анизотропию распространения упругих волн в разных направлениях. Для этого потребуются более мощные вычислительные и временные ресурсы. Полученные результаты качественно совпадают с результатами, полученными ранее с помощью применения метода конечных разностей во временной области в работах [5-6].

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Осетров А. В., Нгуен Ван Шо Расчет параметров поверхностных акустических волн в пьезоэлектриках методом конечных элементов // Вычислительная механика сплошных сред. 2011. Т. 4. №4. С. 71-80.
2. Киселев Д. С. Конечно-элементное моделирование распространения упругой волны применительно к задачам георазведки // Сборник научных трудов Новосибирского государственного технического университета. 2015. № 1 (79). С. 45-54.
3. Сыч Т. В., Герасимов С. И., Кулешов В. К. Моделирование распространения акустических волн методом конечных элементов // Дефектоскопия. 2012. № 3. С. 3-9.
4. Петров А. А., Быков Д. А. Моделирование ультразвукового контроля дефектоскопом с фазированной антенной решеткой // Вестник Московского энергетического института. 2013. № 5. С. 83-87.
5. Авдеев Д. А., Римлянд В. И. Моделирование распространения ультразвука в твердом теле // Материалы Всероссийской молодежной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование». 2014. С. 3-6.
6. Авдеев Д. А., Римлянд В. И. Моделирование распространения ультразвука в твердых телах различной формы // Информатика и системы управления. 2015. № 2 (44). С. 15-22.
7. Авербух Б. Б., Авербух И. Б. Распространение плоской s-поляризованной электромагнитной волны в цилиндрических наностержне и нанотрубке // Сборник научных трудов «VI международная конференция по фотонике и информационной оптике». 2017. С. 464-465.

БЫСТРЫЙ МЕТОД ТОЧНОГО РАСЧЕТА КОНЕЧНЫХ РЕШЕТОК МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ В МОДЕЛИ ИЗИНГА

М. А. Падалко, К. В. Нефедев

ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет»
г. Владивосток, e-mail: mihhll108@mail.ru

В докладе приводится метод точного расчета решеток магнитных моментов на основе модели Изинга, названный методом последовательного включения. Он превосходит по скорости алгоритм полного перебора всех возможных конфигураций при сохранении точности результата. Метод делает доступными расчеты двумерных решеток вплоть до размеров 10x10 для периодических граничных условий на обычных персональных компьютерах. Учитывается взаимодействие только между ближайшими соседями. Рассматривается двумерный случай решетки, однако метод без труда обобщается и на трехмерные структуры решеток любых типов. Ценность предлагаемого подхода получения точного решения состоит в том, что им можно проверять эффективность приближённых методов статистической механики.

Введение. Задача доклада – описание метода быстрого точного расчета кратности вырождения всех состояний при заданной энергии и намагниченности модели Изинга [1] для двумерной решетки, в узлах которой расположены спины. Энергия системы и ее взаимодействия с полем определяется по формуле [2]

$$E' = \sum_{<i,j>} J_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i .$$

Здесь J_{ij} – константа обменного взаимодействия (для ферромагнетика положительная и для антиферромагнетика отрицательная), символ суммы с индексом $<i, j>$ обозначает суммирование по всем соседним узлам, s_i и s_j – компоненты спинов, принимающие в соответствии с моделью Изинга одно из двух возможных состояний: +1 или -1 (верх или низ), H - проекция напряженности внешнего магнитного поля. Рассматривается только случай взаимодействия

© Падалко М. А., Нефедев К. В., 2018

ближайших соседей. Искомая кратность вырождения необходима для вычисления статистической суммы системы спинов, находящейся в тепловом равновесии с окружающей средой при температуре T и выражается формулой [3]

$$Z(T,H)=\sum_{E,M} g(E,M)\cdot\exp(-E/T-M\cdot H/T)$$

где *g(E, M)* – кратность вырождения состояния с дискретной энергией взаимодействия спинов *E* и намагниченностью *M*.

Предлагаемый метод работает для одномерных, двумерных и трехмерных решеток. Однако для упрощения рассуждений будут рассмотрены двумерные. Метод без труда обобщается и на другие случаи. В дальнейшем модуль константы обменного взаимодействия будем считать равным единице. Т.к. внешнее поле не влияет на величину *g(E, M)*, нет необходимости его рассматривать (здесь *E* - энергия взаимодействия спинов друг с другом).

Приводимый быстрый метод точного вычисления кратности вырождения системы спинов Изинга имеет огромный выигрыш в скорости работы при немного больших затратах используемой оперативной памяти по сравнению с методом исчерпывающего перечисления. Суть его заключается в хранении в памяти результатов уже однажды выполненных действий по подсчету энергии и намагниченности спинов частей системы. В основе лежит применение метода исчерпывающего перечисления к какому-либо малому участку и последующее его расширение и расчет с использованием уже выполненных вычислений. По этой причине алгоритм можно назвать методом последовательного расширения.

Описание алгоритма. Опишем алгоритм на примере системы спинов ферромагнетика (см. рис. 1). Обозначим ее буквой D. В ней содержится 8 спинов. Энергия взаимодействия между ними будет вычисляться по формуле

$$E=-(s_1s_2+s_3s_4+s_4s_5+s_5s_6+s_7s_8+s_1s_4+s_2s_5+s_4s_7+s_5s_8).$$

В ферромагнетике два однонаправленных спина дают отрицательный вклад в энергию, противоположно направленные – положительный.

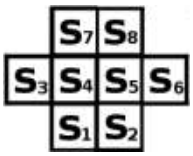


Рис. 1. Система D, состоящая из 8 спинов

Главная задача – получение распределения (или гистограммы) по энергии и намагниченности системы спинов D.

Первым шагом рассмотрим ее часть. На рис. 2 она обозначена буквой A. В дальнейшем путем добавления магнитных моментов мы придем к исходной структуре D. Система A содержит моменты s_1, s_3, s_4, s_5, s_7. Условно разделим все спины системы A на внутренние и внешние (граничные). На рис. 2 внутренний спин s_4 системы A заштрихованы, внешние – нет.

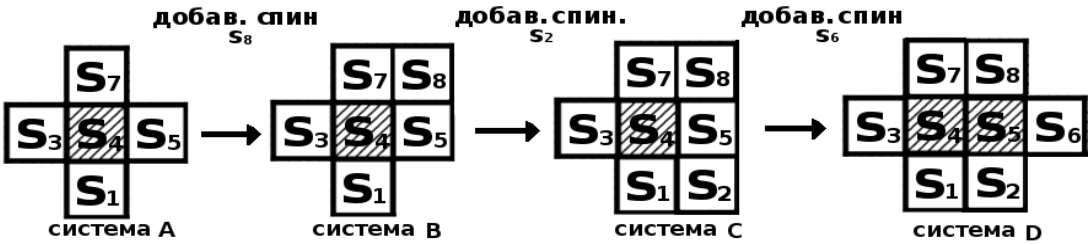
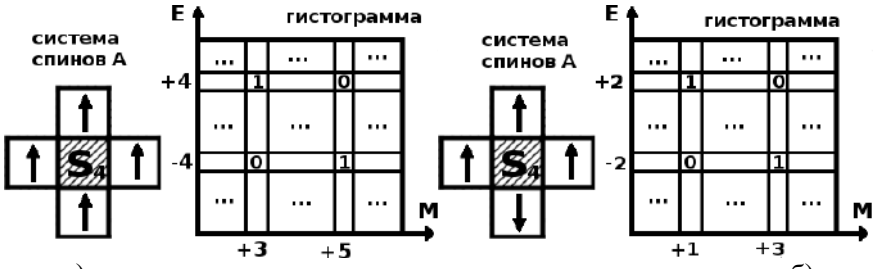


Рис. 2. Системы спинов, получаемые последовательным добавлением моментов. Заштрихованные клетки обозначают внутренний спин, незаштрихованные – внешний

Составим распределение (гистограмму) по энергии и намагниченности (ее удобно записывать в виде матрицы или таблицы) всех возможных состояний структуры A при какой-либо

фиксированной конфигурации граничных спинов и сохраним ее в памяти. Чтобы получить все состояния участка А при фиксированной границе надо осуществить перебор всех возможных конфигураций внутреннего спина s_4. Их всего две. Например, на рис. 3 а, у системы все граничные спины направлены вверх, и гистограмма, будет иметь вид, изображенный на том же рисунке рис. 3 а. На рис. 3 б приведена матрица распределения для конфигурации, у которой спин s_1 направлен вниз, а остальные - s_3, s_7, s_5 - вверх.



а) б)

Рис. 3. Гистограммы для системы А при двух различных конфигурациях граничных спинов s_1, s_3, s_5, s_7: все четыре внешних спина направлены вверх (а), три - вверх и один - вниз (б). Здесь гистограмма - таблица чисел, каждое из которых обозначает кратность вырождения состояния системы с заданной энергией и намагниченностью, определяемыми значениями s_1, s_3, s_4, s_5, s_7

Операцию построения гистограммы следует проделать для каждого возможного состояния граничных спинов структуры А. Она содержит 4 внешних спина. Отсюда, имеем 2^4 возможных состояния граничных моментов. Для каждого строим матрицу распределения.

На втором шаге расширим участок А, включив в него спин s_8 системы D (рис. 2). Новую систему обозначим буквой В. Она содержит 5 внешних спинов s_1, s_3, s_5, s_7, s_8 и внутренний - s_4.

Вновь надо получить матрицу распределения состояний системы В для каждой возможной конфигурации граничных спинов. Вместо полного перебора всех состояний 5 внешних спинов воспользуемся уже полученными гистограммами, осуществив специальную процедуру, схема которой приводится на рис. 4. Продемонстрирован процесс получения двух новых матриц распределений для двух конфигураций граничных спинов (в одной все спины направлены вверх, в другой также - вверх, кроме спина s_8, направленного вниз) структуры В. При этом используется “старая” гистограмма системы А, в которой элементы сдвигаются (т.к. при добавлении спина придется учитывать энергию взаимодействия нового спина с соседями системы А) на величину изменения энергии по вертикали и намагниченности по горизонтали так как это продемонстрировано на рис. 4. Это же надо проделать для всех возможных состояний граничных спинов системы В. Можно, например, условно разделить полученные гистограммы структуры А на 4 группы: в 1-й содержатся гистограммы, соответствующие конфигурациями с $s_7=+1$ и $s_5=+1$, во 2-й - $s_7=+1$ и $s_5=-1$, в 3-й - $s_7=-1$ и $s_5=+1$, в 4-й $s_7=-1$, $s_5=-1$. Для случая $s_8=+1$ все элементы гистограмм 1-й группы сместятся на величины $\Delta E=-2$ и $\Delta M=+1$, а для случая $s_8=-1$ все элементы гистограмм 1-й группы сместятся на величины $\Delta E=+2$ и $\Delta M=-1$. Проделывая это для каждой группы, получим 2^5 матриц с распределением для каждого состояния граничных спинов системы В. Гистограммы системы А можно теперь удалить из памяти.

На третьем шаге добавим к структуре В спин s_2 . Новая структура изображена на рис. 2 и обозначена буквой С. Вновь находим для каждой фиксированной конфигурации внешних спинов гистограмму, используя, матрицы распределений, полученные на предыдущем шаге. В итоге будем иметь 2^6 гистограмм.

На четвертом шаге после добавления спина s_6 получим структуру D в соответствии с рис. 3. Проделываем то же самое, что и в предыдущем этапе и получаем 2^6 новых гистограмм.

На пятом шаге поэлементно сложим все имеющиеся гистограммы. Имеем итоговую матрицу распределений структуры, изображенной на рис. 1. Задача решена.

Заметим, что если бы у нас были периодические граничные условия, то в конце расчета перед операцией поэлементного сложения всех гистограмм, в каждой матрице распределений, соответствующей заданной конфигурации граничных спинов, все элементы сместились бы по вертикали на величину энергии взаимодействия циклически связанных спинов.

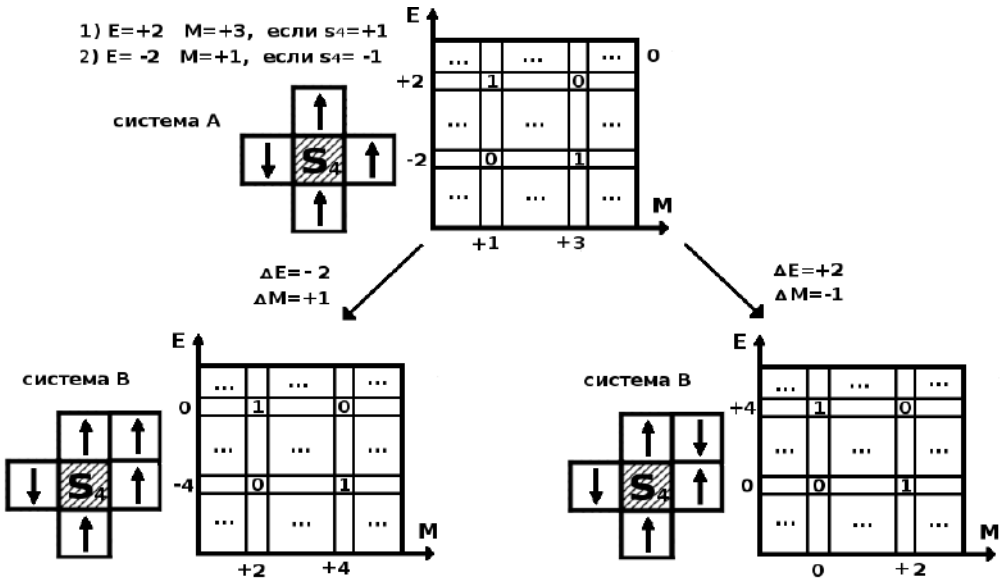


Рис. 4. Процесс получения гистограмм для двух граничных конфигураций системы B с использованием соответствующей гистограммы системы A путем сдвига элементов A на величины добавок к энергии и намагниченности, даваемых спином s_8

Заключение. В рассмотренном примере всего было осуществлено 40 операций изменений конфигураций структур A, B, C, D. Проделано 140 подсчетов энергии взаимодействия одной пары спинов. Если бы мы использовали метод исчерпывающего перечисления, то нам пришлось бы осуществить 2^8 изменений конфигурации и 2304 операций подсчета спинов, т.е. в 16 раз больше.

Невозможно вывести точную аналитическую формулу прироста скорости по сравнению с методом исчерпывающего перечисления, т.к. скорость работы существенно зависит от граничных условий, формы спиновой структуры и объема используемой оперативной памяти. Однако на практике она очень высокая. Например, решетка спинов размерностью 6x6 считается за 900 мс методом последовательного включения на компьютере (на одном ядре) с процессором Intel(R) Core(TM) i5-3210M при частоте 2.5 ГГц. Метод исчерпывающего перечисления занимает 2 ч при тех же вычислительных мощностях. С ростом размеров систем разрыв в скорости многократно увеличивается.

Есть возможность менять параметры работы для достижения максимальной эффективности под каждый конкретный тип задач. Метод нетрудно обобщить на трехмерные структуры. Его можно использовать как при периодических, так и при «оборванных» граничных условиях. Можно добавлять к уже рассмотренному участку не отдельные спины, а кластеры. Алгоритм без труда распараллеливается.

В дальнейшем представляет интерес исследование возможности обобщения метода на решетки других типов, а также возможности еще большего ускорения вычислений. Интересны аспекты его использования при учете взаимодействии спинов второго и более порядков.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Landau D. P., Binder K. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. Cambridge University Press, Cambridge(2000). 384 p.
2. Булавин Л. А., Выгорницкий Н. В., Лебовка Н. И. Компьютерное моделирование физических систем: Учебное пособие. Долгопрудный: Интеллект, 2011. 352 с.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика: Учебное пособие. М.: Физматлит, 2013. 620 с.

РАСЧЕТ В РАМКАХ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА

© Петров А. С., Кузьменко А. П., Хохлов Н. А., 2018

ПЛОТНОСТИ ГЕОМЕТРИИ КЛАСТЕРОВ АЛЮМИНИЯ

А. С. Петров, А. П. Кузьменко, Н. А. Хохлов

ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет»
г. Курск, e-mail: petr0v-a-s@yandex..ru

В работе приведены результаты расчетов геометрии кластеров алюминия Al_n (n=2-8) и их энергий диссоциации с использованием программного пакета Abinit в рамках теории функционала плотности. Обменно-корреляционное взаимодействие учтено в рамках обобщенного градиентного приближения. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Предсказано, что кластер Al_8 имеет три структуры соответствующие глобальному минимуму энергии с различной конфигурацией атомов. Обсуждается возможность различения таких конфигураций экспериментально по их поведению в электрическом и/или в магнитном поле с учетом их различных электрических и магнитных свойств.

Задача определения геометрии кластеров является сложной и до сих пор в основном не решенной и теоретически и экспериментально. Сложность теоретического исследования в частности обусловлена наличием большого количества локальных минимумов энергии для кластеров с более чем пятью атомами. Число локальных минимумов может зависеть также от используемых потенциалов (псевдопотенциалов) и например для взаимодействия Леннарда–Джонса число локальных минимумов для кластеров с числом атомов n>6 имеет порядок $2.7^{(n-5.6)}$ [1,2].

Металлические кластеры привлекают внимание исследователей своими уникальными, по сравнению с кристаллами (нанокристаллами), свойствами. Они могут быть использованы как высокоэффективные катализаторы (поскольку имеют огромное значение удельной поверхности), как строительные блоки для электронных устройств, в качестве функциональных наноразмерных материалов. Так в работе [3] описана возможность применения кластеров алюминия как катализатора при получении водорода из воды или спирта. Также возможно использовать их в таких процессах, как лазерная абляция и магнетронное распыление [4]. Известны теоретические и экспериментальные результаты исследований гомоядерных двухатомных кластеров металлов (Al_2) [5-7]. Несмотря на простоту кластеров некторые теоретические расчеты противоречат друг другу и экспериментальным данным.

Расчеты характеристик кластеров проводились в рамках теории функционала плотности (ТФП) [8–10]. В ТФП ядра входящие в состав рассматриваемой системы, считаются неподвижными (приближение Борна–Оппенгеймера). Квантовое описание при этом сводится к уравнению Шредингера для системы *N* электронов. В ТФП предполагается (в отсутствии магнитного поля), что состояние многоэлектронной системы может быть описано электронной плотностью. В приближении Хартри–Фока электронная плотность взаимно однозначно соответствует волновой функции системы. Тогда, и все наблюдаемые величины многоэлектронного состояния однозначно соответствуют электронной плотности, и должны быть функционалами от этой функции. Если такой функционал определен, то энергия основного состояния, как и электронная плотность могут быть определены в результате решения уравнений Кона–Шэна (записанных в виде уравнений Шредингера) для независимых частиц. Самосогласованная система уравнений Кона–Шэна может быть решена методом итераций. Обычно используется разложение волновых функций по базису плоских волн. Твердое тело – кристалл, в этом случае, считается бесконечным. Параметры элементарной ячейки кристалла и координаты ядер варьируются для определения минимума энергии. При моделировании кластера, элементарная ячейка выбирается достаточно большой для исключения взаимодействия с такими же кластерами расположенными в соседних ячейках.

Численные расчеты проводились с использованием программного пакета ABINIT (v. 8.4.4), международного проекта Université Catholique de Louvain, Corning Incorporated и других [11-13]. ABINIT распространяется на условиях открытого лицензионного соглашения GNU.

Это соглашение позволяет свободно использовать, копировать, модифицировать и распространять соответствующие программы. Для расчетов изолированных кластеров была задана ячейка в форме куба со стороной 12 Å, энергия обрезания базиса плоских волн 18 Хартри. Использваны оптимизированные псевдопотенциалы, разработанные Д. Р. Хаманном [14]. Для оптимизации геометрии кластеров использовался алгоритм минимизации Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шанно [15]. Число энергетических зон, для которых вычислялись волновые функции и соответствующие собственные значения, равнялось 16 для кластера Al_8 (псевдопотенциал с тремя валентными электронами).

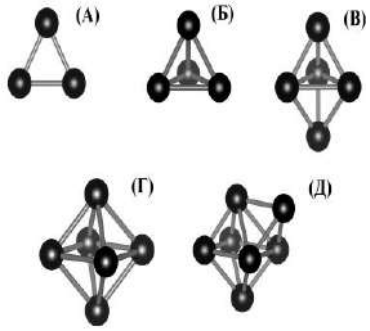


Рис. 1. Геометрические структуры для кластеров Al_n *(n=3-7)*

На рис. 1,2 Представлены геометрии рассчитанных кластеров Al_n *(n=3-8).*

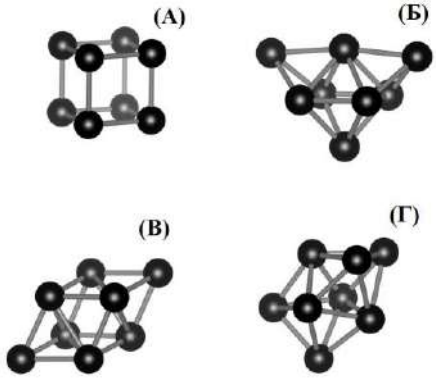


Рис. 2. Геометрические структуры, полученные для кластеров Al_8 показаны четыре структуры соответствующие локальным минимумам энергии (е – и)

Рассчитанные параметры кластеров алюминия Al_n, сравниваются с экспериментальными данными [16-18] в табл. 1. Приведена также энергия диссоциации для кристаллов ($Al_{кр}$), рассчитанная по энтальпии формирования газовой фазы из кристалла при T=0 K из [19].

Таблица 1

Параметры кластеров алюминия Al_n

	Метод	Al_2	Al_3	Al_4	Al_5	Al_6	Al_7	Al_8	$Al_{кр}$
D_e(эВ/n)	Наш расчет	0.99	1.55	1.65	1.85	2.12	2.26	2.28	3.32
	Расчет [17]	0.83	1.39	1.61	1.80	2.07	2.16	2.16	
	Эксп. [16]	0.68	1.25						3.37
R_e (Å)	Наш расчет	2.46	2.60	2.74	2.69	2.73	2.60	2.65	2.91
	Расчет [17]	2.71	2.52						
	Эксп. [18,19]	2.7							2.86

В результате анализа полученных данных установлено, что D_e, монотонно растет с увеличением размера кластера n. Величина R_e при n=8 отличается от соответствующей

величины в кристалле менее чем на 10%. D_e растет значительно медленнее, при n=8 достигая 67% от соответствующего значения для кристалла алюминия. Для кластеров с n=8 характерно наличие локальных минимумов энергии для конфигураций Рис. 1(а–в), при этом для алюминия кубическая конфигурация (а) несколько выше по энергии (на 0.18 эВ) чем конфигурации (б-г) которые имеют равные энергии.

Таким образом, проведенные нами расчеты энергетических характеристик и геометрий малых кластеров Al_n ($n=2-8$) рамках ТФП дали хорошо согласующиеся с экспериментальными данными результаты. Найденные нами геометрии кластера Al_8 позволяют объяснить существенные расхождения между результатами других авторов и экспериментальными данными.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Chekmarev S. F./ Phys. Rev. 2001 Vol. E64, P. 36-42.
2. Rene´ Fournier* / Trends in Energies and Geometric Structures of Neutral and Charged Aluminum Clusters† J.// Chem. Theory Comput. , 2007, Vol. 3, No. 3. P. 921-929.
3. William Henry Hunter Woodward / Aluminum Cluster Anion Reactivity: Applications in Energetic Materials and Catalysts // A Dissertation in Chemistry 2011 .
4. Xirouchaki C., Palmer R.E./ Deposition of size-selected metal clusters generated by magnetron sputtering and gas condensation: a progress review// Philos Trans A Math. Phys. Eng Sci. 2004. V. 362(1814) . C. 117-124
5. Mildred Dresselhaus, Gene Dresselhaus, Phaedon/ Reactivity of Aluminum Clusters with Water and Alcohols: Competition and Catalysis / J.Phys. Chem. Lett. 2012. Vol. 3(24). P. 3818-3821.
6. Kant A., Lin S.S./ Dissoziationsenergien von homonuklearen, zweiatomigen Molekülen der Seltenen Erden //Monatsh. Chem. 1972. Vol.103. P. 757-777.
7. Huber K. P., Herzberg G./ Molecular Spectra and Structure, IV. Constants of Diatomic Molecules // New York. 1979 689 PP.
8. В. Кон./ Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности. УФН 98, №3, 2002, стр. 336
9. P. Hohenberg and W. Kohn./ Inhomogeneous Electron Gas. 1964 Phys. Rev. 136, B864.
10. Richard M. Martin./ Electronic Structure. Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press. 2004 642 pp.
11. Gonze X., Beuken J.-M, Caracas R., et al // Computational Materials Sci-ence 25, 2002, p. 478 9 Gonze X., Rignanese G.-M., Verstraete M., et al // Zeit. Kristallogr. 220, 2005, p. 558
12. Lenovese M., Neelov A., Goedecker S., et all // http://arxiv.org, arXiv:0804.2583.
13. Generalized Norm-Conserving pseudopotentials, D. R. Hamann, Phys. Rev. B 40, 2980 (1989);
14. D. R. Hamann / Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials // Department of Physics and Astronomy, Rutgers University, Piscataway, NJ 08854-8019 and Mat-Sim Research LLC, P. O. Box 742, Murray Hill, NJ, 07974
15. John D.Head1Michael C.Zerner / A Broyden—Fletcher—Goldfarb—Shanno optimization procedure for molecular geometries // Chemical Physics Letters 1985, Vol. 122, P . 264-270.
16. Khojasteh M., Kresin V.V./ Influence of source parameters on the growth of metal nanoparticles by sputter-gas-aggregation // Applied Nanoscience. 2017 Vol. 7. P. 875-883.
17. Kiohara V. O., Carvalho E.F.V., Paschoal C.W.A., Machado F. B.C., Roberto-Neto O./ DFT and CCSD(T) electronic properties and structures of aluminum clusters: Al xn (n = 1–9, x = 0, ±1) // Chem. Phys. Lett. 2000. Vol. 8. P. 95-101.
18. Zhenwen Fu, George W. Lemire, Gregory A. Bishea, and Michael D. Morse / Spectroscopy and electronic structure of jet-cooled AI2 // J. Chem. Phys. 1990. Vol. 93(12). P .1748-1759.
19. Wagnman D.D., Evans W.H, Parker V.B., et al./ Selected values of chemical thermodynamic properties// U.S. Department of commerce national bureau of standards. 1969. 144 PP.

ПОСТРОЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЕЙ ТЕПЛОВЛАГООБМЕНА В ВОЗДУШНОМ ПОТОКЕ НА СЛОЖНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

В. Ф. Ульянычева[1], Н. В. Ульянычев[2]

[1]ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
[2]ФГБУН «Дальневосточный научный центр физиологии и патологии дыхания»
г. Благовещенск, e-mail: nikolaj287@gmail.com

Исследуется методика расчета тепловлагообмена в воздушном потоке, обтекающем влажные поверхности различных геометрических форм (плоскость, труба и поперечное обтекание трубного шахматного пучка).

Введение. Изучение системы внешнего дыхания человека приводит к созданию новых более совершенных моделей процессов, протекающих в ней. Одной из подсистем внешнего дыхания является тепловлагообмен. Существующие модели тепломассообмена в дыхательных путях человека не учитывают всей сложности геометрии поверхности, через которую идет передача теплоты. Тем более что вычислительные мощности современной компьютерной техники позволяют создавать более достоверные модели процессов в сложных биологических системах, в частности, в дыхательных путях человека. Для того, чтобы оценить вклад геометрических характеристик поверхностей, обтекаемых воздушной смесью при тепломассопереносе, рассматриваются случаи обтекания воздушной смесью плоской пластины, трубки, и поперечного обтекания шахматного пучка трубок.

Тепловлагообмен воздушного потока, движущегося вдоль плоской пластины, покрытой тонким слоем влаги. Для изучения влияния геометрии обтекаемой поверхности на температуру и концентрацию водяных паров в воздушной смеси были рассмотрены различные случаи тепломассопереноса. Рассмотрим случай обтекания воздушным потоком плоской пластины, покрытой тонким слоем воды (будем считать, что влага при испарении мгновенно восполняется, как это происходит на стенке дыхательных путей человека).

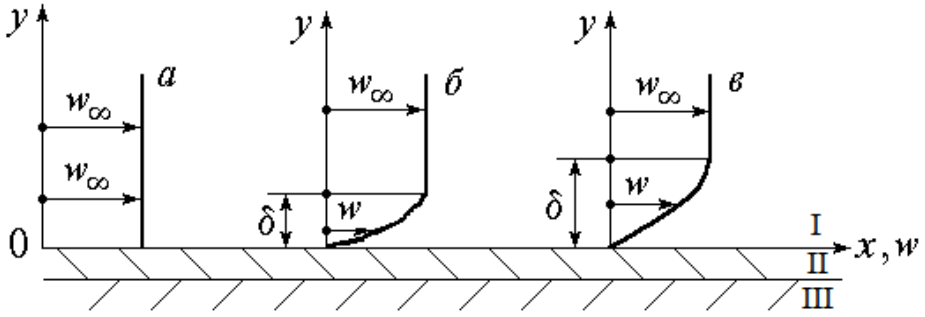


Рис. 1. Обтекание пластины

Рассмотрим, как на поверхности обтекаемой пластины формируются динамический и тепловой пограничные слои.

На рис. 1 изображены 3 среды: I – воздушный поток; II – тонкий слой воды; III – абсолютно твердая пластина. Воздушная смесь движется вдоль оси x.

Пусть у передней кромки пластины $x = 0$; профиль скоростей равномерный, т.е. в каждой точке пространства над пластиной в этом поперечном сечении скорость везде одинакова и равна скорости w_∞ набегающего потока (рис. 1, а).

На данный момент является общепринятой «гипотеза прилипания», по которой молекулы газа ближайшие к поверхности тела прилипают к ней, их скорость считается равной нулю. Межмолекулярные силы способствуют тому, что более удаленные от поверхности слои потока испытывают тормозящее действие с ее стороны, так что их скорость и становится

© Ульянычева В. Ф., Ульянычев Н. В., 2018

меньшей, чем w_∞ (рис. 1, б, в). Чем дальше отстоит сечение потока от передней кромки, тем глубже в поток проникает тормозящее действие стенки и тем больше становится толщина динамического пограничного слоя δ. Под величиной δ понимается такое расстояние по нормали к точке на обтекаемой поверхности, на котором скорость w мало отличается от скорости невозмущенной части течения w_∞ (точнее говоря, отличается на наперед заданную малую величину).

Очевидно, что нет принципиальных ограничений на величину δ, она может стать сколь угодно большой.

Детальное рассмотрение внешнего обтекания пластины потоком газа показывает, что, начиная от передней кромки, сначала формируется ламинарный пограничный слой, который затем, ниже по течению, становится неустойчивым, «разваливается». При этом движение в пограничном слое, начиная с расстояния от передней кромки, равного $x = x_{кр}$, соответствует чередующимся во времени и в пространстве ламинарному и турбулентному течениям – так называемая, переходная область течения. За ней течение на пластине становится турбулентным. Для практических приложений переходная область течения условно стягивается в точку, и таким образом полагают, что на пластине имеются лишь участки ламинарного и турбулентного течений.

Тепломассоперенос в воздушном потоке, движущемся внутри трубки. Иначе формируются скоростные и температурные поля во внутренней задаче, под которой понимаются исследование развития течения и теплообмена при движении потока, со всех сторон стесненного ограничивающими его поверхностями, т.е. при его движении в каналах (трубах) с различной формой поперечного сечения.

Рассмотрим, как в круглой трубе формируется динамический пограничный слой.

Пусть во входном сечении трубы $x = 0$ профиль скоростей равномерный, так что в этом сечении скорость везде одинакова и равна средне расходной скорости w_0 (рис. 2, а).

Чем дальше отстоит сечение потока от входного, тем глубже в поток проникает тормозящее действие стенки и тем большей становится толщина динамического пограничного слоя δ (рис. 2, б). Отметим, что скорость $w_{0,1} > w_0$, так как расход газа через трубу неизменен в любом сечении. На расстоянии от входа, равном $(L/d)_{г,стаб}$, пограничный слой смыкается на оси трубы, т.е. его толщина становится равной ее радиусу – $\delta = d/2$. Дальнейшее увеличение δ невозможно и вследствие этого на расстоянии $(L/d)_{г,стаб}$ сформировался стабилизированный профиль скорости в потоке, который не изменяется в его более удаленных от входа в трубу сечениях.

На начальном участке трубы непосредственно у входа в нее толщину и ламинарного, и турбулентного динамического пограничного слоя можно определить по приведенным выше формулам для обтекания пластины. Однако по мере удаления от входа приходится использовать специальные зависимости, учитывающие разгон ядра потока на участке, предшествующем гидродинамической стабилизации, влияние градиента давления и кривизны стенки канала. На участке стабилизированного турбулентного течения, используя формулу Г. Рейхардта для профиля скорости в поперечном сечении канала, можно получить толщины вязкого и буферного подслоя.

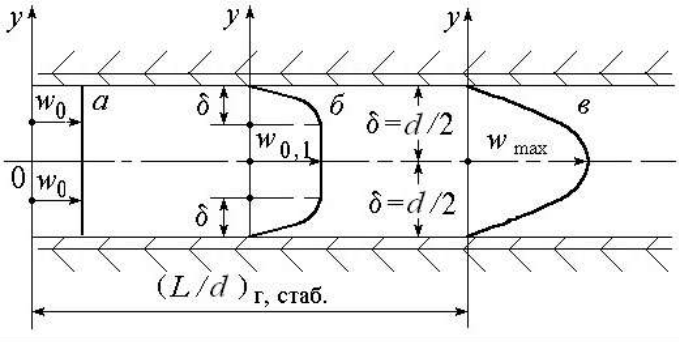


Рис. 2. Поток в трубке

Тепловлагообмен при обтекании ворсинок реснитчатого эпителия на основе модели трубных пучков. Расположение ворсинок реснитчатого эпителия соответствует модели шахматного трубного пучка (рис. 3).

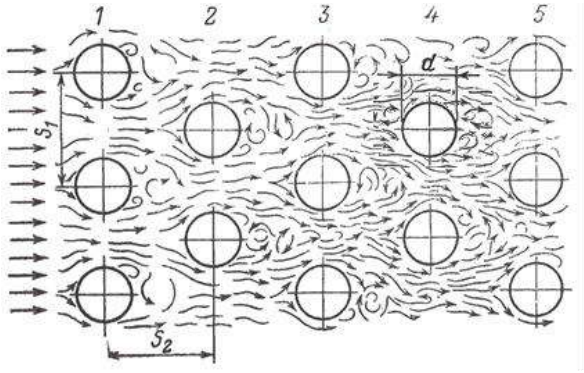


Рис. 3. Обтекание ворсинок

В них трубы первого ряда находятся приблизительно в тех же условиях, что и одиночный цилиндр. На теплообмене второго ряда сказывается турбулизация потока, создаваемая первым рядом, и т.д., но этот эффект постепенно ослабевает по мере увеличения числа предшествующих поперечных рядов. Экспериментально установлено, что начиная с третьего ряда поток практически стабилизируется, поэтому и средний коэффициент теплоотдачи для всех последующих рядов можно считать постоянной величиной. Коэффициент теплоотдачи первого ряда составляет приблизительно 60 % от стабилизированных значений коэффициентов теплоотдачи α_3 для шахматного пучка. Для второго ряда – 70% от α_3.

На интенсивность теплообмена пучков влияет также плотность пучка, которую можно характеризовать соотношениями между поперечным шагом s_1, продольным шагом s_2 и диаметром труб (рис. 3).

Стабилизированный коэффициент теплоотдачи для многорядных в продольном направлении пучков труб в диапазоне $\mathrm{Re} \in [1; 100] \cdot 10^3$ определяется по формулам:

$$\mathrm{Nu} = 0{,}41 \mathrm{Re}^{0{,}6} \mathrm{Pr}^{0{,}33} C_t C_s ,$$

где $C_s = (s_1 / s_2)^{1/6}$ при $s_1 / s_2 < 2$ и $C_s = 1{,}12$ при $s_1 / s_2 \geq 2$.

В числа Nu и Re введены в качестве характерного размера наружный диаметр труб d, в качестве характерной скорости – скорость w_0 в самом узком поперечном сечении между трубами, а все теплофизические параметры отнесены к средней температуре потока.

Средний коэффициент теплоотдачи к пучку из m труб определяется по формуле

$$\overline{\alpha} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i .$$

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Гебхарт Б., Джалурия Й., Махаджан Р. Свободноконвективные течения, тепло- и массообмен. Мир, 1991.
2. Олейник О. А. Математические задачи теории пограничного слоя // Успехи математических наук. – 1982. № 3. С. 3-65.
3. Цирельман Н. М. Теория и прикладные задачи тепломассопереноса. Уфа, 2002.
4. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М: Наука, 1974.
5. Эккерт Э. Р., Дрейк Р. М. Теория тепло- и массообмена. М.: Государственное энергетическое издательство, 1981.

ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ ФОСФОРА В СИЛИЦЕНЕ КАК КВАНТОВЫЕ КУБИТЫ ДЛЯ БУДУЩИХ КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ

А. Н. Чибисов, М. А. Чибисова

ФГБУН «Вычислительный центр» ДВО РАН
г. Хабаровск, e-mail: andreichibisov@yandex.ru

В работе теоретически исследовано равновесная ориентация спинов кубитов фосфора в 2D и объемной фазе кремния. Подтверждено наличие обменного взаимодействия между кубитами приводящее к изменению локализации волновых функций, причем в случае силицена данное взаимодействие сильнее.

Проблема практической реализации квантовых компьютеров является важной научной и технологической задачей современности. Квантовый компьютер позволит мгновенно решать такие важные задачи как проектирование современных материалов с заданными свойствами, создание новых видов лекарств, новых видов криптошифрования, а так же кардинально улучшить работу систем машинного обучения и искусственного интеллекта. На протяжении последних 15 лет различные исследовательские группы пытаются активно изучить и сконструировать квантовый точечный кубит на основе спина в кремнии [1]. Некоторые используют технологическую схему предложенную еще Кейном (Kane) в 1998 году [2]. Согласно данной схеме кубиты формируются из долгоживущих ядерных спинов одиночных примесей фосфора в кристалле Si и управляются внешними поверхностными радиочастотными, магнитными и электрическими полями. Спиновые состояния электрона, связанного с одним донором фосфора в кремнии, показывают долгое время согласованности и релаксации. Затем впервые в работе Марелло [3] было сообщено о возможности считывания ориентации спина электрона в кремнии. Это позволило дать дальнейший мощный толчок для активного исследования ориентаций спинов в кремнии [4]. Далее была разработана численная модель для исследования электрон-спинового переноса через доноры в кремнии [5]. Авторы показали, что наблюдаются удивительные эффекты, которые возникают из-за квантования ядер-доноров фосфора. Они показали, как возможно отобразить электронно-обменное-взаимодействие с использованием простых транспортных измерений. Так в работе [6], была продемонстрировано работа одно- и двухкубитовых операций в квантовой точечной системе, использующей обменное взаимодействие. По самым последним данным исследователи пытаются достичь контролируемого перекрытия волновой функции для высокоточного считывания спинов на каждом кубите. Так в работе [7] были получены антикоррелированные спиновые состояния между двумя донорскими спин-кубитами в кремнии расположенными на расстоянии 16 ± 1 нм. Авторы показали, что обменное взаимодействие может быть «включено» и «выключено» с помощью электрического поля управляющего двумя атомами фосфора. Однако вопрос остается не решенным до конца. Поэтому данная работа посвящена моделированию квантового кубита на основе материала кремния с внедренными атомами фосфора. Поскольку на основе данного кубита может быть построен будущий квантовый компьютер. Для формирования физических основ работы квантово компьютера необходимо исследовать модельную систему на основе материала кремния с внедренными примесными атомами фосфора, необходимо точно описать закономерности поведения примесных атомов фосфора в матрице кремния. Результаты позволят получить точные данные по квантованию и передачи квантовой информации посредством спинов.

Построение атомных моделей объемного кремния и силицена, а также расчет их полных энергий выполнялись с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO [8], с применением высокопроизводительных вычислений. PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) псевдопотенциалы для атомов кремния и фосфора, в обобщенно–градиентном приближении (GGA) с учетом спин-орбитального неколлинеарного взаимодействия взяты из пакета Quantum ESPRESSO. Расчет элементарной ячейки объемного кремния производился с учетом 8×8×8 k–точек. При расчете характеристик силицена использовался специальный набор k–точек 9×9×1 с энергией обрезания плоских волн 476.2 эВ. Равновесная модель силицена получалась путем свободной

© Чибисов А. Н., Чибисова М. А., 2018

релаксации всех атомов структуры. Для этого 32-х атомная модель помещалась в ячейку объемом 15.467×15.467×12.490 $Å^3$. Атомная релаксация проводилась до значения межатомных сил 0.026 эВ/Å.

При внедрении одного атома фосфора (обозначим его как 1P) в решетку объемного кремния для спина избыточного электрона атома P наблюдается ориентация «up» (см. рис 1). Добавление второго примесного атома фосфора (обозначим его как 2P), на расстоянии порядка 11 Å от первого, приводит к изменению ориентации спина кубита 1P (см. рис. 2). Он поворачивается на углы (θ, φ) = (24°; -160°) (согласно обозначениям в сфере Блоха [9]). Второй внедренный атом фосфора тоже имеет соответствующую ориентацию равную (θ, φ) = (42°; -22°). На рис. 3 представлена вероятность $|\psi|^2$ локализации избыточных двух электронов для случая одновременного наличия кубитов 1P и 2P в решетки кремния.

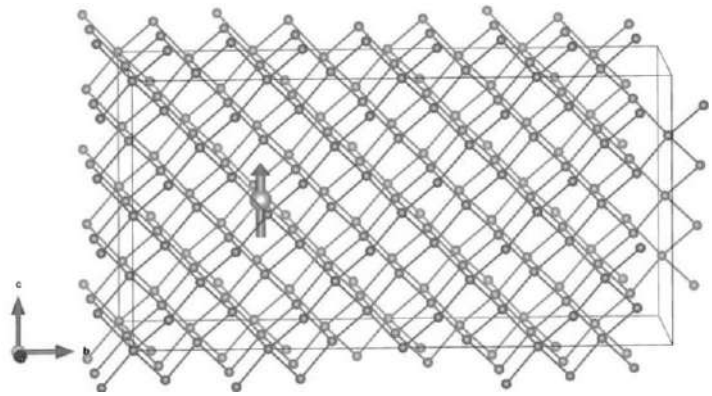


Рис. 1. Ориентация спина избыточного электрона атома P (для случая 1P)

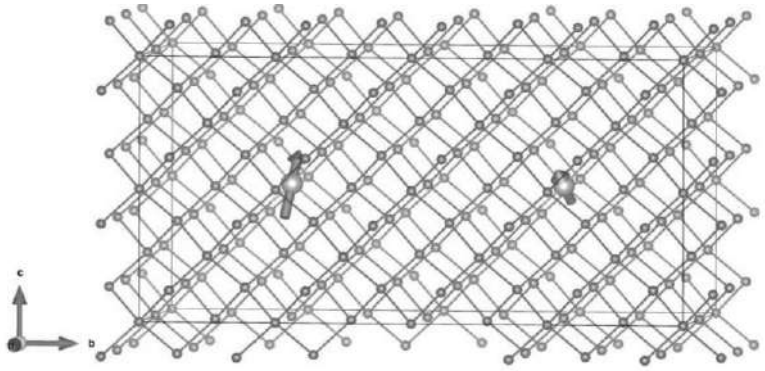


Рис. 2. Ориентация спинов избыточных электронов для атомов 1P (слева) и 2P (справа)

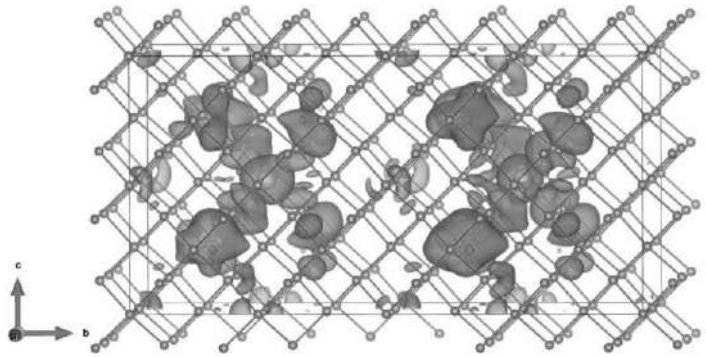


Рис. 3. Плотность $|\psi|^2$ локализации избыточных двух электронов для случая одновременного наличия кубитов 1P и 2P в решетки кремния

Затем, мы рассчитали равновесную структуру чистого силицена. Беспримесный силицен имеет следующие геометрические параметры (для двухатомного базиса): a = b = 3.867 Å, межатомное расстояние Si-Si равно 2.270 Å, а параметр гофрированности составил d = 0.410 Å. Данные параметры хорошо согласуются с литературными данными: a = b = 3.884 Å; d(Si-Si) = 2.280 Å [10]. Внедрение атома P в структуру силицена (в концентрации 1/32) приводит к ее сильному искажению. Длина связи немного увеличивается по сравнению с чистым силиценом и в среднем составляют Si-Si ≈ 2.275 Å, Si-P ≈ 2.285 Å. Внутренний угол для силицена модифицированного примесным атомом фосфора θ_{SiPSi} существенно уменьшился и составил примерно 109.6° . В чистом силицене угол θ_{SiSiSi} в среднем равнялся 116.8°. При внедрении одного атома фосфора (1P) в решетку силицена для спина электрона P также наблюдается ориентация «up». Добавление второго примесного атома фосфора (2P), на расстоянии порядка 15.467 Å от первого, также приводит к изменению ориентации спина кубита 1P как и в объемном материале. В данном случае спин кубита 1P поворачивается на углы (θ, φ) = (43°; 95°) (см. рис. 4). Для второго внедренного атом фосфора ориентацию равна (θ, φ) = (120°; -85°).

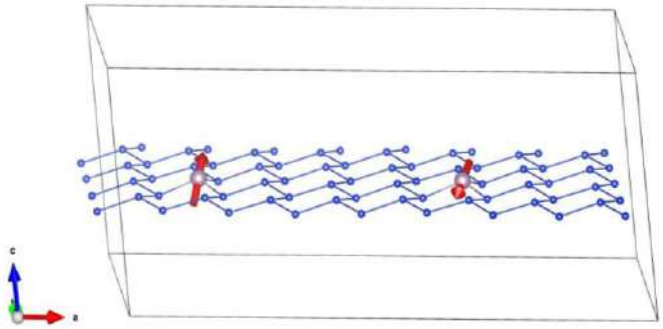


Рис. 4. Ориентация спинов избыточных электронов для атомов 1P (слева) и 2P (справа) в случае силицена

Таким образом, между двумя кубитами 1P и 2P существует обменное взаимодействие, приводящее к изменению локализации волновых функций, ориентации спинов и локальному распределению зарядовой плотности. Причем в случае 2D модификации кремния – силицена это взаимодействие сильнее, поскольку происходит большее отклонение направлений спинов кубитов от равновесных ориентаций. Мы уверенны, что полученные результаты имеют перспективное значение для использования их в технологии проектирования кубитов для будущих квантовых компьютеров.

Благодарности. *Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Министерства образования и науки Хабаровского края в рамках научного проекта № 117/2018Д. Расчеты произведены с использованием вычислительных кластеров ВЦ ДВО РАН (г. Хабаровск) и частично на кластерах МГУ (г. Москва), Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН (г. Иркутск).*

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Oberbeck L., Hallam T., Curson N. J., Simmons M. Y., Clark R. G.. // Applied Surface Science. Vol. 212-213. 2003. P. 319-324.
2. Kane B. E. // Nature. Vol. 393. 1998. P. 133
3. Andrea Morello // Nature. Vol. 467. 2010. P. 687-691.
4. Pla, J. J. et al. // Nature. Vol. 489. 2012. P. 541-545.
5. Gorman S. K., Broome M. A., Baker W. J., Simmons M. Y. // Physical Review B. Vol. 92. 2015. P. 125413 Veldhorst M. // Nature. Vol. 526. 2015. P. 410-414.
6. Broome M. A. et al. // Nature Communications. Vol. 9. 2018. 980.
7. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G. L., Cococcioni M., Dabo I., Dal Corso A., S. de Gironcoli, Fabris S., Fratesi G., Gebauer R., Gerstmann U., Gougoussis C., Kokalj A., Lazzeri M., Martin-Samos L., Marzari N., Mauri F., Mazzarello R., Paolini S., Pasquarello A., Paulatto L., Sbraccia C., Scandolo S., Sclauzero G., Seitsonen A. P., Smogunov A., Umari P., Wentzcovitch R.M. Quantum espresso: a modular and opensource software project for quantum simulations of materials // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. Vol. 21.

ОСТАТОЧНАЯ ЭНТРОПИЯ СПИНОВ ИЗИНГА НА РАЗБАВЛЕННОЙ РЕШЕТКЕ ПИРОХЛОРА ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Ю. А. Шевченко[1], К. В. Нефедев[1,2]

[1]ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет»
[2]ФГБУН «Институт прикладной математики» ДВО РАН
г. Владивосток, E-mail: shevchenko.ya@dvfu.ru

Методом полного перебора получены данные об остаточной энтропии для спинов Изинга расположенных на единичной ячейке решетки пирохлора (N=16) с учетом всех возможных конфигураций разбавления. С высокой точностью показано, что энтропия испытывает пики только при целочисленных значениях поля исчезает при значении h/J=18.

Решетка пирохлора представляет собой трехмерную структуру (рисунок 1), в которой спины Изинга расположены на вершинах тетраэдров. Все вершины принадлежат одновременно двум тетраэдрам, благодаря чему решетка проявляет свойства фрустрированного магнетика, а конфигурации спинов тетраэдра в основных состояниях подчиняются правилу льда: два спина направлены внутрь, два наружу. Так как число возможных конфигураций системы увеличивается как 2^N, где N – число спинов, то исследование больших систем ограничено вычислительной мощностью. За основу данной работы взята единичная ячейка пирохлора с $N = 16$ спинов и периодическими граничными условиями, при которых у каждого спина будет строго 6 соседей.

Рассматривается антиферромагнитная модель Изинга с взаимодействием ближайших соседей. Гамильтониан имеет вид [1]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} c_i c_j \sigma_i \sigma_j - \sum_i \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{d}_{\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{i})}\, c_i \sigma_i, \qquad (1)$$

где $\boldsymbol{h}$ – внешнее магнитное поле, $J(< 0)$ – эффективное антиферромагнитное взаимодействие, $\sigma_i = \pm 1$ – спины изинга. Единичные векторы $\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{i})}$ представляют локальные легкие оси решетки пирохлора, и определяются как $\boldsymbol{d}_{\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{i})} = \{\boldsymbol{d_0}, \boldsymbol{d_1}, \boldsymbol{d}_2, \boldsymbol{d_3}\}$, где $d_0 = (1,1,1)/\sqrt{3}$, $d_1 = (1,-1,-1)/\sqrt{3}$, $d_2 = (-1,1,-1)/\sqrt{3}$, и $d_3 = (-1,-1,1)/\sqrt{3}$. Так как магнитное поле $\boldsymbol{h}$ направлено вдоль [111] направления, то значение $\boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{d}_{\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{i})}$ равно h для спинов, сонаправленных с полем ($\boldsymbol{d_0}$), и $-(1/3)h$ для всех остальных. В элементарной ячейке пирохлора всего 4 спина $\boldsymbol{d_0}$. Множитель c_i принимает значение 1 либо 0 и отвечает за разбавление образца, концентрация разбавления обозначена как x.

В исследовании рассматриваются все возможные варианты разбавления (пермутации) для систем с отсутствующими 0, 1, 2, …, 15 спинами. Для каждой из пермутаций перечисляются все возможные конфигурации значений спинов, вычисляется энергия и производится поиск состояний с минимальной и максимальной энергией, и кратность вырождения этих энергетических уровней $G(E_{max})$ и $G(E_{min})$, соответственно.
Остаточная энтропия определяется как:

$$S = \ln G(E_{max}) - \ln G(E_{min}). \qquad (2)$$

Значения остаточной энтропии усреднены для каждого возможного значения x. На рисунке 2 показана зависимость усредненной остаточной энтропии от значения поля. Отчетливо видны пики остаточной энтропии для целочисленных значений поля, кратных трём. Поведение остаточной энтропии при $h = 0$ в зависимости от концентрации разбавления совпадает с аналитическим решением Полинга [2], и результатами моделирования Ванга-Ландау [3]. Поля пиков остаточной энтропии совпадают с плато намагниченности, показанными в работе [4].

© Шевченко Ю. А., Нефедев К. В., 2018

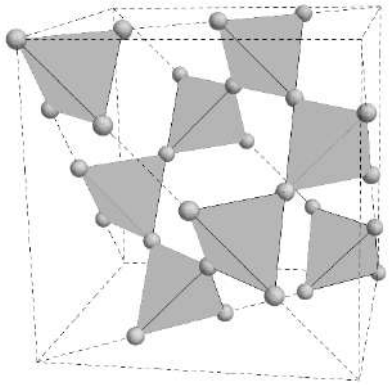


Рис. 1. Схематичное изображение спинов Изинга на единичной ячейке решетки пирохлора. Спины отмечены желтыми шарами. Граничные спины единичной ячейки продублированы с противоположных сторон куба для наглядности

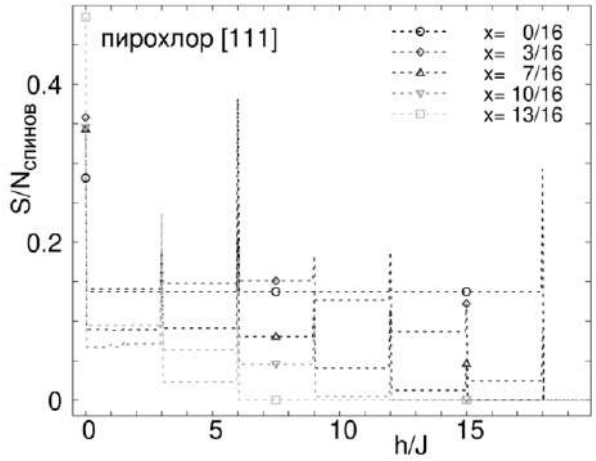


Рис. 2. Зависимость остаточной энтропии от внешнего поля, приложенного в направлении [111], для спинов Изинга на решетке пирохлора

Детальный анализ магнитных конфигураций показал, что пики возникают из-за возникновения баланса между энергией зеемана и обменным взаимодейсвием. Из канонического распределения Гиббса следует, что самой вероятной конфигурацией при $T \to 0$ является конфигурация с минимальной возможной энергией. Физический смысл остаточной энтропии заключается в том, что ее значение возрастает при увеличении числа конфигураций с минимальной возможной энергией. При $h = 0$ и $x = 0$, в системе присутствует множество конфигураций с минимально возможной энергией, и во всех конфигурациях спины в тэтраэдрах подчиняются правилу льда. При увеличении поля даже на бесконечно малую величину, увеличивается энергия конфигураций, в которых спины направлены против поля, и уменьшается для спинов по полю. Таким образом, существенно уменьшается кратность вырождения основного состояния и как следствие, значение остаточной энтропии.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Isakov S. V. et al. Magnetization curve of spin ice in a [111] magnetic field // Physical Review B. 2004. Т. 70. №. 10. С. 104418.
2. Ke X. et al. Nonmonotonic zero-point entropy in diluted spin ice // Physical review letters. 2007. Т. 99. № 3. С. 137203.
3. Shevchenko Y., Nefedev K., Okabe Y. Entropy of diluted antiferromagnetic Ising models on frustrated lattices using the Wang-Landau method // Physical Review E. 2017. Т. 95. №. 5. С. 052132.
4. Peretyatko A., Nefedev K., Okabe Y. Interplay of dilution and magnetic field in the nearest-neighbor spin-ice model on the pyrochlore lattice // Physical Review B. 2017. Т. 95. №. 14. С. 144410.

Секция «Физика конденсированных сред»

ОБРАТНЫЙ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В КОМПОЗИТАХ НА ОСНОВЕ БОРАТА ЖЕЛЕЗА

М. Е. Адамова, Е. А. Жуков, А. В. Каминский

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: Ak13636@mail.ru

Рассмотрена модель двухслойного композита $FeBO_3$-PZT. Исследованы колебания доменных границ в кристаллах $FeBO_3$ в поле упругой волны различной поляризации. Снята зависимость смещения доменной границы от амплитуды напряжения, приложенного к пьезоэлектрической фазе композита. Проведены оценки скорости и смещения ДГ в поле упругой волны.

Прогресс в совершенствовании технологий в областях микроэлектроники, информационных систем, сенсорной техники делает актуальной задачу исследования процессов преобразования электрического поля в магнитное и обратно. В этой связи особую значимость приобретает вопрос использования в различных устройствах обработки информации магнитоэлектрического (МЭ) эффекта. Различают прямой и обратный МЭ-эффект. Прямой МЭ-эффект заключается в индуцировании электрической поляризации в материале во внешнем магнитном поле, обратный – в появлении намагниченности во внешнем электрическом поле.

Практическим приложением магнитоэлектрического эффекта может стать управление движением магнитных доменных границ (ДГ) под действием электрического поля. Этот эффект может найти применение в запоминающих устройствах памяти, в которых основным механизмом записи информации является смещение доменной границы. Недостатком этого способа записи информации является необходимость значительных затрат энергии на генерацию импульсов магнитного поля или спинового тока [1, 2]. Снижение энергозатрат на управление движением доменных границ может быть достигнуто на основе использования МЭ эффекта в мультиферроидных композитах.

Мультиферроидные композиты – многокомпонентные структуры, в которых реализуется магнитоэлектрический эффект – открыли новые перспективы создания высокоэффективных устройств микроэлектроники [3, 4, 5]. Комбинация ферромагнитной и пьезоэлектрической фаз дает многообразие эффектов, свойственных как отдельным фазам, так и возникающих в результате их взаимодействия. Основные преимущества композиционных мультиферроиков перед однофазными заключаются в гораздо большей величине МЭ эффекта [6] и в отсутствии температурных ограничений.

В качестве ферромагнитной компоненты обычно применяют материалы с высокой магнитострикцией, т.к. именно магнитострикция вызывает поляризацию пьезоэлектрической фазы за счет пьезоэффекта. Однако, кроме магнитострикции возможен и другой механизм возникновения упругих напряжений в ферромагнитной фазе – генерация упругих колебаний движущейся доменной границей [7, 8, 9]. Кроме того, рассмотрение мультиферроидных композитов с учетом наличия доменной структуры в его компонентах позволяет исследовать МЭ эффект на уровне отдельных доменов и доменных границ [10], что невозможно при рассмотрении только усредненного сигнала.

Для наблюдения обратного МЭ эффекта в динамическом режиме к пьезоэлектрической фазе структуры прикладывают переменное напряжение $U(t)$ и регистрируют изменение напряженности магнитного поля $H(t)$ [11]. Для характеристики величины эффекта

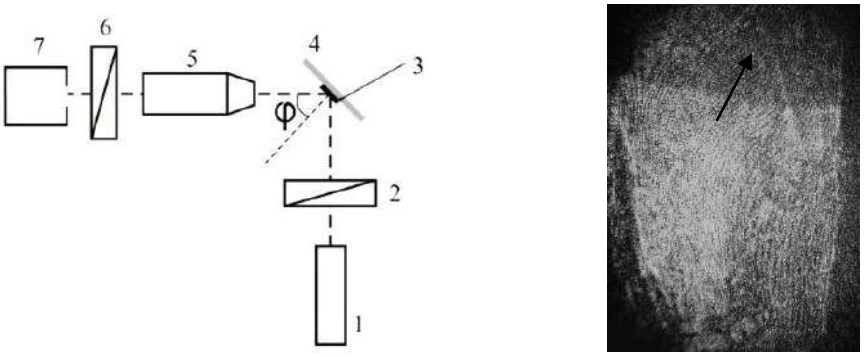
© Адамова М. Е., Жуков Е. А., Каминский А. В., 2018

используют коэффициент обратного МЭ взаимодействия $\alpha_H = H/E$, где $E = U/d$ – напряженность электрического поля, d – толщина структуры.

В настоящее работе экспериментально исследован обратный МЭ эффект в двухслойной структуре $FeBO_3$-PZT. Выбор в качестве пьезоэлектрической компоненты цирконат-титаната свинца (PZT) обусловлен его большим пьезомодулем. Выбор $FeBO_3$ в качестве ферромагнитной фазы обусловлен совокупностью его свойств [12]: сверхбыстрая динамика доменных границ (до 14 км/с), сильная магнитоупругая связь и прозрачность в видимой области спектра, что позволяет использовать для исследования магнитооптический эффект Фарадея.

Описание эксперимента. В исследовании реализованы две модели двухкомпонентного композита, отличающиеся типами упругих напряжений, передаваемых из пьезоэлектрической компоненты в ферромагнитную. В первом случае образец бората железа всей поверхностью наклеен на пьезокерамическую пластину, в нем возникают *продольные по толщине колебаний* (*толщинные)* колебания. Во втором случае образец наклеивался на пьезоэлемент таким образом, что его край оставался свободным. В этом случае возникают *изгибные* колебания. В обоих случаях на пьезокерамический элемент подавалось синусоидальное напряжение *U(t)* с частотами до 100 кГц и амплитудой сигнала до 16 В. Визуализация доменной структуры кристалла бората железа производилось на основе магнитооптического эффекта Фарадея. Излучение от полупроводникового лазера (длина волны 532 нм) с использованием поляризатора преобразовывалось в линейно поляризованное и фокусировалось на поверхности исследуемого образца. При прохождении излучения сквозь образец (или отражении от поверхности образца) происходит поворот плоскости поляризации света, что позволяет получить на экране фотоаппарата изображение доменной структуры образца.

Для исследования первой модели двухкомпонентного композита образец $FeBO_3$ толщиной 40,5 мкм всей поверхностью наклеен на пьезокерамическую пластину. Схема эксперимента приведена на рис. 1, а. В этом случае наблюдение доменной структуры с помощью эффекта Фарадея возможно только на отражение. Для достижения наилучшего контраста доменной структуры проводилась регулировка угла φ между нормалью к поверхности образца и направлением распространения лазерного луча. Изображение статической доменной структуры приведено на рис. 1, б.



а) б)

Рис. 1. а) Схема наблюдения МЭ эффекта с помощью эффекта Фарадея в отраженном свете: 1 – лазер, 2 – поляризатор, 3 – образец $FeBO_3$, 4 – пьезокерамическая пластина, 5 – микроскоп, 6 – анализатор, 7 – фотоаппарат. б) изображение статической доменной структуры, стрелкой показано положение одиночной ДГ

При подаче синусоидального напряжения на пластину пьезокерамики наблюдается «размазывание» доменной структуры, что объясняется колебательным смещением ДГ

относительно положения равновесия. Изображение динамической доменной структуры имеет значительно более низкую контрастность, чем полученное в проходящем свете. Это затрудняет исследование поведения ДГ в динамике. Размеры двухкомпонентного композита таковы, что позволяют поместить его внутри системы из двух катушек, создающих переменное магнитное поле, и исследовать влияние упругих деформаций на динамическую доменную границу.

Для исследования второй модели двухкомпонентного композита образец наклеивался одним краем на пьезоэлемент, так что свободный край образца мог совершать изгибные колебания. В эксперименте использовались пластина пьезокерамики с собственными резонансными частотами 34,3 кГц и 100 кГц и образец $FeBO_3$ толщиной 37,5 мкм и размером 1,5х0,5 мм. Образец бората железа характеризуется рядом собственных резонансных частот, на которых амплитуда изгибных колебаний существенно возрастает. Резонансные частоты для принятой в эксперименте конфигурации составили: 49 – 52 кГц, 58 кГц, 68 кГц, 94 – 96 кГц. Определение резонансных частот пьезокерамической пластины и образца проводилось по методике, предложенной в [13].

Вследствие небольших размеров образца, сравнимых с размером пятна лазерного луча (диаметр ~ 1 мм), зависимостью резонансной частоты от геометрических размеров свободной части пластины образца можно пренебречь. В данной конфигурации доменная структура может быть визуализирована в проходящем через свободный участок образца свете. Оптическая схема эксперимента приведена на рис. 2. Здесь так же, как и в предыдущем случае, проводилась предварительная ориентация образца относительно лазерного луча с целью достижения максимального контраста изображения доменной структуры. В ненапряженном состоянии и в отсутствие градиентных полей доменная структура в образце бората железа представляет собой совокупность доменов в нескольких слоях, параллельных плоскости пластины.

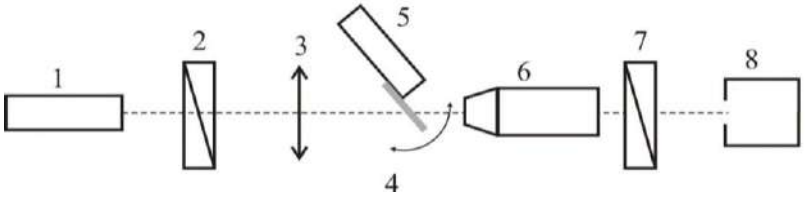


Рис. 2. Схема наблюдения МЭ эффекта с помощью эффекта Фарадея «на просвет»: 1 – лазер, 2 – поляризатор, 3 – собирающая линза, 4 – образец $FeBO_3$, 5 – пьезокерамическая пластина, 6 – микроскоп, 7 – анализатор, 8 – приемник (фотодиод или фотоаппарат)

При колебании образца на резонансной частоте пьезокерамической пластины наблюдается некоторая размазка доменной структуры, что свидетельствует о колебательном характере ее движения. При отклонении частоты напряжения от резонансной частоты пьезокерамической фазы композита доменная граница возвращается в исходное состояние. Таким образом, максимальная амплитуда изгибных колебаний образца, так же как и максимальная амплитуда колебаний ДГ наблюдается на резонансных частотах пьезокерамики. На частоте 34,3 кГц смещение ДГ составило 0,03 мм, что соответствует скорости ДГ около 6,5 м/с [8]. На собственных резонансных частотах образца также происходит смещение положения доменной границы, однако значительно меньшей амплитуды.

Слабый контраст динамической доменной структуры не всегда позволяет с достаточной степенью точности визуально оценить амплитуду смещения ДГ. Так как колебания ДГ вызывают изменение интенсивности светового потока, проходящего через образец, то в целях повышения достоверности получаемых результатов была использована схема на основе фотодиода. Проведенные по такой методике измерения подтвердили, что смещение ДГ происходит только на резонансных частотах. Считая, что амплитуда колебаний ДГ пропорциональна амплитуде сигнала фотодиода, может быть получена зависи-

мость амплитуды смещения ДГ от амплитуды напряжения, подаваемого на пьезоэлемент. На рис. 3 приведены зависимости амплитуды колебания доменной границы от амплитуды напряжения на пьезокерамике для различных собственных резонансных частот образца бората железа.

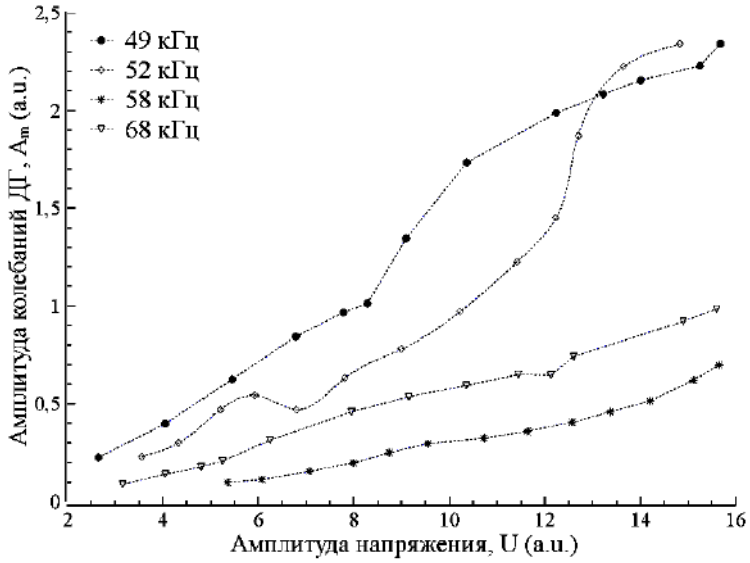


Рис. 3. Зависимость амплитуды колебаний ДГ от амплитуды напряжения на пьезоэлементе на разных резонансных частотах

Заключение. В работе экспериментально исследован обратный магнитоэлектрический эффект в двухслойной структуре $FeBO_3$-PZT. Установлено, что амплитуда изгибных колебаний образца, так же как и амплитуда смещения доменных границ достигают максимальных значений на частотах, совпадающих с резонансными частотами пьезокерамической фазы двухслойного композита. Исследование МЭ эффектов в мультиферроиках способствуют углублению понимания электромагнитных процессов в конденсированных средах, а также может служить основой для создания таких устройств как элементы хранения и обработки информации, датчики магнитных полей и т.д.

ЛИТЕРАТУРА

1. You C. Y. Concept of the field-driven domain wall motion memory //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2009. Т. 321. №. 7. С. 888-890.
2. Сизов А. Д. и др. Управляемое электрическим полем движение магнитных доменных границ для применения в устройствах спинтроники //Ученые записки физического факультета Московского университета. 2013. №. 6. С. 6-12.
3. Nan C. W. et al. Multiferroic magnetoelectric composites: Historical perspective, status, and future directions //Journal of Applied Physics. 2008. Т. 103. №. 3. С. 1.
4. Бичурин М. И. Магнитоэлектрические материалы и их применение в технике СВЧ //Вестник НовГУ, Сер.: Естеств. и техн. науки. 2001. №. 19. С. 7-12.
5. Ma J. et al. Recent progress in multiferroic magnetoelectric composites: from bulk to thin films //Advanced Materials. 2011. Т. 23. №. 9. С. 1062-1087.
6. Van Den Boomgaard J., Van Run A., Suchtelen J. V. Magnetoelectricity in piezoelectric-magnetostrictive composites //Ferroelectrics. 1976. Т. 10. №. 1. С. 295-298.
7. Bar'yakhtar V. G. et al. Dynamics of Topological Magnetic Solitons: Experiment and Theory. – Springer, 2006. Т. 129.
8. Zhukov E. A. et al. Interaction of Lamb Waves with Domain Walls in an Iron Borate Plate //Journal of nano-and electronic physics. 2015. Т. 7. №. 4. С. 4092-1.
9. Kuz'menko A. P. et al. Study of the structural and dimensional features of the magnetization reversal

in transparent weak ferromagnets //The Physics of Metals and Metallography. 2008. Т. 106. №. 2. С. 164-172.
10. Пятаков А. П. и др. Микромагнетизм и топологические дефекты в магнитоэлектрических средах //Успехи физических наук. 2015. Т. 185. №. 10. С. 1077-1088.
11. Буш А. А. и др. Низкочастотный магнитоэлектрический эффект в композитной планарной структуре галфенол-цирконат-титанат свинца //Журнал технической физики. 2009. Т. 79. №. 9. С. 71-77.
12. Bar'yakhtar V. G., Ivanov B. A., Chetkin M. V. Dynamics of domain walls in weak ferromagnets //Physics-Uspekhi. 1985. Т. 28. №. 7. С. 563-588.
13. Адамова М.Е., Жуков Е.А., Каминский А.В. Исследование резонансных изгибных пластин кремния // Ученые заметки ТОГУ. 2014. №1. Т. 5. С. 214-221.

МЕЖМОДОВОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АНТИСЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ И В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ АНТИСЕГНЕТОЭЛЕКТРИК-СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК

Д. А. Андроникова[1,2], С. Б. Вахрушев[1,2]

[1]ФГБУН «Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе» РАН
[2]ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»
г. Санкт-Петербург, e-mail: svakhrushev@gmail.com

В работе приводятся результаты экспериментального подробно анализируется динамическая природа фазовых переходов в цирконате свинца и твердых растворах цирконата-титаната свинца. Низкосимметриые фазы этих соединений характеризуются сочетанием нескольких параметров порядка различной симметрии, а также выраженной неустойчивостью относительно «сегнетоэлектрической моды» приводящей к критическому росту диэлектрической проницаемости. Нами показано, что для адекватного описания механизма фазовых переходов оказывается достаточно выделить одну релевантную мягкую моду и учесть ее взаимодействие с некритическими степенями свободы. В рамках предложенного подхода антисегнетоэлектрический переход в чистом цирконате свинца может быть описан как нереализованный переход в несоразмерную фазу. В тоже время введение 1 – 6% титаната свинца позволяет реализоваться этой «упущенной» несоразмерной фазе. Межмодовое взаимодействие может привести и приводит к реализации несоразмерных фаз не только с волновыми векторами в окрестности центра зоны Бриллюэна но и вблизи специальных точек в окрестности границы зоны.

Введение. Антисегнетоэлектрики и их твёрдые растворы, особенно перовскитоподобные, продолжают привлекать внимание исследователей, несмотря на длительную историю их изучения (первые работы были выполнены в начале 50-х годов прошлого столетия [1]. Этот интерес вызван как широким практическим применением твердых растворов в области составов, соответствующих так называемой Морфотропной Фазовой Границе (МФГ) [2], так и нерешенными вопросами, касающимися микроскопического механизма фазовых переходов. В плане практического применения, наряду с составами в области МФГ, демонстрирующими сегнетоэлектрические свойства при комнатной температуре, наблюдается рост интереса к «антисегнетоэлектрическим составам», в частности к твердым растворам цирконата-титаната свинца (ЦТС) PbZr1-xTixO3 с x<0.06. Интерес к таким материалам обусловлен возможностью их применения в быстрых устройствах накопления электрической энергии конденсаторного типа [3] и в холодильниках на основе электрокалорического эффекта [4].

Цирконат и титанат свинца образуют стабильные твердые растворы во всей области составов. Фазовая диаграмма ЦТС имеет достаточно сложный вид. При x>0.5

© Андронникова Д. А., Вахрушев С. Б., 2018

наблюдается один фазовый переход (ФП) из кубической парафазы в тетрагональную сегнетоэлектрическую (СЭ) фазу. В области МФГ за переходом в тетрагональную фазу следует ФП в сегнетоэлектрическую моноклинную фазу. При x≈0.4 Наблюдается ФП II рода в ромбоэдрическую СЭ фазу. При более низких концентрациях титана возникают области еще одной СЭ фазы. Наиболее сложной является область малой (x≤0.06) концентрации титана. Здесь за переходом из парафазы следует переход в промежуточную ромбоэдрическую? СЭ фазу и затем в антисегнетоэлектрическую (АСЭ) ромбическую фазу. Вопрос структуры промежуточной СЭ фазы остается до конца нерешенным, поскольку в этой фазе возникает сложная система сверхструктурных отражений в М-точке Зоны Бриллюэна (ЗБ), при $\mathbf{Q_M}$=(h+½ k+½ l), где h,k,l – индексы Миллера в координатах кубической ячейки, и сателлитных пиков вокруг $\mathbf{Q_M}$. В чистом цирконате свинца (ЦС) в керамических образцах промежуточная фаза наблюдается в довольно широкой области температур, но в монокристаллах ширина области ее существования не превышает 3 K.

Вопрос о микроскопическом механизме фазового перехода АСЭ типа смещения остается открытым до сегодняшнего дня. Ранняя теория Киттеля [5] не дает адекватного описания поведения температурной эволюции диэлектрической проницаемости. Следует отметить, что критический рост диэлектрической проницаемости по мере приближения к фазовому переходу является одной из наиболее важных характеристик АСЭ типа смещения [6]. Одним из препятствий установления природы ФП в антисегнетоэлектриках являлось отсутствие крупных монокристаллов и невозможность использования неупругого рассеяния нейтронов для изучения образцов размерами существенно меньше кубического миллиметра. В последние годы все большее распространение получил метод неупругого рассеяния рентгеновского (синхротронного) излучения (НРРИ) [7]. Этот метод позволяет изучать фононные дисперсионные кривые в образцах микронного размера с энергетическим разрешением порядка 1 meV. В представляемом докладе рассмотрены результаты экспериментального изучения критической динамики антисегнетоэлекриков типа цирконата свинца и их твердых растворов и представлена модель, позволяющая описать особенности фононной динамики указанных соединений.

АСЭ фазовый переход в чистом цирконате свинца. Проблема механизма ФП в ЦС оказывается достаточно сложной. Структура ЦС в АСЭ фазе характеризуется сосуществованием двух параметров порядка (ПП): (1) АСЭ ПП, связанный с антипараллельными смещениями ионов свинца и описываемый приведенным волновым вектором q_Σ=(¼ ¼ 0) и (2) антиферродисторсионный ПП, связанный с антифазными разворотами кислородных октаэдров в чередующихся слоях и описываемый приведенным волновым вектором q_R=(½ ½ ½). АСЭ параметр порядка приводит к учетверению ячейки в x-y плоскости, а антиферродисторсионный к удвоению по оси z. Объем элементарной ячейки АСЭ фазы оказывается в 8 раз больше, чем объем ячейки кубической парафазы. Наряду с сосуществованием ПП, симметрия которых характеризуется 2-мя различными точками ЗБ в ЦС наблюдается критический рост диэлектрической проницаемости, что предполагает существование мягкой фононной моды в центре ЗБ. Т.о. оказывается важным изучить особенности динамики решетки в окрестности трех различных точек зоны Бриллюэна. Нами были выполнены измерения НРРИ в монокристаллах ЦС [8,9]. Основной выявленной особенностью оказалось существование крайне мягкой дисперсионной ветви поперечных акустических (ТА) фононов в направлении [110] (рис.1). По мере приближения к ФП ТА ветвь смягчается в целом.

Никаких особенностей в области q_Σ выявлено не было. Фононы в окрестности q_R оказываются практически независимыми от температуры. Нами было предложено описание АСЭ ФП в цирконате свинца в рамках предположения о единственной мягкой моде – поперечной оптической моде (ТО) в центре ЗБ [8,9]. Смягчение ТА, ветви может при этом быть описано как результат флексоэлектрического межмодового взаимодействия. Необходимость учета флексоэлектрического взаимодействия при анализе критической динамики была впервые подробно проанализирована в книге Вакса [10]. Рассмотрим Гамильтониан, включающий акустические (обозначены, как *u*) и низкоэнергетические оптические (обозначены, как *x*) колебания:

$$H = \frac{1}{2}\sum_q \left[\dot{u}_{-q}\dot{u}_q + u_{-q}\hat{A}u_q + \dot{x}_{-q}\dot{x}_q + \lambda x_{-q}x_q + x_{-q}\hat{S}x_q + 2u_{-q}\hat{V}x_q\right] \qquad (1)$$

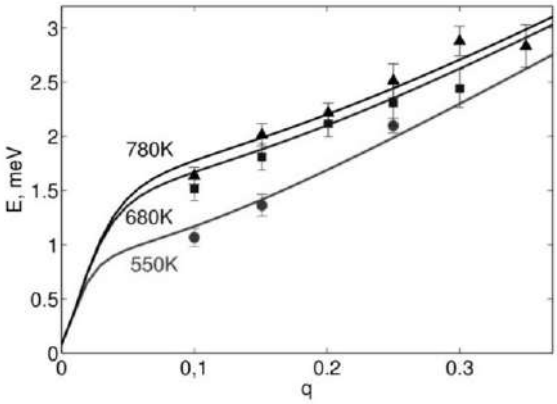


Рис. 1. Температурная эволюция фононной дисперсионной ветви в параэлектрической фазе цирконата свинца в направлении [qq0]. Сплошные линии – результат модельных расчетов

Здесь $\hat{A}$ – тензор определяющий скорость звука, λ – определяет энергию оптической ветви при нулевом приведенном волновом векторе, $\hat{S}$ – описывает дисперсию низкоэнергетических оптических колебаний, и V – флексоэлектрический тензор. В кубическом кристалле при квадратичном разложении параметров гамильтониана по приведенному волновому вектору q, мы можем выделить для каждого из трех тензоров поперечную (индекс t в формуле 2), продольную (индекс l в формуле 2) и анизотропную компоненты (индекс a в формуле 2):

$$\begin{aligned}\hat{A} &= q^2\left(A_t g^t + A_l g^l + A_a g^a\right)\\ \widehat{S} &= q^2\left(S_t g^t + S_l g^l + S_a g^a\right)\\ \hat{V} &= q^2\left(V_t g^t + V_l g^l + V_a g^a\right)\end{aligned} \qquad (2)$$

Здесь компоненты метрического тензора g: g^t, g^l, g^a определяются направлением **n** волнового вектора **q**, **n**=**q**/q. При рассмотрении критической динамики сегнетоэлектриков следует учесть, что полярная продольная оптическая мода (LO) имеет значительно более высокую частоту, чем полярная TO мода. Это позволяет исключить LO моду из рассмотрения и, соответственно исключить компоненты S_l и V_l. Результирующая модель может быть охарактеризована, как пятимодовая модель Вакса. Приведенные выше выражения позволяют получить зависящую от **q** динамическую матрицу дающую возможность определить вид фононных дисперсионных поверхностей и «эффективные вектора поляризации», спроектированные на вектора поляризации акустических и поперечных оптических фононов в центре зоны Бриллюэна (подробнее см. [8,9]). Такие модельные расчеты были выполнены для ЦС [8,9,11]. Результаты модельных расчетов для мягкой TA моды показаны сплошными линиями на Рис.1. Единственным температурно-зависимым параметром полагалась частота TO моды в центре ЗБ. Для контроля корректности расчета анизотропии дисперсионных поверхностей проводилось сравнение экспериментально измеренных и рассчитанных контуров диффузного рассеяния рентгеновского излучения.

Следует отметить, что из приведенных дисперсионных кривых можно ожидать ФП при произвольном волновом векторе и вектор q_Σ ничем не выделен. Однако ФП в АСЭ фазу является ФП I рода и не обязан описываться специфическим волновым вектором. Нами было показано [8], что стабилизация релевантного волнового вектора в ЦС на значении (¼ ¼ 0) может быть объяснено существованием при этом волновом векторе “umpklapp” члена в разложении свободной энергии, отсуствующего пии произвольных значениях волнового вектора.

Несоразмерные фазовые переходы в окрестности q_Σ. Таким образом, в рамках предложенной в [8] модели АСЭ ФП может быть описан, как несостоявшийся несоразмерный ФП. Возникает вопрос о том, можно ли найти подтверждение указанной гипотезы. Выполненные нами исследования подтверждают возможность реализации несоразмерных фаз в перовскито-

подобных антисегнетоэлектриках. В работе [12] показано, что приложение к ЦС гидростатического давления приводит к возникновению промежуточной несоразмерной фазы, описываемой волновым вектором q_{inc}≈0.2. Формированию соответствующих сверхструктурных пиков предшествует максимумов критического диффузного рассеяния в области этих волновых векторов. Измерения НРРИ подтвердили связь указанного максимума с минимум на фононной дисперсионной кривой. Несоразмерная структура была также обнаружена в гафнате свинца ($PbHfO_3$) [13]. Интересные результаты были получены нами при изучении критической динамики ЦТС, в области малых (меньше 6%) концентраций титаната свинца. Нами было показано, что возникновению АСЭ фазы предшествует формирование несоразмерной структуры с волновым вектором q_{inc}≈0.16. В определенной, узкой температурной области эти фазы сосуществуют, что видно из дифрактограмм, приведенных на рис.2.

В связи с приведенными результатами возникает вопрос о существовании особенностей динамики решетки при волновых векторах близких к вектору несоразмерности. Выше уже сказано, что в ЦС при приложении гидростатического давления возникает выраженное критическое рассеяние в области q_{inc}. В ЦТС1.5 прогиб в дисперсионной зависимости проявляется слабее, однако при приближении к температуре перехода положение прогиба постепенно смещается в область q_{inc}.

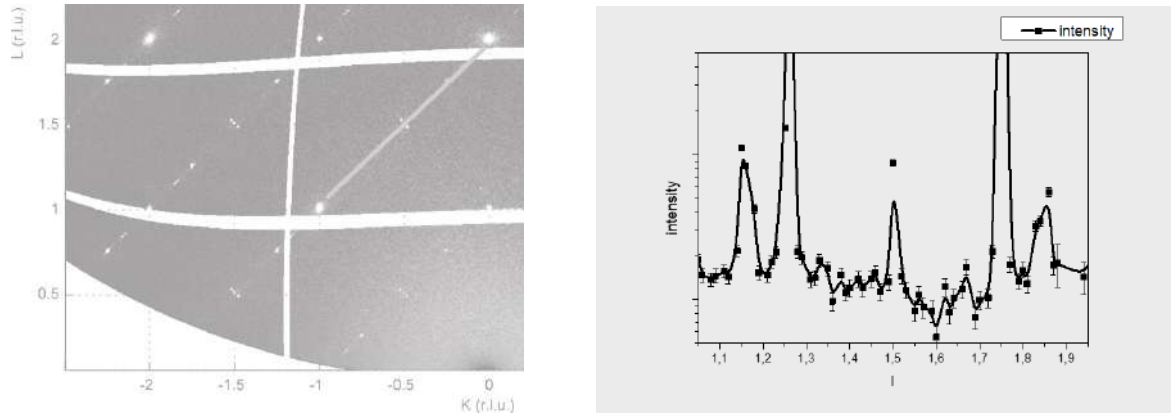


Рис. 2. $PbZr_{0.985}Ti_{0.015}O_3$ (ЦТС1.5) в области сосуществования несоразмерной и АСЭ фазы: (а) – карта распределения интенсивности в (0kl) плоскости обратного пространства, индексация дана в координатах кубической фазы; (б) - одномерное сечение вдоль линии, выделенной на части (а) желтым цветом

Рассмотренная выше модель, учитывающая разложение параметров гамильтониана по q до 2-й степени не позволяет описать возникающую немонотонность. Однако это довольно естественно, поскольку при больших q дисперсия неперенормированных акустических фононов уже не является линейной, а дисперсия ТО ветви не описывается зависимостью вида $\omega_{TO}^2 = \omega_0^2 + Dq^2$, характерной для критических возбуждений. В работе [14] было показано, что вдали от центра ЗБ (в более общем случае вдали от волнового вектора релевантного фазовому переходу) адекватно описание требует учета членов q^4. Однако, описание анизотропии дисперсионных поверхностей при этом оказывается практически бессмысленным из-за большого числа свободных параметров, которые не могут быть определены независимо (в случае модели Вакса скорости звука определяются экспериментально, а для всех остальных параметров могут быть получены независимые оценки). Т.о. в этом случае стратегия модельного описания может выглядеть следующим образом: на первом этапе проводится описание при малых волновых векторах в модели Вакса, а затем для мягкого направления учитываются члены 4-го порядка. Можно показать, что в рамках одномерной задачи перенормированные значения частот ТО (мода 1) и ТА (мода 2) фононов могут быть определены путем приравнивания нулю детерминанта:

$$\begin{vmatrix} \omega_0^2 + f_{11} + \omega(q)^2 & f_{12} \\ f_{12} & f_{22} + \omega(q)^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$f_{ij} = F_{ij}^{(2)} q^2 + F_{ij}^{(4)} q^4 + \cdots \quad (3)$$

В рамках этого подхода можно описать и, в ряде случаев, предсказать фазовые переходы в несоразмерную фазу.

Несоразмерные фазовые переходы в окрестности М-точки ЗБ. Выше отмечалось, что в ЦТС с x<6% в промежуточной сегнетоэлектрической фазе наблюдается сложная система сателлитных пиков в окрестности М-точки ЗБ (рис. 3а).

В течение ряда лет ведутся дискуссии о природе указанных сателлитов. Одна из моделей предполагает связь сателлитных пиков с формированием антифазных доменов. Такая модель (не дающая полного описания всего набора сателлитов) не предполагает каких-либо аномалий критической динамики в стороне от М-точки. В тоже время, проведенное нами исследование диффузного и неупругого рассеяния в ЦТС указанных составов демонстрируют, что наблюдается максимум интенсивности рассеяния, смещенный от М-точки (рис. 4), причем этот максимум наблюдается только с одной стороны от М-точки.

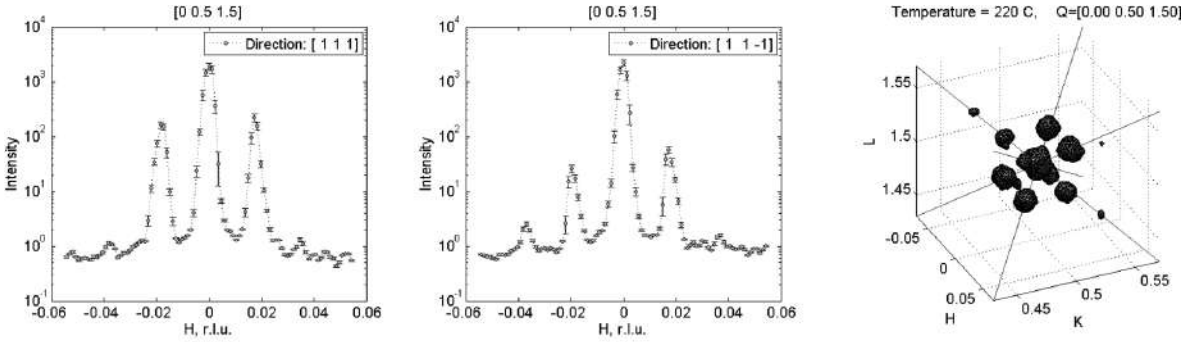


Рис. 3. Структура сателлитных пиков в окрестности М-точки в ЦТС1.5.
Справа – трехиерная реконструкция интенсивности рассеяния, слева – два одномерных сечения в направлениях типа {111}, проходящие через М-точку и центры сателлитных пиков

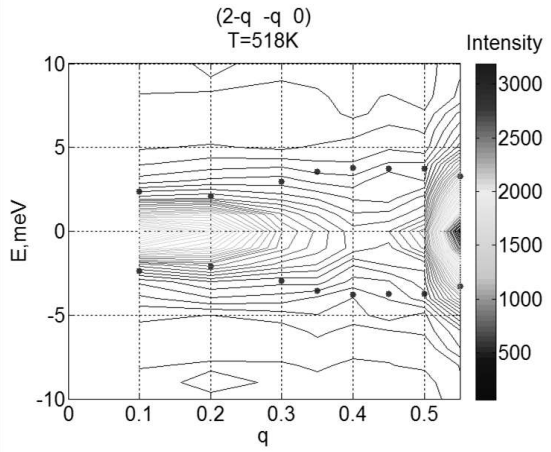


Рис. 4. Изоинтенсивностные контуры НРРИ в кубической фазе ЦТС1.5. Обращает на себя внимание тот факт, что максимум квазиупругой интенсивности, наблюдаемый с правой стороны от границы ЗБ отсутствует с левой стороны

Для анализа полученных результатов нами была использована модель аналогична выражению 3. При этом учитывалось затухание фононов и межмодовое взаимодействие в принципе предполагалось комплексным. Фононный пропагатор $\mathbf{G}(\vec{q}, \omega)$ для связанных мод при этом представлялся в виде:

$$\mathbf{G}(\vec{q},\omega)=\begin{pmatrix}\left(\omega_1(q)\right)^2-\omega^2+i\Gamma_1\omega & \Delta_{12}+i\Gamma_{12}\omega\\ \Delta_{12}+i\Gamma_{12}\omega & \left(\omega_2(q)\right)^2-\omega^2+i\Gamma_2\omega\end{pmatrix}^{-1}$$

$$(\omega_1(q))^2=\left(\omega_1^0\,(q)\right)^2+f_{112}q^2+f_{114}q^4$$

$$(\omega_2(q))^2=\left(\omega_2^0\,(q)\right)^2+f_{222}q^2+f_{224}q^4$$

$$\left(\Delta_{12}\,(q)\right)^2=\Delta_{12}^0+f_{122}q^2+12q^4 \qquad (4)$$

Константы затухания Γ_1 и Γ_2 полагались независящими от q. Константа Δ_{12}^0 равна 0 по соображениям симметрии. В первых предварительных расчетах константой Γ_{12} пренебрегали. Функция рассеяния $S(\vec{Q},\omega)$ при этом описывалась следующим стандартным выражением:

$$S(\vec{Q},\omega)=\frac{k_BT}{\pi\omega}\sum_{jj'}Im\left[F_j^*(\vec{Q},\vec{q})G_{jj'}(\vec{q},\omega)F_{j'}(\vec{Q},\vec{q})\right] \qquad (5)$$

$\vec{Q}$ – переданный волновой вектор, $F_j^*(\vec{Q},\vec{q})$ – неупругий структурный фактор. Остальные обозначения определены ранее. Использование этого выражения позволило получить качественное согласие с экспериментальными результатами. При этом можно сделать вывод о существовании собственной структурной неустойчивости при волновом векторе q_{inc} близком, но не равном $q_{M.}$

Заключение. В работе приведены результаты экспериментального исследования и моделирования фазовых переходов и критической динамики в ЦС и твердых растворах на его основе. Показана эффективность использования «языка» межмодового взаимодействия для анализа и эффективной «параметризации» получаемых экспериментальных данных. Проанализирована природа сателлитной структуры в окрестности М-точки в ЦТС, и показано, что ее возникновение может быть рассмотрено как следствие собственного несоразмерного перехода. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и образования РФ, проект № 3.1150.2017/4.6

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Shirane G., Sawaguchi E, Takagi Y. Dielectric properties of lead zirconate // Journal of the Physical Society of Japan. 1951. V. 6, No 3, pp. 208-209.
2. Noheda B. Structure and high-piezoelectricity in lead oxide solid solutions. // Current Opinion in Solid State and Materials Science. 2002. V. 6, P. 27-34.
3. Xihong Hao. A review on the dielectric materials for high energy-storage application. // J. Adv. Dielectr. 2013. V. 3 No 1 P. 1330001.
4. Glazkova-Swedberg E., Cuozzo J., Lisenkov S., Ponomareva I. Electrocaloric effect in PbZrO3 thin films with antiferroelectric-ferroelectric phase competition. // Comput. Mater. Sci. 2017. V. 129. P. 44- 48.
5. Kittel C., Theory of antiferroelectric crystals. // Physical Review 1951. V. 82 No 5 P. 729-732.
6. Rabe , Antiferroelectricity in Oxides: A Reexamination / in Functional Metal Oxides: New Science and Novel Applications, ed. by Satish Ogale and V. Venkateshan // Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2013. P. 221-244
7. Krisch M. Inelastic x-ray scattering from phonons. // Topics in Applied Physics 2017 V. 108 P. 317–370.
8. Tagantsev A. K., Vaideeswaran K., Vakhrushev S.B., et al. The origin of antiferroelectricity in PbZrO3 // Nature. Communications 2013, V. 4 P. 2229
9. . Burkovsky R., Tagantsev A.K., Vaideeswaran et al. Lattice dynamics and antiferroelectricity PbZrO3 tested by x-ray and Brillouin light scattering // 2014 Phys. Rev. B, V. 90 No 14 P. 144301.
10. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. // Москва : Наука, 1973 327 с
11. Andronikova D.A., Burkovsky R.G. Filimonov A.V., Tagantsev A.K., Vakhrushev S.B. Phonon dispersion calculations using the Vaks model in antiferroelectric lead zirconate. // J. Adv. Dielectrics.2015, V. 5, No 2, P. 1550016 (5 pp).
12. Burkovsky R. G.; Bronwald I.; Andronikova, D.; et al. Critical scattering and incommensurate phase transition in antiferroelectric PbZrO3 under pressure. // Scientific Reports. 2017 V. 7 P. 41512
13. Burkovsky, R. G.; Andronikova, D.; Bronwald, Yu; et al. Lattice dynamics in the paraelectric phase of PbHfO3 studied by inelastic x-ray scattering // Journal of Physics-Condensed Matter 2015. V. 27 No P. 335901.
14. Axe J. D., Harada J., Shirane G., Anomalous acoustic dispersion in centrosymmetric crystals with soft optic phonons. // Phys. Rev. B 1970. V. 1 P. 1227.

ЛИНЕЙНЫЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$

А. А. Антонов, С. В. Барышников, И. В. Егорова

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
г. Благовещенск, e-mail: antonov.lit@bgpu.ru

Представлены результаты исследования диэлектрических свойств композитов $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$. По данным линейной и нелинейной диэлектрической спектроскопии, для $C_6H_{16}IN$ в составе композита наблюдается сдвиг фазовых переходов и стабилизация сегнетоэлектрической фазы.

Введение. В последнее время вырос интерес к исследованиям электрических свойств неоднородных полярных материалов, особое место среди которых занимают сегнетоэлектрические композиты. Физические свойства таких материалов связаны с объемными соотношения компонент, размерами и геометрией частиц, а также взаимодействием частиц с матрицей и между собой. В совокупности все эти факторы приводят к тому, что характеристики полученных структур могут значительно отличаться от характеристик исходных материалов. В ряде работ [1-7] было обнаружено, что для сегнетоэлектрических композитных систем возможно взаимное влияние компонент на свойства друг друга. Так, было показано, что для сегнетоэлектрических композитов $(KNO_3)_{1-x}/(BaTiO_3)_x$, $(KNO_3)_{1-x}/(KNbO_3)_x$, $(KNO_3)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$, $(KNO_3)_{1-x}/(LiNbO_3)_x$ наблюдается расширение области существования сегнетофазы для нитрата калия [1-4]. Для композитов $(NaNO_2)_{1-x}/(BaTiO_3)_x$ эффект взаимодействия приводит к значительному росту как действительной, так и мнимой частей диэлектрической проницаемости, а также увеличению температурной области существования несоразмерной фазы. Действительная часть диэлектрической проницаемости ε' при охлаждении от парафазы до 273 К оказывается меньше, чем при нагреве, в то время как для тангенса угла диэлектрических потерь $\mathrm{tg}\delta$ наблюдается обратная зависимость [5].

В последние годы произошел значительный прорыв в исследованиях молекулярных органических одно- и двухкомпонентных полярных материалов, которые обладают полезными физическими свойствами, такими как: высокое значение спонтанной поляризации, высокая температуру Кюри, хорошая термостабильность, механическая гибкость, оптическая прозрачность и легкий вес [8-12]. Был открыт ряд органических соединений с полярной точечной группой при комнатной температуре и относительно высокой температурой плавления (~450 К), к которым относятся: диизопропиламмония бромид иодид ($C_6H_{16}IN$), сокращенно DIPAI P_s ~ 33μC× cm^{-2}, T_c = 415 К [13]; диизопропиламмония бромид хлорид ($C_6H_{16}ClN$), сокращенно DIPAC P_s ~ 8.2 μC× cm^{-2}, T_c = 440 К [14]; диизопропиламмония бромид ($C_6H_{16}BrN$), сокращенно DIPAB P_s ~ 23 μC× cm^{-2}, T_c = 426 К [15-17]. Свойства данных сегнетоэлектриков позволяют их считать потенциальными материалами для применения в органической микроэлектронике [18].

В данной работе приводятся результаты исследования влияние включений частиц $BaTiO_3$ на диэлектрические свойства и температуру фазового перехода DIPAI в композите $(DIPAI)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$.

Образцы и методика эксперимента. DIPAI получают реакцией диизопропиламина с водным раствором HI с последующей перекристаллизацией. В зависимости от технологии получения можно получить два разных полиморфа DIPAI [6,10], которые имеют различные фазовые состояния и температуры переходов. В данной работе $C_6H_{16}IN$ был получен реакцией диизопропиламина с 48%-ным водным раствором HI (молярное соотношение 1:1) по методике, приведенной в [13], с последующей перекристаллизацией из метилового спирта при комнатной температуре. При комнатной температуре DIPAI принадлежит к орторомбической неполярной хиральной пространственной группе $P2_12_12_1$. Согласно [13] при нагреве до температуры 369 К возникает полярная моноклинная фаза с симметрией $P2_1$, стабильная до 415 К. Выше 415 К

© Антонов А. А., Барышников С. В., Егорова И. В., 2018

DIPAI переходит в неполярную моноклинную фазу $P2_1/m$. В процессе охлаждения при 407 K наблюдается один фазовый переход, где DIPAI превращается непосредственно из $P2_1/m$ в полярную моноклинную фаза с симметрией $P2_1$. И остается в этом состоянии вплоть до комнатной температуры. По истечении времени порядка 24 часов после нагрева DIPAI переходит в стабильную при комнате неполярную фазу. В этой связи все линейные и нелинейные диэлектрические исследования проводились на образцах прошедших релаксацию в течение суток.

Титанат бария имеет три фазовых перехода, которые относятся к переходам типа смещения. Выше точки Кюри (393 K) $BaTiO_3$ имеет кубическую кристаллическую структуру типа перовскита. Эта параэлектрическая модификация относится к пространственной группе Pm3m. При температуре 393 K скачком происходит искажение формы ячейки и возникает спонтанная поляризация, величина которой плавно нарастает от P_s =18 μC/cm^2 в точке Кюри до ~26 μC/cm^2 при комнатной температуре. При понижении температуры ниже 278 K $BaTiO_3$ испытывает второй фазовый переход и кристалл переходит из тетрагональной симметрии класса P4mm в ромбическую. При дальнейшем охлаждении титанат бария испытывает еще один фазовый переход (~176 K), где симметрия кристаллической решетки меняется с ромбической на ромбоэдрическую [19].

Для проведения исследований использовались поликристаллические образцы DIPAI с добавкой $BaTiO_3$ в соотношении 10 объемных процентов. Образцы получались тщательным перемешиванием порошков и прессовались при давлении 6000 kg/cm^2. Размер микрокристаллов $BaTiO_3$ в композите составлял 1 – 3 μm, образцы для измерений имели форму таблеток диаметром 12 mm и толщиной 1.5 mm. Фотография поверхности образца $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$, полученная при помощи электронного микроскопа представлена на рисунке 1. В качестве электродов использовалась серебряная паста. Для удаления адсорбированной воды образцы предварительно прогревались в течение 30 минут при температуре 400 K.

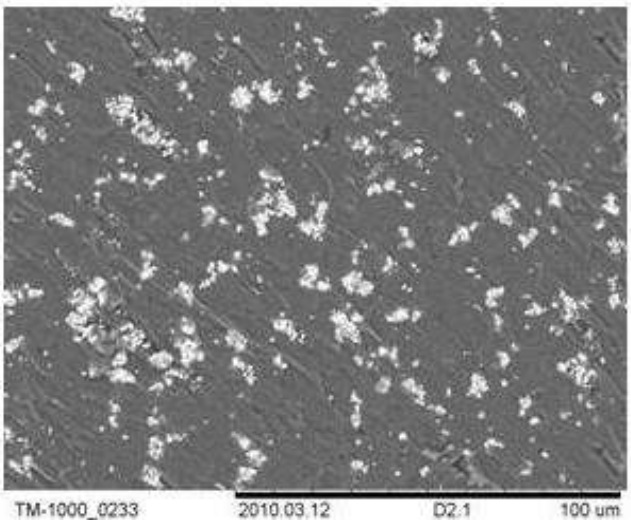


Рис. 1. Фотография поверхности образца $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$, полученная при помощи электронного микроскопа

Для измерения комплексной диэлектрической проницаемости использовался цифровой измеритель иммитанса E7–25 с частотным диапазоном $20 \div 10^6$ Hz. Температура определялась с помощью электронного термометра ТС-6621 с хромель-алюмелевой термопарой. Исследования проводились в температурном интервале от 300 до 400 K в автоматическом режиме со скоростью 1K/min. Точность определения температуры составляла 0.1 K. Погрешность измерения диэлектрической проницаемости исследуемых образцов не превышала 5 %.

Установка для исследований нелинейных диэлектрических свойств включала в себя генератор гармонических колебаний с рабочей частотой 2 kHz. Напряженность электрического поля для композитных $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$ и поликристаллических образцов DIPAI в процессе измерения составляла около 500 V/cm. Сигнал снимался с резистора, включенного

последовательно с образцом, и подавался на цифровой анализатор спектра, в качестве которого служил компьютер с 24-разрядным аналого-цифровым преобразователем ZET 230 и программным обеспечением ZetLab. В процессе эксперимента записывались амплитуды третьей гармоники и основного сигнала. Коэффициент третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ определялся как отношение амплитуды третьей гармоники к амплитуде основного сигнала. Более подробно методика нелинейных измерений описана в [20,21].

Экспериментальные результаты и обсуждения. Результаты исследований температурных зависимостей диэлектрической проницаемости ε' и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ для поликристаллических образцов DIPAI представлены на рисунке 2. На зависимостях $\varepsilon'(T)$, полученных в процессе нагрева, наблюдается одна аномалия при 378 К, соответствующая переходу в неполярную моноклинную фазу с симметрией $P2_1/m$ [13]. При охлаждении фазовый переход происходит при температуре 359 К. Из зависимости $\gamma_{3\omega}(T)$ можно заключить, что наблюдаемая аномалия при охлаждении в районе 359 К соответствует фазовому переходу из фазы $P2_1/m$ в полярную фазу $P2_1$. При дальнейшем охлаждении происходит монотонный рост коэффициента третьей гармоники, что свидетельствует о росте спонтанной поляризации. Со временим (по истечению 24 часов) полярная фаза постепенно переходит в неполярную фазу $P2_12_12_1$ о чем свидетельствует уменьшение коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$.

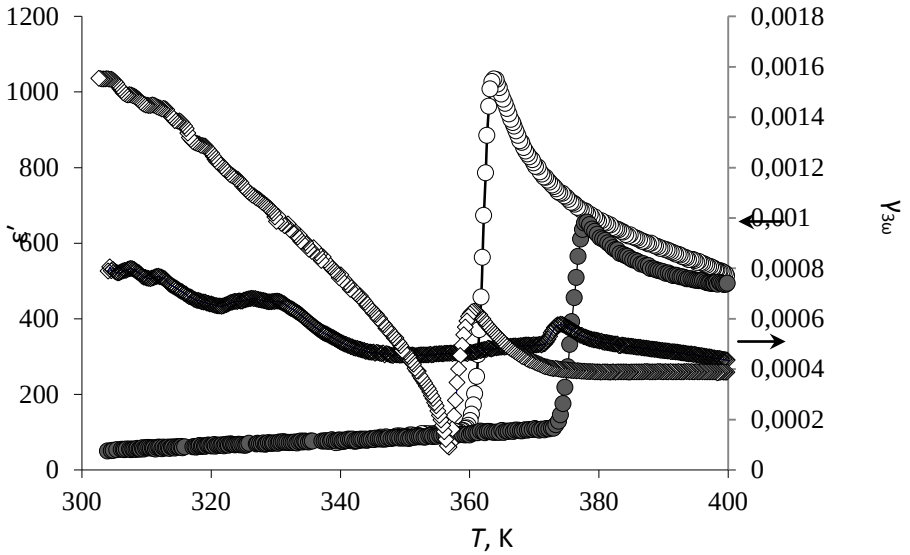


Рис. 2. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости и коэффициента третьей гармоники композита $C_6H_{16}IN$: ○ – $\varepsilon'(T)$ на частоте 1 kHz; ◊ – $\gamma_{3\omega}(T)$. Темными линиями обозначен нагрев, светлыми – охлаждение

На рис. 3 представленны результаты измерения зависимостей $\varepsilon'(T)$ и $\gamma_{3\omega}(T)$ для композита $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$. Как следует из графика, для композита наблюдается уменьшение значения диэлектрической проницаемости ε' и увеличение коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ во всем исследуемом интервале температур. При нагреве на зависимостях $\varepsilon'(T)$ и $\gamma_{3\omega}(T)$ видны две аномалии при температурах 355 К и 375 К. Характер аномалий $\gamma_{3\omega}(T)$ при нагреве свидетельствует о том, что в данном интервале температур присутствует полярная фаза $P2_1$. Таким образом, для композита $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$ происходит расширение сегнетоэлектрической фазы по сравнению с поликристаллическим образцом $C_6H_{16}IN$. При охлаждении, так же как для поликристаллических образцов DIPAI, для композитов наблюдается одна аномалия и ниже 357 К возникает сегнетоэлектрическое состояние. Стоит отметить, что для композитов сегнетоэлектрическое состояние медленней релаксирует к неполярному и по истечению суток по измерениям $\gamma_{3\omega}(T)$ еще определяется наличие поляризации, о чем свидетельствует возрастание $\gamma_{3\omega}(T)$ в районе 323-355 К.

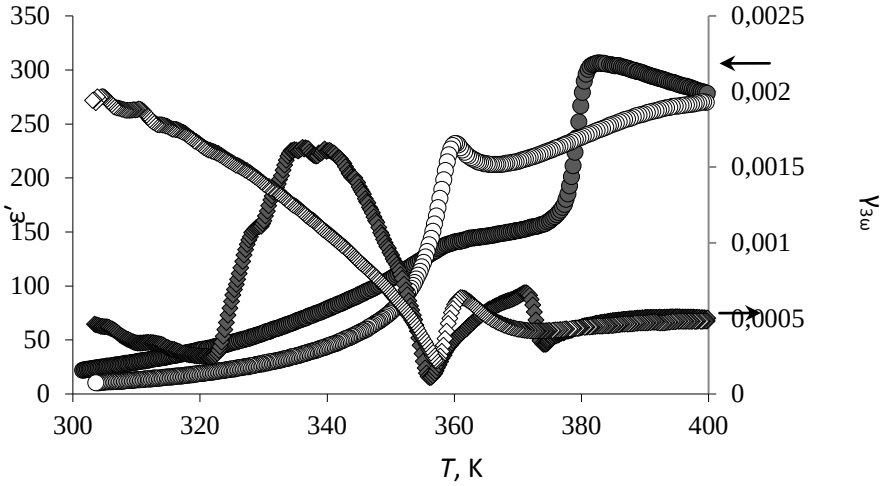


Рис. 3. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости и коэффициента третьей гармоники поликристаллического образца $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$: ○ – $\varepsilon'(T)$ на частоте 1 kHz; ◊ – $\gamma_{3\omega}(T)$. Темными линиями обозначен нагрев, светлыми – охлаждение

Заключение. По данным линейных и нелинейных диэлектрических исследований для $C_6H_{16}IN$ в составе композита наблюдается сдвиг фазовых переходов и стабилизация сегнето-электрической фазы. Сегнетоэлектрическая фаза присутствует в интервале температур 323-355 К при нагреве и 357-300 К при охлаждении.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. E. V. Stukova and S. V. Baryshnikov, Stabilization of the ferroelectric phase in $(KNO_3)_{1-x}$ /$(BaTiO_3)_x$ Composites. Inorganic materials: applied research. 2, 434-438 (2011).
2. E. V. Stukova and S.V. Baryshnikov, Dielectric studies of ferroelectric-based composites $(KNO_3)_{1-x}$ /$(KNbO_3)_x$. Journal Perspektivnye materially. 13, 801-805 (2011).
3. E. V. Stukova, V. V. Maslov and S. V. Baryshnikov, Dielectric properties of ferroelectric-based composites KNO3-BaTiO3 and KNO3-LiNbO3. IZVESTIA: Herzen University Journal of Humanities and Sciences. 138, 58–65 (2011).
4. E. V. Stukova, S. V. Baryshnikov and E. Yu, Koroleva, Shift of Phase Transitions in a $(NaNO_2)_{1-x}$ /$(KNO_2)_x$. Russian Physics Journal. 58, 221-227 (2015).
5. S. V. Baryshnikov, E. V. Stukova and E. Yu, Koroleva, Dielectric properties of the ferroelectric composite $(NaNO_2)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$. Composites: Part B. 66, 190-193 (2014).
6. E. V. Stukova, Mutual Effect of Components in Ferroelectric Composites. Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 77, 1032-1034 (2013).
7. M. Lines and A. Glass, Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials, Clarendon Press, Oxford, pp.122-–124 (1977).
8. V. Turik, G. S. Radchenko, A. I. Chernobabov, S. A. Turik and V. V. Suprunov, The dielectric spectra of disordered systems ferroelectric active: polycrystals and composites. Solid State Physics. 48, 1157–1159 (2006).
9. M. Lotonov, V. K. Novik and N. D. Gavrilova, On the time dependence of the dielectric dispersion triglycine near the Curie point. Solid State Physics. 49, 1330-1334 (2007).
10. V. L. Ginzburg, Phase transitions in ferroelectrics: some historical remarks. Physics-Uspekhi (Advances in Physical Sciences). 44, 1037-1043 (2001).
11. S. Horiuchi, F. Kagawa, K. Hatahara, K. Kobayashi, R. Kumai, Y. Murakami and Y. Tokura, Nat. Commun., 3, 1308 (2012)
12. Y. Liu, Y. Zhang, M.-J. Chow, Q. N. Chen and J. Li, Phys. Rev. Lett., 108, 078103 (2012)
13. K. R. Saripalli, S. Diptikanta, P. Siva, N. Hariharan, L.B. Handady, N. Tayur, and E. Suja. Observation of ferroelectric phase and large spontaneous electric polarization in organic salt of diisopropylammonium iodide. J. Appl. Phys. 121, 114101 (2017)
14. D.-W. Fu, W. Zhang, H.-L. Cai, J.-Z. Ge, Y. Zhang, and R.-G. Xiong, Adv. Mater. 23, 5658 (2011).
15. D.-W. Fu, H.-L. Cai, Y. Liu, Q. Ye, W. Zhang, Y. Zhang, X.-Y. Chen, G. Giovannetti, M. Capone, J. Li, and R.-G. Xiong, Science 339, 425 (2013).

16. Piecha, A. Gagor, R. Jakubasa, and P. Szklarza, CrystEngComm 15, 940 (2013).
17. Thirmal, P. P. Biswas, Y. J. Shin, T. W. Noh, N. V. Giridharan, A. Venimadhav, and P. Murugavel, J. Appl. Phys. 120, 124107 (2016).
18. J. Li, Y. Liu, Y. Zhang, H.-L. Cai, and R.-G. Xiong, Phys. Chem. Chem. Phys. 15(48), 20786 (2013).
19. Г.А. Смоленский, В.А. Боков, В.А. Исупов, Н.Н. Крайник, Р.Е. Пасынков, М.С. Шур. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики М., Наука, 476. (1971)
20. S. Ikeda, H. Kominami, K. Koyama, Y.J. Wada. Appl. Phys. 62, 3339 (1987)
21. С.В. Барышников, Е.В. Чарная, А.Ю. Милинский, Ю.А. Шацкая, D. Michel. ФТТ 54, 594 (2012).

ИССЛЕДОВАНИЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА DTGS В ПОРИСТЫХ МАТРИЦАХ Al_2O_3

С. В. Барышников[1], Е. В. Стукова[2]

[1]ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
[2]ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: lenast@bk.ru

Исследованы температурные зависимости диэлектрических свойств и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ композиционных материалов, полученных путем внедрения DTGS в матрицы пористого оксида алюминия Al_2O_3 с диаметром пор 300 и 100 nm. Обнаружено, что фазовый переход размывается и температура Кюри смещается в область низких температур. Полученные результаты обсуждаются в рамках теории Ландау-Гинзбурга.

Введение. В настоящее время значительный интерес представляют исследования диэлектрических свойств нанокомпозитов на основе пористых матриц с сегнетоэлектрическим заполнением. На физические свойства таких структур оказывают влияние эффекты, связанные с размерами и геометрией сетки пор. Вследствие этого в последнее время активно изучаются композиты на основе матриц, заполненных сегнетоэлектрическими материалами [1-9]. В качестве одного из типов таких матриц, используемых для получения наноструктур, является пористый оксид алюминия (Al_2O_3), представляющий собой пленку с регулярно расположенными порами-каналами, ориентированными перпендикулярно поверхности [10,11]. Диаметр пор в пленках оксида алюминия колеблется в зависимости от технологии получения и составляет от 20 до 400 nm.

Исследованию сегнетоэлектрических наноструктур, на основе пористого оксида алюминия посвящен ряд работ [6-8]. В работе [7] сообщалось о стабилизации сегнетоэлектрической фазы сегнетовой соли в пористом оксиде алюминия вплоть до температуры разложения (~ 55.6°C), которая примерно на 30 °C выше температуры верхнего фазового перехода объемных образцов. В [8] было показано, что для сегнетовой соли в порах Al_2O_3 происходит расширение области существования сегнетоэлектрической фазы за счет повышения верхнего и понижения нижнего фазовых переходов. Повышение температуры фазовых переходов наблюдалось также для триглицинсульфата и тиомочевины, внедренных в пористый оксид алюминия [7,9].

В настоящей работе приводятся результаты диэлектрических исследований нанокомпозитов на основе дейтерированного TGS, внедренного в пористые оксидные пленки Al_2O_3 с диаметром пор 300 и 100 nm.

Образцы и методика эксперимента. Монокристаллы TGS $[(NH_2CH_2COOH_3)\cdot H_2SO_4]$ испытывает сегнетоэлектрический фазовый переход второго рода $P2_1/m \rightarrow P2_1$ при $T_C \approx 49$ °C с возникновением спонтанной поляризации P_S вдоль полярной оси $\boldsymbol{b}$ ($P_s \approx 2.8$ μC/cm^2) и появлением 180°-ной доменной структуры. В кристалле DTGS $[(ND_2CD_2COOD_3)\cdot D_2SO_4]$ температура сегнетоэлектрического фазового перехода второго рода $P2_1/m \rightarrow P2_1$ повышается и в зависимости от степени дейтерирования может достигать 60 °C. Кроме этого наблюдается увеличение константы Кюри и повышение спонтанной поляризации до $P_s \approx 3.2$ μC/cm^2 [12].

В эксперименте использовались оксидные пленки Al_2O_3, изготовленные фирмой

© Барышников С. В., Стукова Е. В., 2018

«TopMembranes Technology (China) » с разными размерами пор. Первая пленка имела размер ячеек 450 nm и диаметр пор 300 nm, вторая – размер ячеек 125 nm и диаметр пор 100 nm, глубина пор составляла ~50 μm. Структура пленок показана на рисунке 1. Заполнение пористой пленки DTGS проводилось из насыщенного раствора DTGS в тяжелой воде при температуре 80 – 90 °C. Затем образец медленно охлаждался, в результате чего в порах зарождались нанокристаллы. После пятикратного повторения описанной процедуры поры заполнялись и такой образец, в первом приближении, можно рассматривать как систему наностержней DTGS с длиной 50 μm и диаметром 300 и 100 nm. Для удаления оставшейся воды применялась вакуумная сушка. Эталонные объемные образцы получались из того же раствора, что применялся для внедрения в поры и имели температуру Кюри 58.5 ^{o}C.

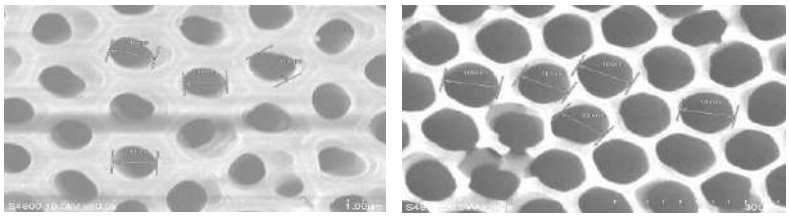


Рис. 1. Изображение поверхности пленки Al_2O_3 с размерами пор 300 и 100 nm, полученное с помощью электронного микроскопа

Для исследования диэлектрических свойств использовался цифровой измеритель иммитанса E7-25 с частотным диапазоном 25 Hz – 1 MHz при рабочем напряжении 0.7 В. Установка для исследования гармоник включала в себя генератор синусоидальных колебаний с рабочей частотой 2 kHz. Напряженность поля составляло ~10 V/cm для объемного образца и ~500 V/cm для пленки Al_2O_3 заполненной DTGS. Сигнал снимался с резистора, включенного последовательно с образцом, и подавался на цифровой анализатор спектра, в качестве которого служил компьютер с 24-разрядным аналого-цифровым преобразователем ZET 230 и программным обеспечением ZetLab. В процессе эксперимента регистрировались амплитуды второй и третьей гармоник. Более подробно методика нелинейных измерений описана в [13].

Измерения проводились в температурном интервале 20 – 80 ^{o}C в режиме непрерывного нагрева и охлаждения со скоростью ~ 1 K/min. Температура измерялась с помощью цифрового термометра ТС 6621. Точность определения температуры составляла около 0.1 ^{o}C. В качестве электродов использовалась серебряная паста.

Экспериментальные результаты и обсуждение. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости для объемного DTGS и композита DTGS/Al_2O_3 (300 нм) показана на рисунке 2. Как следует из графиков, для композита фазовый переход размывается и температура, соответствующая максимуму диэлектрической проницаемости смещается в область более низких температур. На рисунке 3 представлены зависимости $\gamma_{3\omega}(T)$ для объемного DTGS и нанокомпозита. Следует учитывать, что в точке Кюри диэлектрическая проницаемость достигает максимума, в то время как значение $\gamma_{3\omega}(T)$ минимально. Если для объемного DTGS максимум $\varepsilon'(T)$ и минимум $\gamma_{3\omega}(T)$ совпадают по температуре, то для DTGS/Al_2O_3 (300 nm) минимум $\gamma_{3\omega}(T)$, соответствующий температуре при которой спонтанная поляризация исчезает, находится где то в районе ~ 63 ^{o}C. Отсюда следует, что фазовый переход для DTGS/Al_2O_3 (300 nm) сильно размыт, и говорить о температуре Кюри для DTGS в порах неправомочно.

При дальнейшем уменьшении размера пор (композит DTGS/Al_2O_3 (100 nm)) наблюдается дальнейшее размытие перехода и увеличение эффективной диэлектрической проницаемости (рис. 4). Из зависимости $C(T)$ можно заметить некоторое снижение температуры максимума $C(T)$. В тоже время из графиков зависимости $\gamma_{3\omega}(T)$ следует снижение температуры исчезновения P_s примерно на 15 градусов. Понижение температуры фазового перехода DTGS, введенного в поры Al_2O_3, согласуется с выводами теоретических моделей, разработанных на основе феноменологической теории Ландау и модели Изинга [14-16]. Эти модели предсказывают, что температура структурного фазового перехода для малых изолированных частиц сферической

или цилиндрической формы смещается вглубь сегнетоэлектрической фазы при уменьшении размеров частиц.

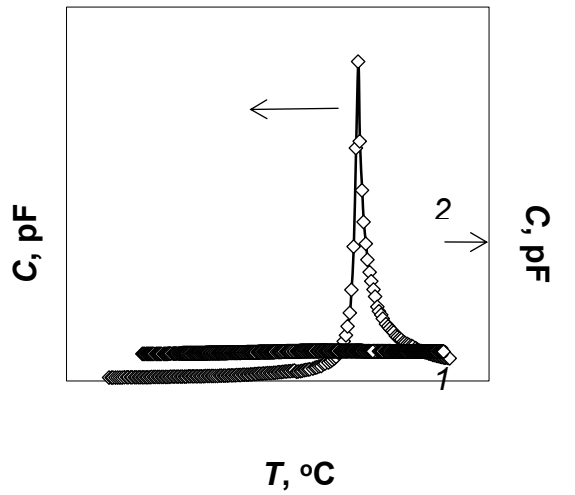


Рис. 2. Температурные зависимости емкости объемного DTGS (1) и образца нанокомпозита с порами 300 nm (2) на частоте 1 MHz

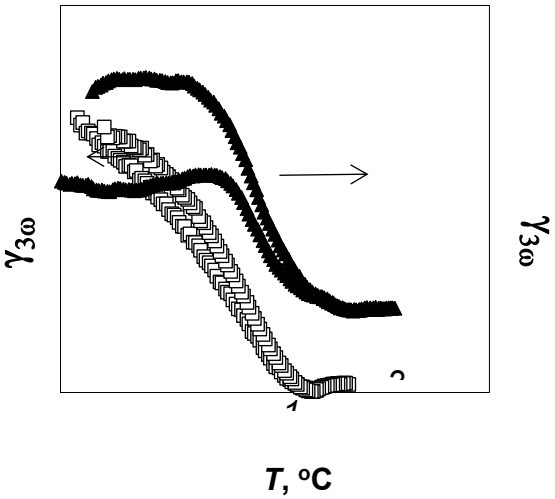


Рис. 3. Температурные зависимости $\gamma_{3\omega}$ для объемного DTGS (1) и образца нанокомпозита с порами 300 nm

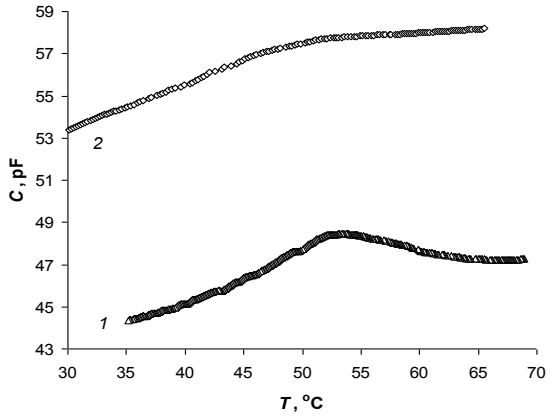


Рис. 4. Температурные зависимости емкости образца DTGS/Al_2O_3 (300 nm) (1) и образца DTGS/Al_2O_3 (100 nm) (2) на частоте 1 MHz

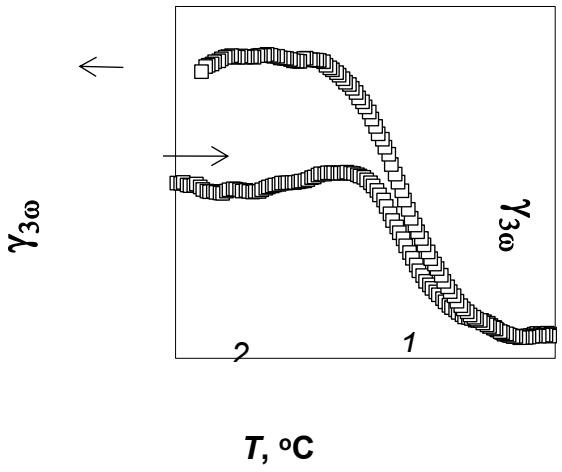


Рис. 5. Температурные зависимости $\gamma_{3\omega}$ для образца DTGS/Al_2O_3 (300 nm) (1) и образца DTGS/Al_2O_3 (100 nm) (2)

Выводы этих моделей были экспериментально подтверждены также для отдельных малых частиц сегнетоэлектриков типа титаната бария (см. [17] и ссылки в этой работе). Взаимодействие электрической природы между сегнетоэлектрическими частицами в порах, как показал теоретический анализ [18], может значительно ослаблять влияние размерных эффектов. Кроме того, для малых частиц в пористых матрицах определенную роль может играть взаимодействие со стенками пор, приводя к изменению знака смещения фазового перехода [19]. Значительное понижение температуры сегнетоэлектрического перехода для DTGS в порах оксида алюминия свидетельствует о том, что для такого нанокомпозита размерные эффекты являются доминирующими. Электрическое взаимодействие между частицами в соседних порах существенной роли не играет в связи с малой величиной спонтанной поляризации DTGS и значительными расстояниями между соседними порами.

Вопрос о размытии фазового перехода в наноразмерных матрицах не является новым, он ставился ранее в теоретическом плане в ряде работ [20,21]. Среди причин, которые могут при-

вести к этому эффекту, можно назвать неоднородное распределение деформаций для частиц в порах и величины эффективного внутреннего электрического поля. Подобная картина наблюдается и в объемных разупорядоченных сегнетоэлектрических структурах и твердых растворах. Переход из параэлектрической фазы в сегнетоэлектрическую у этих веществ характеризуется не резким структурным переходом, а постепенным размытым переходом, который наблюдается в широком температурном интервале, обычно именуемом областью Кюри. В пределах области Кюри сегнетоэлектрические свойства, такие как спонтанная поляризация, пьезокоэффициенты, аномалия удельной теплоемкости и другие, меняются постепенно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Pankova S. V., Poborchii V. V., Solovev V. G. The giant dielectric constant of opal containing sodium nitrate nanoparticles // J. Phys.: Cond. Matter. 1996. V.8. L203- L206.
2. Fokin A. V., Kumzerov Yu. A., Okuneva N. M., Naberezhnov A. A., Yakhrushev S. B., Golosovsky I. V., Kurbakov A. I.. Temperature Evolution of Sodium Nitrite Structure in a Restricted Geometry // Phys. Rev. Lett. 2002. V.89. P. 175503-175511.
3. Vakhrushev S. B., Kumzerov Yu. A., Fokin A., Naberezhnov A. A., Zalar B., Lebar A., Blinc R. ^{23}Na spin-lattice relaxation of sodium nitrite in confined geometry // Phys. Rev. B. 2004. V.70. P. 132102-132105.
4. Borisov B. F., Charnaya E. V., Pirozerskii A. L., Tien C., Lee M. K., Baryshnikov S. V., Bugaev A. S., Michel D. Ferroelastic phase transition in $LiCsSO_4$ embedded into molecular sieves // Physics Letters A. – 2010. V. 375. Iss. 2. P. 183-186.
5. Baryshnikov S. V., Milinskiy A. Y., Charnaya E. V., Patrushev Y. V. Phase transitions in KNO_3 embedded in MCM-41 films with regular nanopores // Physics of the Solid State. 2013. V. 55. Iss. 12. P. 2566-2570.
6. Tien C., Charnaya E. V., Lee M. K., Podorozhkin D. Yu, Baryshnikov S. V. Ferroelectricity and gradual melting in $NaNO_2$ particles confined within porous alumina // Physica Status Solidi (B): Basic Solid State Physics. 2009. V. 246. Iss. 10. P. 2346-2351.
7. Рогазинская О. В., Миловидова С. Д., Сидоркин А. С., Чернышев В. В., Бабичева Н. Г. Свойства нанопористого оксида алюминия с включениями триглицинсульфата и сегнетовой соли / // Физика твердого тела. 2009. Т. 51. Вып. 7. С. 1430-1432.
8. Baryshnikov S. V., Milinskiy A. Y., Charnaya E. V., Patrushev Y. V. Phase transitions in KNO_3 embedded in MCM-41 films with regular nanopores // Physics of the Solid State. 2013. V. 55. Iss. 12. P. 2566-2570.
9. Милинский А. Ю., Барышников С. В., Антонов А. А. Исследование фазовых переходов сегнетоэлектрика $SC(NH_2)_2$ в нанопористых матрицах на основе Al_2O_3 // Физика твердого тела. 2017. Т. 59. Вып. 9. С. 1759-1764.
10. Martin Ch. R. Nanomaterials: A Membrane-Based Synthetic Approach // Science. 1994. V. 266. P. 1961-1966.
11. Steinhart M., Liang Ch., Lynn G.W., Gsele U., Dai Sh. Direct synthesis of · mesoporous carbon microwires and nanowires // Chem. Mater. 2007. V. 19. P. 2383-2386.
12. Lines M. E., Glass A. M. Principles and Application of Ferroelectrics and Related Materials. Clarendon Press Oxford, 1977. 736 p.
13. Милинский А. Ю., Шацкая Ю. А., Антонов А. А., Барышников С. В. Метод нелинейной диэлектрической спектроскопии для исследования сегнетоэлектриков в случае сильных полей // Известия Самарского научного центра РАН. 2014. Т. 16. Вып. 4. С. 83-89.
14. Zhong W. L., Wang Y. G., Zhang P. L., Qu B. D. Phenomenological Study of the Size Effect on Phase Transitions in Ferroelectric Particles // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 698-703.
15. Wang Y. G., Zhong W. L., Zhang P. L. Size Driven Phase Transition in Ferroelectric Particles // Solid State Commun. 1994. V. 90. P. 329-332.
16. Wang C. L., Xin Y., Wang X. S., Zhong W. L. Size effects of ferroelectric particles described by the transverse Ising model // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 11423-11427.
17. Shchukin V. A., Bimberg D. Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces // Rev. Mod. Phys. – 1999. V. 71. Iss. 4. P. 1125-1171.
18. Charnaya E. V., Pirozerskii A. L., Tien C., Lee M. K. Ferroelectricity in an array of electrically coupled confined small particles // Ferroelectrics. 2007. V. 350. P. 75-80.
19. Sedykh P., Michel D. Ferroelectric phase transition in barium titanate nanoparticles // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 134119[6].
20. Ролов Б. Н., Юркевич В. Э. Термодинамика фазовых переходов в сегнетоактивных твердых растворах. Рига: «Зинатне», 1976. 216 с.
21. Френкель Я. И. Статистическая физика. М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1948. 760 с.

ФОРМИРОВАНИЕ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ $BaSi_2$ НА Si(111) МЕТОДАМИ РЕАКТИВНОЙ И ТВЕРДОФАЗНОЙ ЭПИТАКСИЙ

В. Л. Дубов, А. Герман, Д. В. Фомин

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: 7dubov7@mail.ru

В работе представлены результаты формирования тонкой пленки дисилицида бария на кремниевой подложке методами реактивной и твердофазной эпитаксии.

В настоящее время существуют множество различных материалов, которые могут быть использованы для производства солнечных батарей. Одним из возможных материалов могут быть тонкие пленки дисилицида бария на кремнии [1], которые в формируются в сверхвысоко вакуумных камерах [2]. Уже сейчас полученные образцы фотоэлектрических преобразователей обладают КПД до 10% [3, 4].

Однако существует ряд сложностей при использовании бария в технологии тонких пленок. Сформированные ранее нами образцы только методом твердофазной эпитаксии имели трещины по всей поверхности, что связано с малой адгезией сформированной пленки к подложке. Целью данной работы было формирование тонкой пленки дисилицида бария на кремнии методами реактивной и твердофазной эпитаксиями для устранения растрескивания полученной пленки. Подложка и источник кремния вырезались размерами 5 на 15 мм из шайб монокристаллического кремния: КЭФ(111) 5-15 Ом*см – для подложки и FZN(111) 50-75 Ом*см – для источника, и подвергались стандартной очистке RCA-cleaning ex-situ и дегазацией в течении 6 часов при 600°C в СВВ-камере. Источник бария очищался в гептане и помещался в танталовую трубку с проколом, после чего подвергался длительной дегазации in-situ. Скорость осаждения калибровалась с помощью кварцевого пьезоэлектрического датчика и составила 0,9 нм/мин для бария и 0,6 нм/мин для кремния.

На первом этапе было соосаждено 20 нм бария и кремния методом реактивной эпитаксии при температуре подложки 600°C, далее осадили еще 80 нм пленки, после чего производилась рекристаллизация при 600°C в течении часа для получения кристаллитов без значительного испарения свободных атомов бария и далее при 800°C в течении часа для получения более крупных кристаллитов дисилицида бария. На всех этапах производились измерения Оже электронного спектра (рис.1) и спектра характеристических потерь энергии электронами (рис.2).

Как видно на представленных графиках пленка дисилицида бария сформировалась полностью, о чем свидетельствуют пики бария (580 эВ) и кремния (89 эВ) на спектрах Оже и пики объемного плазмона на 13 эВ и удвоенного объемного плазмона на 26 эВ. На рисунке 3 представлено РЭМ изображение сформированного образца. Как можно заметить трещин в пленке нет, так как пленка обладает лучшей адгезией по сравнению с образцами, полученными методом только твердофазной эпитаксией. Методика получения тонкой пленки $BaSi_2$, представленная в данной работе позволяет формировать более качественные образцы по сравнению с образцами полученными нами ранее.

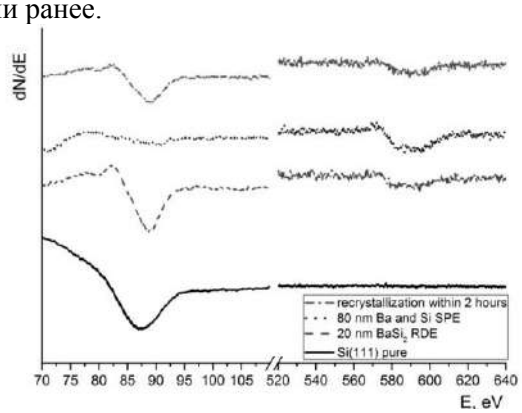


Рис. 1. Оже электронные спектры, полученные в процессе формирования тонкой пленки дисилицида бария

© Дубов В. Л., Герман А., Фомин Д. В., 2018

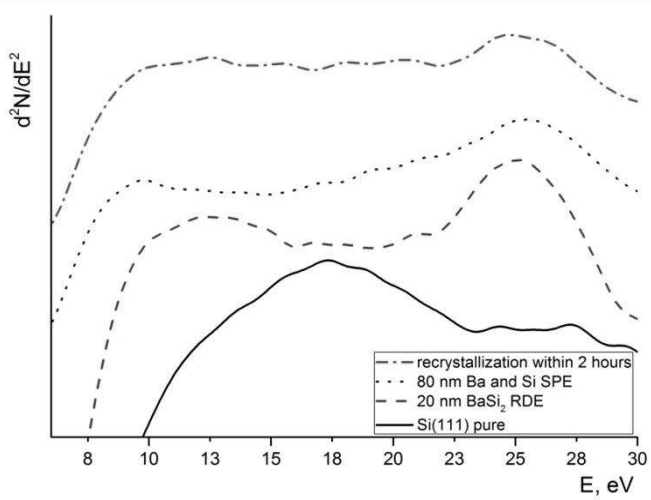


Рис. 2. Спектры характеристических потерь энергии электронами, полученные в процессе формирования тонкой пленки дисилицида бария

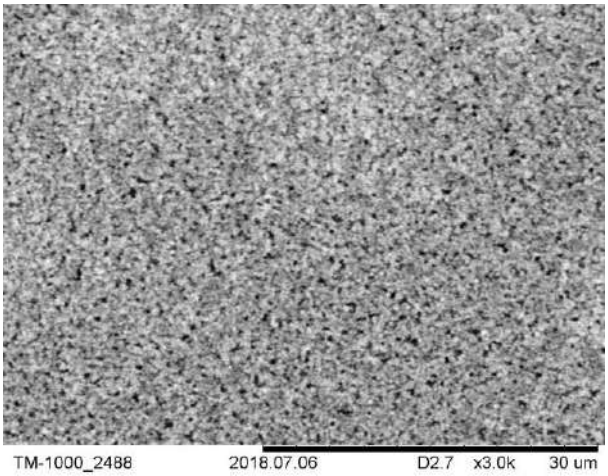


Рис. 3. РЭМ-изображение тонкой пленки дисилицида бария

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Takashi Suemasu, Exploring the possibility of semiconducting BaSi 2 for thin-film solar cell applications // Japanese Journal of Applied Physics 54, 07JA01 (2015)

2. Realization of single-phase BaSi2 films by vacuum evaporation with suitable optical properties and carrier lifetime for solar cell applications/ Kosuke O. Hara, Yoshihiko Nakagawa, Takashi Suemasu and Noritaka Usami // Japanese Journal of Applied Physics 54, 07JE02 (2015)

3. p-BaSi2/n-Si heterojunction solar cells with conversion efficiency reaching 9.0% / Daichi Tsukahara, Suguru Yachi, Hiroki Takeuchi, Ryota Takabe, Weijie Du, Masakazu Baba, Yunpeng Li, Kaoru Toko, Noritaka Usami and Takashi Suemasu // Appl. Phys. Lett. 108, 152101 (2016)

4. Effect of amorphous Si capping layer on the hole transport properties of BaSi2 and improved conversion efficiency approaching 10% in p-BaSi2/n-Si solar cells / Suguru Yachi, Ryota Takabe, Hiroki Takeuchi, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu // Appl. Phys. Lett. 109, 072103 (2016).

КОМПЛЕКСНЫЙ РЕЗОНАНС В АКУСТИКЕ

Е. А. Жуков[1], В. И. Жукова[2], А. В. Каминский[1]

[1]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
[2]ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
г. Хабаровск, e-mail: e_a_zhukov@mail.ru

Рассмотрены комплексные спектры волн Лэмба ограниченной пластины. Сделан вывод о том, что комплексный спектр позволяет отличить две нормальные моды колебаний с одинаковыми частотами и разными коэффициентами затухания

Амплитудно-частотные и фазо-частотные характеристики отклика среды на падающее излучение широко используется в оптике [1] и радиотехнике [2] для исследования свойств вещества и электронных устройств. Эти зависимости в радиотехнике применяются не только от действительной части частоты, но и от мнимой, отвечающей за затухание сигнала (преобразование Лапласа). В работах [3-5] показано, что применение спектроскопии комплексных частот в оптике расширяет возможности спектроскопии и позволяет, в частности, отличить резонансы с совпадающими вещественными частотами, но отличающимися мнимыми.

В настоящей работе рассматривается комплексные спектры волн Лэмба ограниченной пластины. Акустические волны, в отличие от электромагнитных, не существуют без среды, волновые уравнения для них являются материальными. Однако схожесть этих уравнений с электромагнитными позволяет распространить комплексную спектроскопию и на акустику.

Рассмотрим изгибные колебания (волны Лэмба) прямоугольной пластины с толщиной h, ограниченной плоскостями по оси z ($z = \pm h/2$). Динамические уравнения для изгибных деформаций U вдоль оси z в тонких пластинах, согласно [6], имеют вид:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + B^2 \Delta^2 U = 0, \tag{1}$$

где B – константа, учитывающая упругие свойства материала.

$$B = \frac{h}{\sqrt{3}} \frac{s_t}{s_l} \sqrt{s_l^2 - s_t^2},$$

s_l, s_t – скорости распространения продольных и поперечных звуковых волн, соответственно.

Из (1) видно, что при выполнении соотношения, соответствующего закону дисперсии волн Лэмба в длинноволновом пределе $\omega = Bk^2$, амплитуда гармоники неограниченно возрастает. Уравнение (1) справедливо при выполнении условия $kh << 1$. Для бесконечной пластины сильная дисперсия ограничивает результирующую амплитуду смещения. Однако если пластина ограничена по двух координатам, например,

$$0 \le x \le l_x, \quad 0 \le y \le l_y \tag{2}$$

то пространственный спектр становится дискретным. Дисперсия уже не будет ограничивать амплитуду деформаций и для ее нахождения необходимо учитывать поглощение. Изгибные колебания таких пластин, вызванные движением доменной границы, рассматривалось в работах [7-11]. Для образцов, по форме близких к прямоугольным с поперечными размерами l_1, l_2 и граничных условий типа "опертые края"[6], частоты ω_{pq} могут быть рассчитаны в соответствии с [6]. В этом случае учет второго поперечного размера приводит к резонансным изгибным колебаниям, некратным основной частоте

$$k_{p,q}^2 = \pi^2 \left(\frac{p^2}{l_x^2} + \frac{q^2}{l_y^2} \right); \quad \omega_{p,q} = Bk^2 = \pi^2 B \left(\frac{p^2}{l_x^2} + \frac{q^2}{l_y^2} \right). \tag{3}$$

Здесь p, q – номера резонансных частот. При этом за звуковые колебания отвечают целые значения p и q. Нулю равняться может только одно из чисел p или q, что соответствует ограничению только по одной из поперечных координат (3). Например, при $q = 0$, ($l_y \to \infty$)

© Жуков Е. А., Жукова В. И., Каминский А. В., 2018

$$k_p = \pi \frac{p}{l_x}; \quad \omega_p = Bk^2 = B\left(\frac{\pi p}{l_x}\right)^2. \tag{4}$$

При ограничении обеих координат и отсутствии зависимости смещений от одной из них, одно из чисел *p* или *q* так же может равняться нулю. Смещение при этом равно

$$U_{\omega,p} = \frac{F_{\omega,p}}{2\pi\left(k_p^4 B^2 - \omega^2\right)}, \tag{5}$$

Уравнения вынужденных колебаний, подвергающимся воздействию внешней силы

$$F = F_{\omega,\mathbf{k}} \cdot e^{-i\omega t + i\mathbf{kr}},$$

где ω, *t*, *k*, **r** – частота, время, волновой вектор и радиус-вектор, соответственно, с учетом затухания представим в виде

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial U}{\partial t} + B^2 \Delta^2 U = F_{\omega,\mathbf{k}} \cdot e^{-i\omega t + i\mathbf{kr}}, \tag{6}$$

где γ – параметр затухания. Решение (6) ищем в виде

$$U = U_{\omega,\mathbf{k}} \cdot e^{-i\omega t + i\mathbf{kr}}.$$

находим амплитуду гармоники смещения:

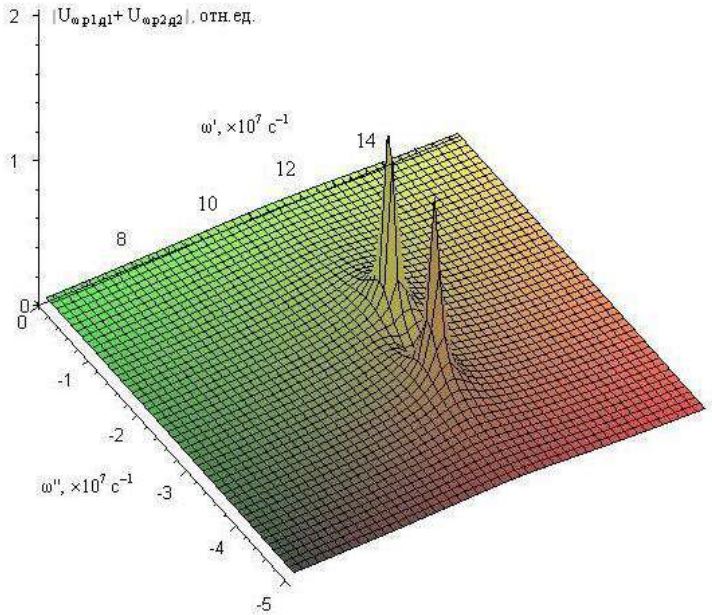
$$U_{\omega,k} = \frac{F_{\omega,k}}{2\pi\left(k^4 B^2 + i\gamma_k \omega - \omega^2\right)}. \tag{7}$$

При возбуждении двух нормальных мод,

$$U_{\omega,p_1,q_1} + U_{\omega,p_2,q_2} = \frac{F_{\omega,p_1,q_1}}{2\pi\left(k_{p_1,q_1}^4 B^2 + i\gamma_{k1}\omega - \omega^2\right)} + \frac{F_{\omega,p_2,q_2}}{2\pi\left(k_{p_1,q_1}^4 B^2 + i\gamma_{k2}\omega - \omega^2\right)}, \tag{8}$$

где k находится их (4).

На рис. приведен двумерный график амплитуды колебаний $\left|U_{\omega,p_1,q_1} + U_{\omega,p_2,q_2}\right|$ на комплексной плоскости частот при параметрах B = 2·105 см2/с, p1 = 1; q1 = 6; p2 = 2; q2 = 3; lx = 0,3см; ly = 0,9 см, Fω,p1,q1 = Fω,p2, q2 = 1.



Двумерный график амплитуды затухающих колебаний
двух нормальных мод на комплексной плоскости

Из рисунка видно, что комплексный спектр позволяет отличить две нормальные моды колебаний с одинаковыми частотами и разными коэффициентами затухания.

Формула (7) совпадает с выражением для диэлектрической проницаемости в [3], и все выводы этой работы можно распространить на акустику, в том числе ширина резонансной кривой по мнимой оси может быть уже, чем по действительной.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Юков Е. А. Спектроскопия // Физическая энциклопедия / Гл. ред. А. М. Прохоров. М.: Большая Российская энциклопедия, 1994. Т. 4. С. 625. 704 с
2. Бессонов Л. А. Теоретические основы электротехники. М.: Высшая школа, 1996. 638 с.
3. Розанов Н.Н. Комплексный резонанс и спектроскопия комплексных частот // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 90. вып. 6. С. 473-477.
4. Розанов Н. Н. Комплексный резонанс при френелевском отражении импульсов излучения // ЖЭТФ. 2010. Т. 138. вып. 4 (10). С. 605-611.
5. Розанов Н. Н. Комплексный резонанс при периодической раскачке осциллятора // Оптика и спектроскопия. 2012. Т. 112. № 6. С. 970-973.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. В 10 т. Т. 7. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.
7. Кузьменко А. П., Жуков Е. А. Упругие колебания в пластинчатом образце ортоферрита иттрия, индуцированные движущейся доменной границей // Письма в Журнал технической физики. 2006. Т. 32. вып. 1. С. 49-54.
8. Kuz'menko A.P., Zhukov E.A., Dobromyslov M.B. Excitation of bending vibration by a moving domain wall in a plate of yttrium orthoferrite. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, V. 302, I. 2, 2006, P. 436-438.
9. Kuz'menko A.P., Zhukov E.A., Dobromyslov M.B., Kaminsky A.V. Magneto-elastic resonant phenomena at the motion of the domain wall in weak ferromagnets // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2007, 310, I. 2. Part 2. P. 1610-1612.
10. Жуков Е.А., Жукова В.И., Кузьменко А.П., Щербаков Ю.И. Нелинейные магнитоакустические взаимодействия в слабых ферромагнетиках // Известия РАН, Сер. физ. 2010. Т. 74. № 10. С.1426-1428.
11. Petrov V. M., Srinivasan G. Theory of domain wall motion mediated magnetoelectric effects in a multiferroic composite // Physical Review B. 2014. Т. 90. №. 14. С. 144411.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЫ ПРИ ДВИЖЕНИИ В ОРТОФЕРРИТЕ ИТТРИЯ С МАГНИТНЫМИ И ПРОДОЛЬНЫМИ АКУСТИЧЕСКИМИ ВОЛНАМИ

Е. А. Жуков[1], В. И. Жукова[2]

[1]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
[2]ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
г. Хабаровск, e-mail: v-i-zhukova@yandex.ru

В данной работе изучается взаимодействие доменной границы в движущейся со сверхзвуковой скоростью в ортоферрите иттрия, с магнитными и продольными акустическими волнами.

Введение. В ортоферрите иттрия ($YFeO_3$), как было отмечено в работах [1-3], движение доменных границ (ДГ) приводит к торможению и генерации акустических волн.

Из работ [3-8] следует, что при скоростях отличных от скоростей распространения звуковых и спиновых волн, на торможение доменных границ влияет возбуждение поверхностных волн. В исследованиях [1-8] все же отсутствует полное и последовательное объяснение особенностей, возникающих при движении доменной границы (ДГ) в слабых ферромагнетиках. Именно этот эффект лежит в основе возможности создания генератора гиперзвуковых поперечных акустических волн [9, 10].

© Жуков Е. А., Жукова В. И., 2018

В предлагаемой работе рассматривается взаимодействие доменной границы (ДГ) в ортоферрите иттрия одновременно с продольными акустическими и магнитными и волнами. В результате исследования сделан вывод о том, что на скоростях, отличных от скоростей акустических и спиновых волн многоволновое взаимодействие может привести к торможению доменной границы.

Постановка задачи. Будем рассматривать вектора намагниченности $\mathbf{m} = (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2)/2M$ и антиферромагнетизма $\mathbf{l} = (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)/2M$, где $\mathbf{M}_1$, $\mathbf{M}_2$ – намагниченности подрешеток, $\mathbf{M}_1^2 = \mathbf{M}_2^2 = M^2$ в двухподрешеточном приближении, тогда они будут связаны соотношениями $\mathbf{ml} = 0$, $\mathbf{m}^2 + \mathbf{l}^2 = 1$ [1, 11]. В предположении, что оси координат **x**, **y**, **z**, совпадают с кристаллографическими осями **a**, **b**, **c**, векторы **m** и **l** в полях, меньших полей опрокидывания, $\mathbf{m}^2 << \mathbf{l}^2 \approx 1$ в равновесном состоянии будут тогда ориентированы вдоль **z** и **x** соответственно. Обозначим $\theta_{1,2}$ - азимутальный и $\varphi_{1,2}$ - полярный углы векторов намагниченности подрешеток $\mathbf{M}_{1,2}$ в сферической системе координат где $\theta_1 = \pi/2 - \upsilon + \varepsilon$, $\theta_2 = \pi/2 + \upsilon + \varepsilon$, $\varphi_1 = \varphi + \beta$, $\varphi_2 = \pi + \varphi - \beta$. Тогда параметры $\beta, \varepsilon, \varphi, \upsilon$ при небольшом отклонении от рассматриваемой равновесной спиновой конфигурации $\varphi, \upsilon << 1$, и малом изломе подрешеток $\beta, \varepsilon << 1$ будут совпадают с проекциями векторов **l**, **m**: $\mathbf{l} = (1, \varphi, \upsilon)$; $\mathbf{m} = (0, \beta, -\varepsilon)$.

В [9] показано, что при заданной структуре ДГ и при малых возмущениях $u_l << 1$, $\upsilon = \upsilon_0 + \upsilon_1$; $\upsilon_1 << \upsilon_0$ уравнения взаимодействия ДГ с продольными акустическими волнами в квадратичном приближении имеют вид:

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{b_3}{2A}\cos(2\upsilon_0)\right)\upsilon_1 = -\frac{\delta_l}{A}\frac{\partial u_l}{\partial x}\left[\sin(2\upsilon_0) + \upsilon_1\cos(2\upsilon_0)\right];$$

$$\left(\frac{1}{s_l^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_l = -\frac{\delta_l}{\rho s_l^2}\frac{\partial \upsilon_0}{\partial x}\left[\left(1 - 2\upsilon_1^2\right)\sin(2\upsilon_0) + 2\upsilon_1\cos(2\upsilon_0)\right] +$$

$$+\frac{\delta_l}{\rho s_l^2}\frac{\partial \upsilon_1}{\partial x}\left[\sin(2\upsilon_0) + 2\upsilon_1\cos(2\upsilon_0)\right]; \qquad (1)$$

где u_l – компоненты вектора деформации вдоль оси **x** (продольная волна); ρ – плотность; δ_i – магнитоакустические константы; b_3 – константа анизотропии; s_l – скорость объемных продольных звуковых волн; A – постоянная обменной энергии. Определим структуру ДГ уравнениями [1]

$$\cos\upsilon_0 = \mathrm{th}\left(\frac{x - vt}{D_3}\right); \qquad D_3 = \sqrt{\frac{A}{b_3}\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}.$$

Для нахождения решения системы уравнений (1) будем следовать методике [12], как показано в [9]. Предполагаем, что с этими волнами взаимодействует спектральная составляющая магнитоакустического напряжения ДГ, пропорциональная $\sim e^{i\omega t - ikx}$.

Акустические, магнитные волны и спектральные компоненты магнитоакустических напряжений доменной границы подчинены законам дисперсии в виде [1]:

$$\omega = kv; \ \omega_a = s_l k_a; \qquad \omega_s = \sqrt{\omega_3^2 + c^2 k_s^2}; \qquad \omega_3^2 = \frac{b_3 c^2}{A}. \qquad (2)$$

Пусть выполнены условия фазового синхронизма

$$\omega = \omega_s + \omega_a + \Delta\omega; \ \ k = k_s + k_a + \Delta k, \qquad (3)$$

тогда будут справедливы соотношения

$$k_a = \frac{\omega_s + \Delta\omega - (k_s + \Delta k)v}{v - s_l};$$

$$k = k_s + \Delta k + \frac{\omega_s + \Delta\omega - (k_s + \Delta k)v}{v - s_l} = \frac{\omega_s + \Delta\omega - (k_s + \Delta k)s_l}{v - s_l};$$

$$\omega_a = s_l \frac{\omega_s + \Delta\omega - (k_s + \Delta k)v}{v - s_l};$$

$$\omega = \omega_s + \Delta\omega + s_l \frac{\omega_s + \Delta\omega - (k_s + \Delta k)v}{v - s_l} = v \frac{\omega_s + \Delta\omega - (k_s + \Delta k)s_l}{v - s_l}.$$

Воспользуемся методом теории возмущений, где

$$u_l = u_l^0 + u_l^{(1)}; \quad \upsilon_1 = \upsilon_1^{(0)} + \upsilon_1^{(1)}. \tag{4}$$

Тогда (1) в нулевом приближении система уравнений преобразуется к виду

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{b_3}{2A}\cos(2\upsilon_0)\right)\upsilon_1^{(0)} = 0; \quad \left(\frac{1}{s_l^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_l^{(0)} = 0. \tag{5}$$

И решение системы уравнений (5), согласно [13], имеет вид

$$u_l^{(0)} = A_2 e^{i\omega_a t - ik_a x}; \quad \upsilon_1^{(0)} = A_1\left[\text{th}\left(\frac{x - vt}{D_3}\right) - iD_3 E\right]e^{i\omega_s t - ik_s x}, \tag{6}$$

где

$$E = \frac{\omega_s v - k_s c^2}{c^2 - v^2}.$$

Здесь A_1, A_2 – константы. Таким образом, с учетом доменной границы решения (6) в нулевом приближении совпадают с нормальными модами магнитной и акустической волн [13].

Метод медленно меняющихся амплитуд. Следуя [9], [12], решение системы (1) в первом приближении определим в виде медленно меняющихся амплитуд:

$$u_l^{(1)} = A_2(x - vt)e^{i\omega_a t - ik_a x} + \text{к.с.} \tag{7}$$

$$\upsilon_1^{(1)} = A_1(x - vt)e^{i\omega_s t - ik_s x} + \text{к.с.}$$

После подставки решение (4) с учетом (6), (7) в систему уравнений (1), преобразуем полученную систему. Оставим только слагаемые, удовлетворяющие условиям фазового синхронизма. Далее будем предполагать, что во взаимодействии участвует спектральная составляющая доменной границы, пропорциональная $\sim e^{i\omega t - ikx}$. Воспользуемся выражениями для магнитоакустического напряжения доменной границы - законы дисперсии взаимодействующих волн и условия фазового синхронизма (2) и (3), которые следуют из ее заданной структуры. Пренебрегая вторыми производными, окончательно получаем укороченные уравнения для амплитуд, которые при отсутствии волновой расстройки $\omega = \omega_s + \omega_a$; $k = k_s + k_a$ в квазистационарном случае принимают вид:

$$\frac{\partial A_1}{\partial \varsigma} = \Gamma A_1 + NA_2^*;$$

$$\frac{\partial A_2^*}{\partial \varsigma} = RA_2^* + PA_1, \tag{8}$$

здесь ς – координата, перпендикулярная плоскости доменной границы, в движущейся системе координат $\varsigma = (x - vt)$;

$$\Gamma = -\frac{\delta_l D_3^2}{Ak_s}\frac{k\pi}{ch\left(\frac{kD_3\pi}{2}\right)};\ldots\ldots N = -i\frac{\delta_l k_a D_3^2}{Ak_s}\frac{k\pi}{ch\left(\frac{kD_3\pi}{2}\right)}e^{ik\zeta};$$

$$R = -\frac{\delta_l D_3^2}{\rho k_a s_l (v + s_l)}\frac{k\pi}{\text{ch}\left(\frac{kD_3\pi}{2}\right)}; \tag{9}$$

$$P = i\frac{\delta_l \pi}{\rho k_a s_l (\nu + s_l)}\left(k_s \frac{kD_3^2}{ch\left(\frac{kD_3\pi}{2}\right)} + \frac{kD_3}{2sh\left(\frac{kD_3\pi}{2}\right)} - \frac{1}{4ch\left(\frac{kD_3\pi}{2}\right)} + \frac{k^2 D_3^2}{4ch\left(\frac{k\pi D_3}{2}\right)} \right) e^{-ik\zeta}.$$

Таким образом, огибающие амплитуд зависят только от одной координаты ς в системе движущейся доменной границы, а фазовые скорости волн различны.

Решение системы уравнений (8), (9) можно получить , используя методику [12], где показано, что при выполнении условий синхронизма для трех-волновых взаимодействий возможна перекачка энергии между волнами. В настоящей работе роль одной из волн играет спектральная составляющая магнитоакустических напряжений доменной границы , которая при фиксированной скорости считается заданной. На определенных скоростях движение доменной границы может приводить к одновременной генерации акустической и магнитной волн и к их усилению.

Заключение. Из приведенных расчетов следует, что по теоретической модели многоволнового взаимодействия магнитной и акустической подсистем с ДГ в ортоферритах иттрия можно создавать регулируемый усилитель гиперзвуковых волн в диапазоне сотен гигагерц. Кроме того, можно усиливать магнитные волны при акустической накачке.

На протяженном участке ($k_s \sim 1–10^4$ см$^{-1}$), по закону дисперсии магнитных волн, частота магнитных волн около 0,4 ГГц, поэтому оптическими методами измерение параметров магнитных волн можно применять для косвенного измерения параметров гиперзвука с длиной волны до 10 нм.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Dynamics of topological magnetic solitons. Experiment and theory / V. G. Bar'yakhtar, M. V. Chetkin, B. A. Ivanov, S. N. Gadetskii // Springer Tracts in Modern Physics. Berlin, 1994. Vol. 129.
2. Звездин А. К., Мухин А. А. Магнитоупругие уединенные волны и сверхзвуковая динамика доменных границ // ЖЭТФ. 1992. Т. 102. Вып. 2. С. 577-599.
3. Kuz'menko A.P., Zhukov E.A., Zhukova V.I., Li Tsz., Kaminskii A.V. Study of the structural and dimensional features of the magnetization reversal in transparent weak ferromagnets // The Physics of Metals and Metallography. 2008. Т. 106. № 2. С. 164-172.
4. Kuz'menko A.P., Zhukov E.A., Dobromyslov M.B., Kaminsky A.V. Magneto-elastic resonant phenomena at the motion of the domain wall in weak ferromagnets // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2007. Т. 310. № 2 SUPPL. PART 2. С. 1610-1612.
5. Кузьменко А. П., Жуков Е. А., Ли Ц. Резонансное возбуждение магнитоупругих колебаний в ортоферритах одиночной доменной границей. Вестник Тихоокеанского государственного университета, 2005, №1, с. 9-24..
6. Ким П. Д., Хван Д. Ч. Вынужденные колебания доменной стенки на высоких частотах // Физика твердого тела. 1982. Т. 24. Вып. 8. С. 2300-2304.
7. Звездин А. К., Попков А. Ф. Распространение спиновых волн в движущейся доменной границе // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. Вып. 8. С. 348-351.
8. Жуков Е.А., Кузьменко А.П., Щербаков Ю.И. Торможение движущейся доменной границы в слабых ферромагнетиках // Физика твердого тела. 2008. Т. 50. В. 6. С. 1033-1036.
9. Жуков Е. А., Жукова В. И., Каминский А. В., Корчевский В. В., Римлянд В. И. Метод генерации, усиления, и измерения параметров гиперзвуковых волн в магнитных кристаллах // Вестник Тихоокеанского государственного университета. 2012. № 3 (26). С. 17-27.
10. Komina O. Yu., Adamova M. E., Zhukov E. A., Kuz'menko A.P., Zhukova V. I. Generation of nanometer wavelength acoustic waves // Journal of Nano- and Electronic Physics. 2016. V. 8. No 4. P. 04020(3pp).
11. Туров Е. А., Колчанов А. В., Меньшенин В.В., Мирсаев И. Ф., Николаев В. В. Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. М.: Физматлит, 2001. 560 с.
12. Bloembergen N. Nonlinear Optics. New York.: Benjamin, 1965. 172 с.
13. Барьяхтар И. В., Иванов Б. А. Динамическое торможение доменной границы в слабом ферромагнетике. Киев: ИТФ АН УССР, 1983. Препринт ИТФ-83-111Р. 28 с.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ОБЛУЧЕННОГО ЭЛЕКТРОНАМИ КРИСТАЛЛА ТГС В МОДЕЛИ ДЖИЛЛА-АТЕРТОНА

И. Б. Копылова, Д. В. Бадяй

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: kopylovaib@list.ru

В статье представлены результаты моделирования процесса переполяризации облученного электронами кристалла ТГС в модели Джилла–Атертона, приведены зависимости параметров облученного кристалла от поглощенной дозы облучения. Модель показала хорошее совпадение результатов моделирования с экспериментом

Моделирование сложных физических процессов является основным инструментом для предсказания свойств материалов, изготовление которых требует значительных затрат. Сегнетоэлектрические материалы довольно широко используются в современной электронике. В чистых кристаллах можно создать униполярное состояние различными способами. В частности в кристаллах триглицинсульфата (ТГС) можно создать униполярную структуру в процессе облучения электронами. Для закрепления эффекта униполярности облучение предварительно заполяризованного кристалла проводится в растровом электронном микроскопе в режиме короткого замыкания, что приводит к образованию облученного слоя, свойства которого отличаются от свойств остального кристалла. В процессе облучения происходит переполяризация кристалла под действием электрического поля индуцированного накопленными в облученном слое электронами [1].

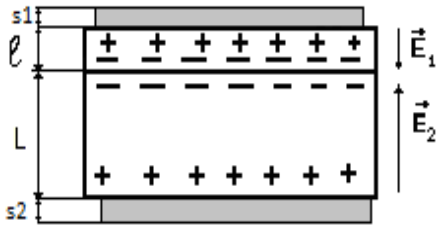


Рис. 1. Общий вид облученного кристалла с электродами

В облученных кристаллах наблюдается упругая стабилизация спонтанной поляризации, существовавшей в образце до облучения за счет закрепления доменных стенок на дефектах, которые эффективно подавляют колебания доменных границ вплоть до полного их выключения.

Электрические поля в облученной и необлученной частях кристалла находятся в соотношении:

$$E_1 l = E_2 L, \tag{1}$$

Соответственно поля в обоих частях кристалла можно найти по соотношениям

$$E_1 = \frac{q_1}{2\varepsilon\varepsilon_0 S_1}, \qquad E_2 = \frac{q_2}{2\varepsilon\varepsilon_0 S_2}, \tag{2}$$

где q_1 и q_2 – положительные заряды на электродах, E_1 и E_2 – электрическое поля, l – толщина облученного слоя, L – толщина образца.

Зависимость вектора поляризации от напряженности внешнего поля для сегнетоэлектрического кристалла представляет собой замкнутую кривую, которая является симметричной. Для облученного кристалла зависимость не является симметричной, имеется явно выраженная униполярность, которая сохраняется длительное время. Зависимость вектора

© Копылова И. Б., Бадяй Д. В., 2018

поляризации от напряженности внешнего поля может быть использована для моделирования процесса переполяризации в облученных кристаллах (рис. 2).

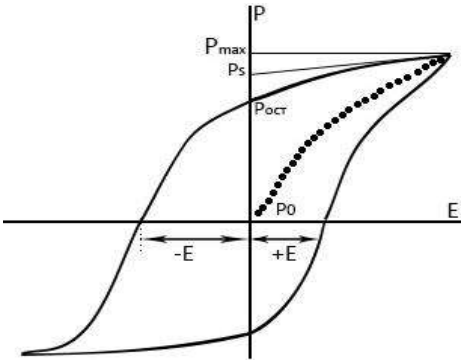


Рис. 2. Зависимость вектора поляризации от напряженности внешнего поля

Для моделирования процесса переполяризации существуют различные модели, такие как Модель Прейзаха, модель Дуткевича-Турика или модель Джилла-Атертона. Для моделирования процесса переполяризации в облученных кристаллах ТГС была выбрана одномерная модель для переполяризации сегнетоэлектрика – модель Джилла – Атертона. Модель имеет ряд преимуществ: 1) учитывает 180 градусный поворот доменов при переполяризации, 2) имеется возможность связать математические параметры модели с параметрами кристалла, 3) простота реализации.

Зависимость для математического описания зависимости вектора поляризации от напряженности электрического поля (сегнетоэлектрический гистерезис ***P(E))*** и представляется системой уравнений (3)[2].

$$\begin{cases} \frac{d\boldsymbol{P}}{d\boldsymbol{E}} = c\frac{d\boldsymbol{P}_{max}}{d\boldsymbol{E}} + \tilde{\delta}\frac{\boldsymbol{P}_{max}-P_0}{\delta m-[\frac{\alpha}{(1-c)}](\boldsymbol{P}_{max}-P_0)} \\ P_{max} = P_s\left[cth\left(\frac{E+\alpha P_0}{n}\right)-\frac{n}{E+\alpha P_0}\right] \end{cases} \quad (3)$$

Коэффициенты c, m, n связаны с физическими параметрами кристалла:

$$\mathrm{c} = E_{\text{вн}}, \qquad m = E_{\text{к}}\,, \qquad n = \frac{k_* T}{p_s}, \quad (4)$$

где P_{max} – максимальное значение поляризации, α – поляризуемость материала, k_* - постоянная Больцмана, T – температура при проведении измерения, P_s – остаточная поляризация, $E_{вн}$-внутреннее поле, $E_к$-коэрцитивное поле.

Максимально возможное значение поляризации P_{max}складывается из спонтанной и индуцированной. После того, как как спонтанная поляризация достигает своего максимума (все домены стали упорядочены по полю) (точка Ps), начинается индуцированная поляризация (за счет ионно/молекулярных смещений). Она имеет линейный характер возрастания. Это ещё одно преимущество модели – возможность учесть индуцированную часть поляризации.

Данная модель хорошо работает при описании процесса переполяризации необлученного кристалла, для облученного кристалла параметры переполяризации имеют другие значения. Прежде всего, значение внутреннего поля зависит от толщины облученного слоя, толщина облученного слоя зависит от дозы облучения [2]:

$$D = \frac{\sigma U \cdot 10^5}{l\rho} t\,, \quad (5)$$

где D – доза облучения, Мрад; U- ускоряющее напряжение, В; I – ток зонда (луча), А; ρ = 1,6 г/см^3; t – время облучения кристалла, с; S – площадь облучённого кристалла, м^2; l – глубина проникновения заряда.

Соответственно, внутренне поле также зависит от толщины облученного слоя, зависимость вектора поляризации от напряженности электрического поля ***P(E)*** несимметрична, что можно учесть значением параметра m:

$$E_{\text{внут}} = \frac{q}{2\varepsilon\varepsilon_0 S}\left(\frac{l}{L}\right), m = \frac{-E}{+E} \quad (6)$$

Подставив соотношения (5) и (6) в модельное уравнение получим модельное уравнение для облученного электронами кристалла ТГС. Так как в соотношение (5) входит укоряющее напряжение U, то можно определить значение вектора поляризации при различных энергиях электронов.

$$\frac{d\boldsymbol{P}}{d\boldsymbol{E}} = \frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0}\left(\frac{\frac{D\rho}{\sigma U \bullet 10^5}}{L}\right)\frac{dP_{max}}{d\boldsymbol{E}} + \tilde{\delta}\frac{P_{max} - \boldsymbol{P}_0}{\delta E_к - [\frac{\alpha}{\left(1 - \frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0}\left(\frac{\frac{D\rho}{\sigma U \bullet 10^5}}{L}\right)\right)}](\boldsymbol{P}_{max} - \boldsymbol{P}_0)}$$

$$P_{max} = P_s\left[cth\left(\frac{E+\alpha P_0}{\frac{k_* T}{p_s}}\right) - \frac{\frac{k_* T}{p_s}}{E+\alpha P_0}\right] \quad (7)$$

Математическая модель реализуется с помощью метода Рунге-Кутта. Для начала итерационного процесса вводится значение P_0 – точка начала вычислительного процесса.

Программный комплекс был написан на языке программирования, высокого уровня, Python (версия 3). Высокоуровневый язык программирования позволяет нам изолировать семантику выполнения компьютерной архитектуры от спецификации программы, что делает процесс разработки программы более простым и понятным. Интерфейс пользователя предусматривает вывод результатов расчета в числовом и графическом виде.

Построение зависимости вектора поляризации от напряженности электрического поля ***P(E)*** и сравнение полученной зависимости с результатом эксперимента показывает хорошее совпадение [3] (рис. 3).

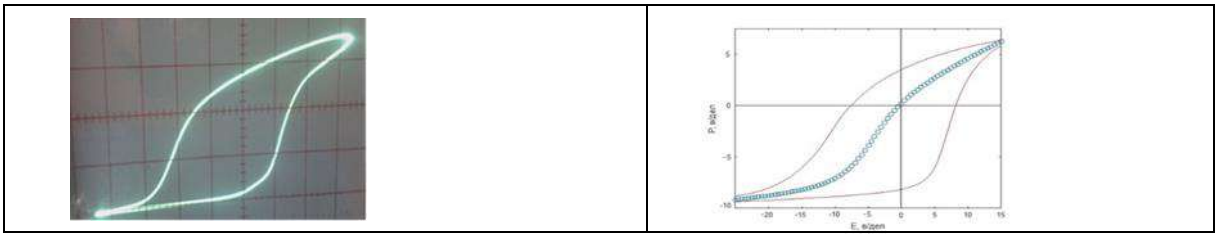


Рис. 3. Экспериментальные и модельные зависимости вектора поляризации от напряженности электрического поля

Решение уравнения позволяет определить различные параметры облученного кристалла, в том числе величину переключаемого заряда, которая пропорциональна площади фигуры, ограниченной кривой зависимости ***P(E).***Величина переключаемого заряда позволяет определить величину спонтанной поляризации.

Зависимость толщины облученного слоя от дозы облучения имеет следующий вид (рис. 4).

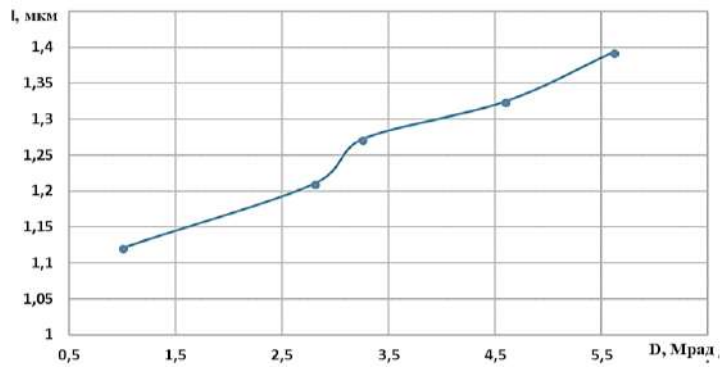


Рис. 4. Зависимость толщины облученного слоя от величины поглощенной дозы

Толщина облученного слоя увеличивается с ростом поглощенной дозы облучения. Зависимость толщины облученного слоя от величины поглощенной дозы облучения должна быть линейной. Однако из полученного графика видно, что зависимость не совсем линейна. На графике наблюдается скачок при дозах (от 2,80 до 3,25 Мрад.). Можно предположить, что при данных дозах наблюдается резкое увеличение количества дефектов и изменение механизма накопления. Зависимость между величиной переключаемого заряда и поглощенной дозой (рис. 5) не линейна и при дозах от 2,80 до 3,25 Мрад наблюдается резкое увеличение переключаемого заряда.

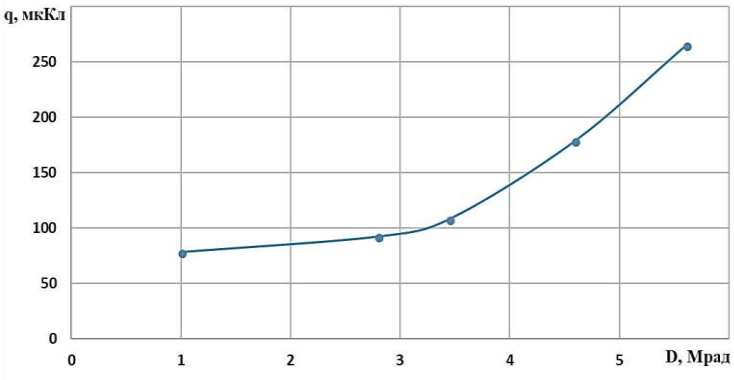


Рис. 5. Зависимость величины переключаемого заряда от поглощенной дозы облучения

Из зависимости спонтанной поляризации от поглощенной дозы (рисунок 6) установлено, что спонтанная поляризация уменьшается при росте дозы, что можно объяснить увеличением накапливающихся радиационных дефектов.

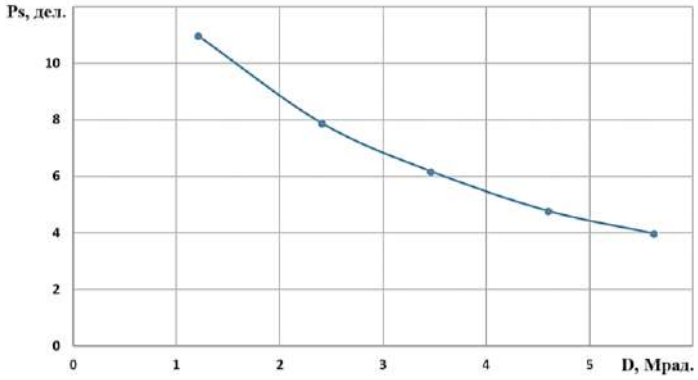


Рис. 6. - Зависимость спонтанной поляризации от величины поглощенной дозы облучения

Таким образом, моделирование процесса переполяризации в модели Джилла –Атертона позволяет не только воссоздать зависимость вектора поляризации от напряженности электрического поля ***P(E)***, но и установить зависимости параметров облученного кристалла от параметров облучения.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Копылова И. Б. Инжекция электронного зонда растрового электронного микроскопа в монокристаллы триглицинсульфата: дис.… канд. физ.-мат. наук. / И.Б. Копылова; АмГУ. Благовещенск, 1996. 180 с.
2. Белоконь А. В., Скалиух А. С. Математическое моделирование необратимых процессов поляризации. Ростов – на – Дону. 2011.
3. Бадяй Д. В., Копылова И. Б. Исследование модели Джилла – Атертона для определения параметров облученного электронами кристалла ТГС Вестник АмГУ. 2018. Вып. 81. С. 34-38.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ КОМПОЗИТА CuO И МНОГОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

А. П. Кузьменко, Чжо Аунг Хеин, Н. А. Хохлов

ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет»
г. Курск, e-mail: nikolakhokhlov@yandex.ru

Наноструктурированный композит оксида меди (II) и функционализированных многостенных нанотрубок (f-MWCNT) был получен как результат диффузии ионов меди и молекул CuO из медной поверхности (анод) в водную дисперсию f-MWCNT. Нанокомпозит представляет из себя оксид меди (II) кристаллизованный на поверхности агломерированных f-MWCNT. Наноструктурирование имеет размеры порядка 20 нм, в то время как структуры (глобулы) имеют размеры до 5мкм.

Применение углеродных нанотрубок (УНТ) в качестве материала поддержки каталитических наночастиц, в том числе металлических и оксиднометаллических [1–6]. Такое использование УНТ возможно благодаря таким свойствами УНТ как их хорошая химическая стабильность, большая эффективная площадь, уникальные электрические характеристики. Нами разработан новый метод электрохимического получения нанокристаллических структур оксида меди (II) на f-MWCNT из медного плоского анода. Такой метод отличается от обычных химических методов тем, что позволяет поддерживать сверхмалую концентрацию ионов меди в растворе, и, поэтому способствует наиболее равномерной кристаллизации CuO на поверхности УНТ, которые служат как центры кристаллизации оксида меди.

Использованные в исследовании MWCNT (производство Nanocyl, Бельгия), были синтезированы методом CCVD с кобальтовыми нанокатализаторами. Чистота MWCNT составляла не менее 90 %. В результате ультразвукового перемешивания при температуре до 40^{o}C, в кислотной среде (H_2SO_4 + HNO_3, в соотношении 3:1), в течение 4 часов были получены функционализированные MWCNT. Ультрадисперсная взвесь разбавлялась водой, фильтровалась, промывалась и сушилась. Уровень функционализации MWCNT (далее f-MWCNT) был определен по результатам IR-Фурье анализа (Nicolet iS50, 0.125 cm^{-1}). Были обнаружены изменения в IR-спектрах, которые соответствуют функционализации MWCNT [8]. Средний диаметр MWCNT, в соответствии с данными растровой электронной микроскопии (РЭМ), составлял ≈20 нм.

Для электрохимического получения нанокристаллических структур оксида меди (CuO) на f-MWCNT была изготовлена следующая конструкция: медный электрод (99.99%) с толщиной 0.45 мм и площадью 1 см^2. Этот медный электрод (анод) был закреплен параллельно и напротив центра графитового катода площадью 4 см^2 на расстоянии ≈1.5 см от него. Вся эта конструкция была помещена в ванну перемешанной взвеси f-MWCNT с водой (0.14 гр/мл). Приложенное напряжение (10 – 30 В) в течение 4 – 8 часов менялось, поддерживая

© Кузьменко А. П., Чжо Аунг Хеин, Хохлов Н. А., 2018

постоянный ток между электродами ≈10 мА. Затем питание отключалось, жидкость отстаивалась. Полученный осадок высыхал в атмосфере при н.у. в течении 48 часов. Полученный материал, осажденный и высушенный на ситалле, был истерт в ступе. Таким образом, был получен его порошок. Полученный порошок (далее *CuO/f-MWCNT)* затем исследовался методами РЭМ и рентгеноструктурного анализа (РСА). Серия из десяти таких экспериментов показала повторяемость результатов и их независимость от малых изменений условий и геометрии конструкции. Результат отжига порошка (при 450^{o}C далее называется наноструктурированным оксидом меди (II) (nsCuO).

На рис. 1 представлены результаты РЭМ для *CuO/f-MWCNT* и *nsCuO* . На рисунке мы видим цветкообразные глобулы имеющие размеры 50 – 500 мкм, которые свиты из нитей толщиной ≈20 нм. Как результат отжига морфология наноглобул несколько изменилась (ср. рис. 1 слева и справа) – визуально аморфная глобула локально уплотнилась. Тем не менее, наноструктуризация проявляется в обоих случаях. На рис. 1 мы видим и в *CuO/f-MWCNT,* и в *nsCuO* наличие линейных структур (нитей) с размерами порядка от 10 – 200 нм.

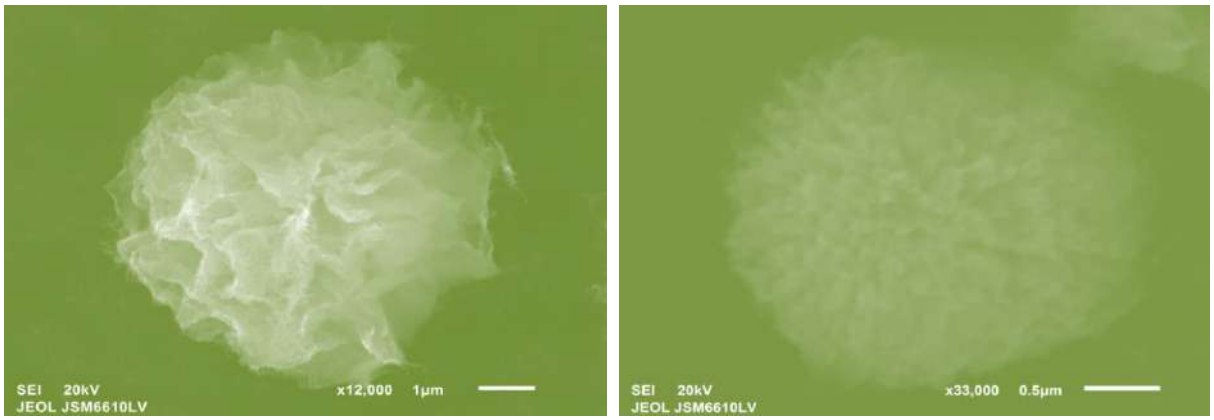


Рис. 1. Слева: результат РЭМ – наноглобулы CuO/fMWCNT до отжига. Справа: РЭМ – наноглобулы CuO (после отжига композита CuO/fMWCNT)

Результаты РСА для исходного композита CuO/f-MWCNT (нормальные условия) и при последующем отжиге в атмосфере, в течении часа при нескольких температурах – 50, 250 и 450^{o}C показаны на рис.2. Известно, что для MWCNT–COOH в РСА характерны пики графита 2θ≈25.7^o (002) и 42.4^o (100) и широкая структура при 2θ≈16.0^o [9]. В исходном образце мы можем видеть слабые пики при 2θ≈11.5^o;15.3^o;22.5^o. Эти пики пропадают уже при 250^{o}C, пик при 42.4^o исчезает после отжига материала при 450^{o}C. Таким образом, как результат электрохимического процесса нарушается первоначальная структура f-MWCNT за счет внедрения в нее дефектов (возможно ионов меди). В исходном образце мы можем также видеть пик при 2θ≈36.6^o. Этот пик исчез после часового отжига при 450^{o}C, при этом интенсивность соседних пиков оксида меди (II) при 2θ≈35.8^o (002, -111) и 2θ≈38.8^o (111, 200) выросла. Такое изменение интенсивностей пиков может быть связано с уменьшением дефектности наночастиц CuO. Эти наночастицы в условиях электрохимического синтеза могли включать гидроксокарбонаты меди ($CuCO_3 \cdot Cu(OH)_2$ и $2CuCO_3 \cdot Cu(OH)_2$), а также гидроксид меди $Cu(OH)_2$, все эти соединения при условиях отжига разлагаются с выходом CuO:

$$CuCO_3 \overset{290^o C}{\rightarrow} CuO + CO_2 \uparrow,$$

$$Cu(OH)_2 \overset{150^o C}{\rightarrow} CuO + H_2O \uparrow.$$

В соответствии со стандартными данными порошкового РСА [10] наиболее интенсивные пики гидроксида меди $Cu(OH)_2$ соответствуют 2θ≈23.5^o (021), 34.0^o (002) и 40.0^o (130). В нашем случае имеется некоторое отличие интенсивностей пиков CuO от стандартных данных порошкового РСА для оксида меди (II) [11].

Проведенный анализ результатов РЭМ и РСА позволяет сделать вывод о том, что на поверхности функционализированных многостенных углеродных нанотрубок в водном ультрадисперсном растворе в результате электрохимического процесса происходит нанокристаллизация оксида меди (II). Связанная с медленным растворением молекул CuO и ионов Cu^{+} с поверхности медного анода их малая концентрация приводит к равномерной нанокристаллизации CuO на поверхности структур f-MWCNT. Имеется существенная дефектность как полученных наноструктур CuO/fMWCNT в сравнении с криталлическим CuO и MWCNT, так и дефектность nsCuO (после отжига) по сравнению с кристаллическим CuO (по результатам РСА и КРС).

Таким образом, мы получили композит CuO/f-MWCNT, а также композит, состоящий из наноструктурированных глобул CuO сохранивших форму структур CuO/f-MWCNT. Этот результат показывает, что f-MWCNT могут быть использованы как формы для конструирования наноструктур CuO и, возможно других оксидов. Форма наноструктур CuO должна существенно влиять на их каталитическую активность, которая определяется, в основном, отношением площади поверхности катализатора к объему [17].

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (Госзадание №16.2814.2017/ПЧ).

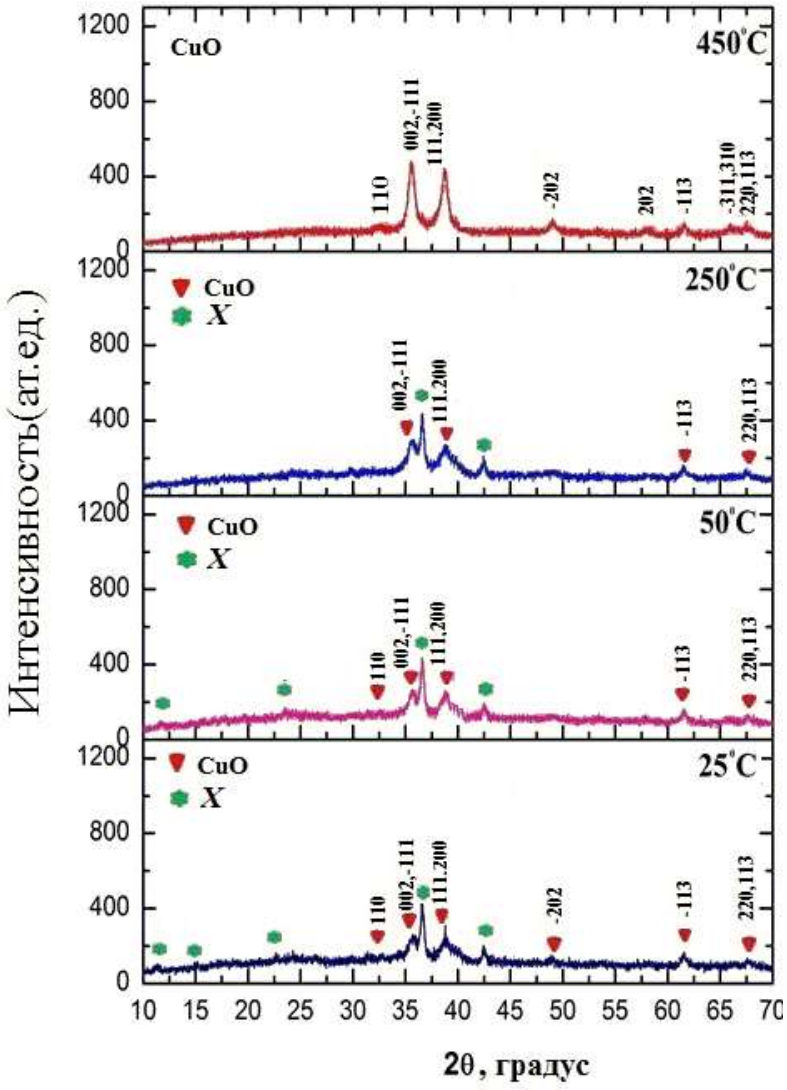


Рис. 2. Результат РСА для полученных композитов CuO/f-MWCNT и CuO (нагрев от исходной температуры 25°C до 450°C)

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Raja M. Studies on Electrochemical Properties of MnO_2 and CuO Decorated Multi-Walled Carbon Nanotubes as High-Performance Electrode Materials // Advanced Functional Materials, 2015, pp. 283-294.
2. Raja M., Subha J., Fathilah Binti Ali, et al ..Synthesis of Copper Nanoparticles by Electroreduction Process // Materials and Manufacturing Processes, 2008. Vol. 23. P. 782-785.
3. Yang Ch., Devasenathipathy R., Kohila K., et al..Synthesis of Multi Walled Carbon Nanotubes Covered Copper Oxide Nanoberries for the Sensitive and Selective Electrochemical Determination of Hydrogen Peroxide // Int. J. Electrochem. Sci., 12 (2017) 5910-5920.
4. Qiang H. W., Wen X. W., Wang M. S., et al..Synthesis of copper oxide nanoparticles using carbon nanotubes as templates // Phys. Chem. Lett. 2002. Vol. 364. P. 152-156.
5. Dr. Rajaraoa R., Jayannab R. P., Dr. Sahajwallac V., et al .. GreenApproach to Decorate Multi-Walled Carbon Nanotubes by Metal/Metal Oxide Nanoparticles // Procedia Materials Science 5 (2014) 69-75.
6. Yang Z., Feng J., Qiao J., et al..Copper oxide nanoleaves decorated multi-walled carbon nanotube as platform for glucose sensing. // Anal. Methods. 2012. Vol. 4. P. 1924-1926.
7. Zheng J., Zhang Q., He X., et al.. Nanocomposites of Carbon Nanotube (CNTs)/CuO with High Sensitivity to Organic Volatiles at Room Temperature // Procedia Engineering.2012. Vol. 36. P. 235-245.
8. Pheladi M. M, Magadzu T., Mkhondo B.. Decoration of Multi-walled Carbon Nanotubes by Metal Nanoparticles and Metal Oxides using Chemical Evaporation Method // J. Chem. 2013. Vol. 66. P. 173-178.
9. Кузьменко А. П., Хохлов Н. А., Кочура А. В., Рослякова Л. И., Ф. Ф. Ниязи, Тет Пьо Наинг, Ней Вин Аунг ..Самоорганизация стабилизированных одностенных углеродных нанотрубок в постоянном электрическом// Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2017. Т. 7, No 4(25). С. 117-127.
10. S. H. Pisal S.H, Harale N.S., Bhat T.S., Deshmukh H.P., Patil P.S.. Functionalized Multi-Walled Carbon Nanotubes for Nitrogen Sensor // IOSR Journal of Applied Chemistry (IOSR). 2014. Vol. 7, I. 11, pp. 49–52.
11. JCPDS Card No. 80-0656.
12. JCPDS Card No. 48-1548.
13. H. Hagemam, H. Bill, W. Sadowski, E. Walker and M. Franqois ..Raman spectra of single crystal CuO// Solid State Communicatlone, Vol. 73. No. 6, pp. 447-451, 1990.
14. H. F. Goldstein, Daisik Kim, Peter Y. Yu and L. C. Bourne. Phys. Rev. B 41, 7192 (1990).
15. H. Rosen, E. M. Engler, T. C. Strand, V. Y. Lee and D. Bethune.. Phys. Rev. B 36, 726 (1987).
16. J. F. Xu,1* W. Ji,1 Z. X. Shen,1 W. S. Li,1 S. H. Tang,1 X. R. Ye,2 D. Z. Jia2 and X. Q. Xin2..Raman Spectra of CuO Nanocrystals // J. Raman Spectrosc. 30, 413-415 (1999).
17. Konar S., Kalita H., Puvvada N., et al..Shape-dependent catalytic activity of CuO nanostructures // Journal of Catalysis. 2016. Vol. 336. Pp. 11-22.
18. Felixa S., Santhoshb C., Nirmala A. Gracec.. CuO-MWCNTS for Enzyme-Less Electrochemical Detection of Glucose and Dopamine // ECS Transactions, 2017. vol. 77(11). pp. 1847-1857.

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ТЕРМИЧЕСКУЮ ДЕГИДРАТАЦИЮ ПРИРОДНОГО КЛИНОПТИЛОЛИТА

С. В. Ланкин

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
г. Благовещенск, e-mail: svlankin@yandex.ru

Проведено исследование влияния механической обработки порошка природного клиноптилолита Вангинского месторождения Амурской области. Были использованы: агатовая мельница, сканирующая электронная микроскопия (СЭМ), рентгеноструктурный и спектральный анализы, дериватограф Q-1000. Первоначальный средний размер частиц клиноптилолита составил 100-150 мкм, а после получасовой обработки – 50,0 мкм. Обнаружено, что после измельчения удельная поверхность увеличилась до 3,5 м^2/кг, механическая прочность – до 50 МПа, термическая стойкость возросла до 400 °С, плотность и влагосодержание не изменились. Рентгеноструктурный анализ показал, что обработанный на мельнице порошок клиноптилолита состоит из нескольких фаз: моноклинный, орторомбический и тетрагональный сингоний.

© Ланкин С. В., 2018

Природные цеолиты, которыми богата Амурская область [11-13], относятся к уникальным неорганическим сорбентам. В настоящее время широко используются в качестве эффективных систем для очистки воды, газов, почвы, нефти, а также в качестве наполнителей при производстве бетона. Физико-химические свойства цеолитов (клиноптилолита, морденита) существенно зависят от основной фазы в рудной породе, примесей, очистки. Эти обстоятельства ограничивают их применение в ряде областей (здравоохранение, сельское и рыбное хозяйство, атомная промышленность, экология и т.д.) Помимо этого, разнообразие структуры, состава не позволяют провести фундаментальные исследования влияния кристаллических параметров цеолитов на их каталитические, сорбционные и др. свойства, важные для практики.

Одним из перспективных направлений является измельчение микро размеров зерна порошка цеолитов до нано размеров, чтобы в дальнейшем найти им применение в получении нано-бетонов и др. материалов. Цель работы – исследовать влияние механической обработки местных цеолитов на их дегидратацию в процессе нагревания.

В качестве исходного минерала применялся природный клиноптилолит Вангинского месторождения Амурской области. Породы представляют собой туф вулканогенно-осадочного происхождения [6, 11-13], содержащий цеолит от 60 до 80 % и до 20 % обломков кремнистых пород. На рис. 1 и 2 представлены энергодисперсионный спектр и СЭМ изображение порошка клиноптилолита.

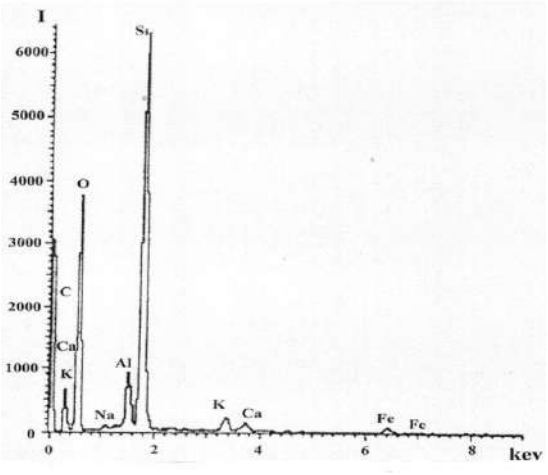


Рис. 1. Энергодисперсионный спектр клиноптилолита

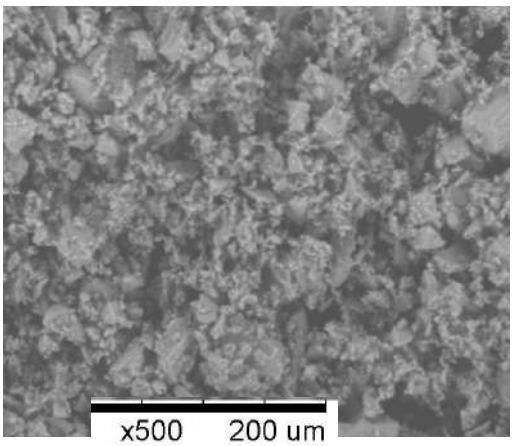


Рис. 2. СЭМ изображение поверхности образца

Усредненный химический состав кристаллов клиноптилолита по атомно-адсорбционному анализу приведен в работе [5]. Кинетика термической дегидратации природного клиноптилолита представлена в работах [1, 2, 4, 6, 8-12]. Дегидратация цеолитов до определенной температуры происходит обратимо. При нагревании минералов выше критической температуры в динамическом режиме становится необратимой, в этом случае считается, что количество воды в цеолите зависит только от температуры (изобарическая дегидратация). На Рис. 3 представлены зависимости электропроводности клиноптилолита от влагосодержания в исследуемом образце, а на Рис.4 – выход влаги (%) с ростом температуры в клиноптилолите. Как видно из приведенных рисунков, с ростом температуры возрастает выход воды из капилляров и пор минерала; одновременно увеличивается электропроводность, которая растет по экспоненциальному закону. Экспериментально это подтверждается в ранних наших работах [6, 7].

Механическую обработку клиноптилолита проводили в агатовой мельнице. Время обработки от 1 до 30 мин. Методику заимствовали из работ [1, 3, 4]. В ходе эксперимента обнаружили, что если первоначальный средний размер зерен порошка равнялся 100-150 мкм, то после получасовой обработке в мельнице равнялся 50 мкм. Большинство частиц потеряли первоначальную форму, уменьшили средний размер и стали близки к шарообразной форме.

σ, 10^{-5} См·м

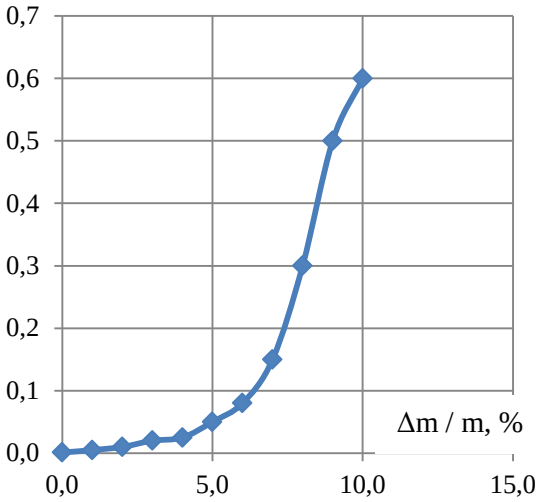


Рис. 3. Зависимость σ от Δm / m клиноптилолита

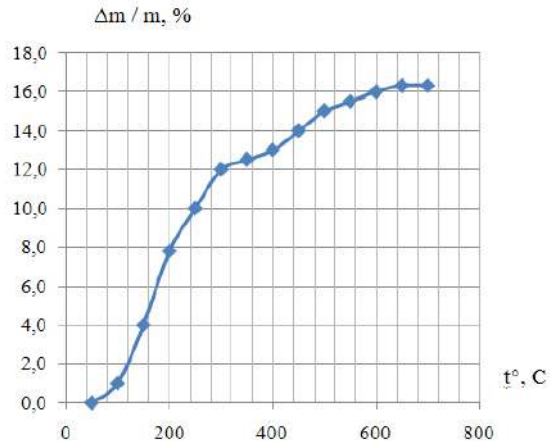


Рис. 4. Термическая зависимость воды в образце

Экспериментально параметры дегидратации можно определить термическим методом анализа. Нами были сняты термограммы (ТГ – термогравиметрическая, т.е. Δm и ДТ – дифференциально-термическая, т.е. Δt) на дериватографе Q-1000. Запись термических кривых для различных образцов клиноптилолита при одних и тех же условиях. На Рис. 5 приведены экспериментальные термические зависимости ТГ и ДТ.

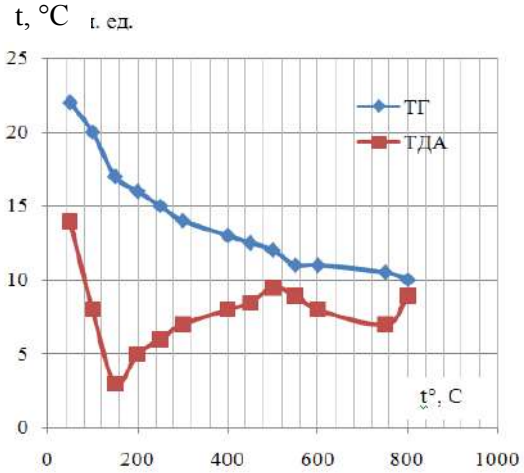


Рис. 5. Кривые ТГ, ТД клиноптилолита

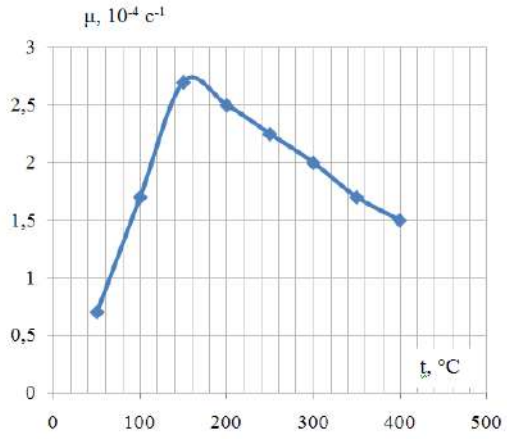


Рис. 6. Зависимость коэффициента μ от температуры

На всех кривых для исследуемых образцов отмечается плавный (непрерывный) характер дегидратации, свойственный клиноптилолиту. На кривой ДТ имеется единственный широкий относительно симметричный, эндотермический пик в интервале температур от 20 до 500 °С, связанный с уходом основной массы цеолитной воды (до 90 %). При температурах выше 500 °С наблюдается выход оставшейся воды, более связанной со структурой цеолита. Кривые ТГ и ДТ немного отличаются от таковых для исходного порошка со средним размером зерна – 100 мкм.

На рис. 6 представлена расчетная температурная зависимость коэффициента массовой потери (μ) для клиноптилолита. Расчет произведен по формулам, взятым из нашей работы, выполненной в 2002 году [12]. Полученная зависимость коэффициента μ от времени коррелирует с экспериментальными кривыми ТГ и ДТ (Рис. 5). С увеличением скорости нагрева образцов пик массопотери смещается в область высоких температур.

Рентгеноструктурный анализ показал, что исследуемый порошок клиноптилолита в процессе механической обработки на мельнице изменяет параметры кристаллической ячейки и

состоит из трех фаз: моноклинной, орторомбической и тетрагональной сингонии. Установлено, что после измельчения зерна площадь удельной поверхности увеличилась до $35 \cdot 10^3$ м^2/кг и возросла механическая прочность до 50 МПа. Термическая стойкость и плотность – не изменились.

Выводы:

1. Установлено, что механическая обработка клиноптилолитового порошка приводит к уменьшению среднего размера частиц и увеличению площади удельной поверхности. Длительная обработка вызывает агломерацию частиц и снижает удельную поверхность на 3 порядка.
2. Механическая обработка приводит к росту микро искажений кристаллической решетки.
3. Теоретическая изобара дегидратации клиноптилолита соответствует экспериментальной зависимости m = f(t).

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Белицкий И.А. Регидратация природных цеолитов // Геология и геофизика, 1971. № 1. С. 12-21.
2. Брек Д. Цеолитовые молекулярные сита. М.: Мир, 1976. 781 с.
3. Голохваст К.С., Паничев А.М., Чекрыжов И. Ю., Кусайкин М.И. Способ измельчения природного цеолита для производства биологически активных добавок // Химико-фармацевтический журнал, 2016. Т. 44. № 2. 37-40.
4. Дементьев С.Н., Дребущак В.А. Дегидратация цеолитов нагреванием в динамическом режиме // Геохимия, 1992. № 9. С. 1361-1367.
5. Евдокимова В. А., Ланкин С. В. Структурные изменения клиноптилолита в процессе его дегидратации // Научно-технический вестник Поволжья. Казань, 2015. № 2. С. 19-23.
6. Колесникова Л. Г., Ланкин С. В., Юрков В. В. Ионный перенос в клиноптилолите. Благовещенск: Изд-во БГПУ, 2007. 113 с.
7. Ланкин С. В., Евдокимова В. А., Карацуба Л. П. Эмпирические методы исследования адсорбции ПАУ природным цеолитом. – LAPLAMBERT Academic Publisching. Berlin, 2013. 94 с.
8. Ланкин С. В. Адсорбция паров воды клиноптилолитом // Научный журнал «Globus». СПб, 2016. 3 часть. С. 90-92.
9. Ланкин С. В. Исследование тепловлагопереноса в природных клиноптилолитах // Международный научно-исследовательский журнал «Евразийский Союз Ученых». М., 2018. № 3 (48). С. 21-23.
10. Решетин О. Л., Орлов С. Ю. Теория переноса тепла и влаги в капиллярно-пористом теле // Журнал технической физики, 1998. Т.68. № 2. С. 140-142.
11. Рогулина Л. И., Юрков В. В. Особенности минерального состава цеолитов Амурской области // Литосфера, 2005. № 1. С. 149-157.
12. Юрков В. В., Ланкин С. В., Мельникова М. А. Кинематика термической дегидратации природного клиноптилолита // Вестник Амур. НЦ ДВО РАН. Благовещенск: Изд-во Амур НЦ, 2002. Вып. 3. С. 29-32.
13. Юрков В. В., Ланкин С. В., Барышников С. В. Цеолиты Амурской области // Вестник ДВО РАН, 2004. № 1. С. 69-79.

АДСОРБЦИЯ 3,4-БЕНЗПИРЕНА ПОРОШКАМИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Т. А. Мередели́на, С. В. Барышников

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»

г. Благовещенск, e-mail: biofirm@mail.ru

Исследованы адсорбционные свойства сегнетоэлектрических порошков $BaTiO_3$ и $PbTiO_3$ по отношению к молекуле 3,4-бензпирена. Показано, что сегнетоэлектрики являются наиболее эффективными сорбентами по сравнению с пористыми кремнийсодержащими веществами. Результаты обсуждаются в рамках классической электродинамики.

Введение. Бензпирен – ароматическое соединение, представитель семейства полицикли-

© Мередели́на Т. А., Барышников С. В., 2018

ческих углеводородов. Образуется при сгорании углеводородного жидкого, твёрдого и газообразного топлива. В окружающей среде накапливается преимущественно в почве, меньше в воде. Из почвы поступает в ткани растений и продолжает своё движение дальше в пищевой цепи, при этом на каждой её ступени содержание бензпирена в природных объектах возрастает. В результате многие объекты и процессы окружающей среды, сами не обладающие способностью синтезировать бензпирен, становятся его вторичными источниками [1].

Согласно экспертной оценке одним из самых опасных производных бензпирена является 3,4-бензпирен, он относится к числу агентов, для которых имеются ограниченные доказательства их канцерогенного действия на людей и достоверные доказательства их канцерогенного действия на животных. В экспериментальных исследованиях 3,4-бензпирен был испытан на девяти видах животных, включая обезьян. В организм 3,4-бензпирен может поступать через кожу, органы дыхания, пищеварительный тракт и трансплацентарным путём. При всех этих способах воздействия удавалось вызвать злокачественные опухоли у животных. Из сотен полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) различного строения, обнаруженных в объектах окружающей среды, 3,4-бензпирен наиболее приоритетен для наблюдения. Основными пищевыми источниками 3,4-бензапирена и других ПАУ являются злаки, масла и жиры, копчёные продукты https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%91%D0%B5%D0%BD%D0%B7%D0%BF%D0%B8%D1%80%D0%B5%D0%BD - cite note-11. Около 1 % поступающих в организм ПАУ связано с потреблением питьевой воды. В воде рекомендуется содержание 3,4-бензпирена на уровне не более 0,7 мкг/литр. Каждая сигарета является источником примерно 0,05–0,09 мкг нанограмм 3,4-бензапирена [2].

По результатам мониторинга ВОЗ, нормы содержания 3,4-бензапирена в современном мире превышены во много раз. В среднем, уровень загрязнения воздуха в городах выше ПДК в 5–12 раз, в почвах – в 3–7 раз, в продуктах питания – от 1,5 до 11 раз [3].

Отсюда следует актуальность разработки новых методов инструментального контроля ПАУ в окружающей среде, воде и продуктах питания, а также разработка эффективных адсорбентов 3,4- бензпирена. В настоящей работе приводятся результаты исследования адсорбирующих способностей сегнетоэлектрических порошков.

Образцы и методика эксперимента. Физическая или ван-дер-ваальсова адсорбция обусловлена дисперсионными взаимодействиями, но при наличии электрического заряда хотя бы у одного из партнеров взаимодействующих систем могут возникнуть ориентационные и индукционные взаимодействия. Первые взаимодействия проявляются когда полярные молекулы адсорбируются на поверхности адсорбента с постоянным электрическим зарядом. Вторые обусловлены наведением дипольных моментов адсорбентом в адсорбированных молекулах либо индукцией в частицах адсорбента под влиянием адсорбирующихся диполей [4]. В связи с этим и были выбраны сегнетоэлектрические порошки. К сегнетоэлектрикам относятся кристаллические вещества, которые в некоторой температурной области обладают спонтанной поляризацией. Если рассматривать порошки сегнетоэлектриков, то малые монодоменные частицы имеет вокруг себя электрическое поле, пропорциональное спонтанной поляризации и объему частицы. Для исследований использовались порошки титаната бария ($BaTiO_3$) и титаната свинца ($PbTiO_3$) со средним размером частиц 3-5 мкм. Адсорбция осуществлялась из раствора 3,4-бензпирена в н-гексане концентрацией 10^{-3} моль/л, на 1мл раствора использовалось 0,2 мл адсорбента.

3,4-бензпирен $C_{20}H_{12}$ представляет собою кристаллическое вещества мало или практически не растворимые в воде. Температура плавления и кипения 3,4-бензпирена составляет 177°C и 456°C соответственно. Молекула 3,4-бензпирена состоит из пяти бензольных колец (рис.1), имеет вытянутую форму с размерами 3×12 Å [5]. Электрический дипольный момент молекулы 3,4-бензпирена, рассчитанный полуэмпирическим методом MNDO, имеет величину p_2 = 0,049 D (1 D = $3{,}33564 \cdot 10^{-30}$ Кл·м) [6].

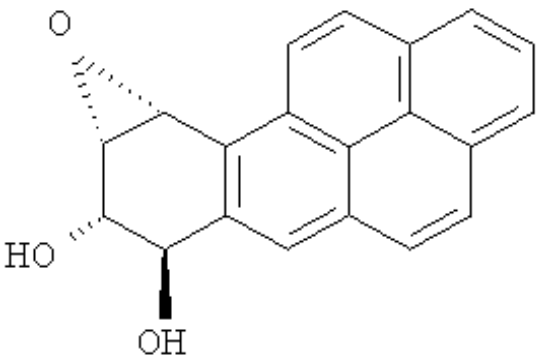


Рис. 1. Молекула 3,4-бензпирена
(пунктиром показаны возможные места разрыва двойных связей)

Для определения содержания 3-4 бензпирена в образцах использовался эффект Шпольского, который заключается в возникновение квазилинейчатых спектров сложных органических соединений, растворённых в специально подобранных растворителях при низких температурах. В обычных условиях спектры сложных органических соединений представляют собой сплошные широкие полосы, извлечь информацию о строении молекул и их составе из таких спектров невозможно. Эффект Шпольского, позволяющий регистрировать спектры, состоящие из узких спектральных линий, даёт возможность изучать эти важные объекты.

Для наблюдения Эффект Шпольского подбирают химически нейтральный по отношению к изучаемым молекулам растворитель, кроме того, растворитель должен быть оптически прозрачным в области поглощения и испускания изучаемых молекул. Такими свойствами обладают, например н-гексан. Исследуемое вещество растворяют в малых концентрациях ($\sim 10^{-5}$ - 10^{-7} г/см), затем раствор охлаждают до температуры ниже точки кристаллизации растворителя (в случае н-гексана до 77 К). В этих условиях исследуемые молекулы оказываются изолированными друг от друга и жёстко закреплёнными в растворителе, что и позволяет получить спектры, состоящие из серий спектральных линий, напоминающих атомные спектры и обладающих ярко выраженной индивидуальностью [7, 8].

Изменение концентрации растворов вследствие адсорбции определялось по сравнению интенсивностей головных мультиплетов квазилинейчатых спектров флуоресценции 3,4-бензпирена в исследуемых и эталонных образцах. Возбуждение флуоресценции проводилось светом ртутно-кварцевой лампы с фильтром, выделяющим область спектра в 3650 Å. Спектры регистрировались двухпризменным спектрографом ИСП-51 на фотопленку.

Экспериментальные результаты и обсуждение. Из результатов, приведенных в таблице 1, видно, что за первый час адсорбции концентрация раствора с добавлением $BaTiO_3$ уменьшилась на два порядка, с добавлением $PbTiO_3$ – на один порядок. Через три дня эксперимент показал, что титанат бария по-прежнему эффективнее, чем титанат свинца адсорбирует молекулы 3,4-бензпирена из данного раствора. В районе 11 суток процесс адсорбции остановился, $BaTiO_3$ сильнее более чем на порядок адсорбировал исследуемый раствор.

Следует отметить, что оба адсорбента достаточно прочно удерживают молекулу 3,4-бензпирена, об этом говорит тот факт, что на 14 сутки концентрация остается неизменной, т.е. процессы десорбции не происходят. Для сравнения взяты результаты ранее исследованного эффективного адсорбента смекты (таб.1). В первый час смекта проявляет наилучшую адсорбцию, это можно объяснить тем, что в отличие от титаната бария и титаната свинца смекта представляет собой слоистую и пористую структуру [4]. Дальнейшая, в течение двух недель, адсорбция сегнетоэлектриками оказалась на 1-2 порядка сильнее, чем у смекты.

Для объяснения более существенной адсорбции у $BaTiO_3$ по сравнению с $PbTiO_3$ оценим поля возникающие вокруг частиц в зависимости от свойств этих веществ.

При температурах выше 120^{o}C титанат бария имеет кубическую кристаллическую

структуру типа перовскита. Ниже температуры перехода T_o = 120°C происходит фазовый переход, и до температуры 5°C $BaTiO_3$ является сегнетоэлектриком. При искажении формы кубической ячейки ниже 120°C скачком возникает спонтанная поляризация P_s, величина которой плавно нарастает от 18 мкК/см^2 вблизи T_o до примерно 26 мкК/см^2 при комнатной температуре. При температурах ниже 5°C происходит второй фазовый переход, кристалл становится ромбическим. В интервале температур от –70°C до –90°C титанат бария испытывает третий фазовый переход и ниже этих температур имеет ромбоэдрическую структуру. Т.е. при всех температурах ниже 120°C титанат бария является сегнетоэлектриком [7].

Таблица 1

Изменение концентрации н-гексановых растворов 3,4-бензпирена с течением времени, исходная концентрация 10^{-3} моль/л

Исследуемые образцы	Время адсорбции			
	1 час	3 дня	11 суток	14 суток
$BaTiO_3$	10^{-5}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-8}
$PbTiO_3$	10^{-4}	$5\cdot10^{-5}$	$5\cdot10^{-7}$	$5\cdot10^{-7}$
Смекта	$5\cdot10^{-5}$	$5\cdot10^{-4}$	$7{,}5\cdot10^{-6}$	10^{-6}

Титанат свинца служит классическим примером сегнетоэлектрического перехода типа смещения. В параэлектрической фазе кристалл имеет кубическую структуру. При температуре 490°C $PbTiO_3$ претерпевает переход первого рода из кубической перовскитной фазы в тетрагональную сегнетоэлектрическую, изоморфную тетрагональной фазе $BaTiO_3$. Качественно свойства $PbTiO_3$ в кубической и тетрагональной фазах подобны свойствам $BaTiO_3$. Параметры ячейки $PbTiO_3$ при комнатной температуре: a = 0.3904 нм, c = 0.415 нм, c/a = 1.063, что говорит о большем тетрагональном искажении, чем в случае $BaTiO_3$, где c/a = 1.01. Такое сильное искажение обусловливает существенное изменение кристаллической решетки при сегнетоэлектрическом переходе. Спонтанная поляризация $PbTiO_3$ при комнатной температуре составляет примерно 80 мкКл/см^2, что почти в три раза превышает соответствующую величину для $BaTiO_3$. Но значение диэлектрической проницаемости, измеренной вдоль полярной оси, для $BaTiO_3$ при комнатной температуре около $(3\text{-}5)\cdot10^3$, что почти в 50 раз превосходит диэлектрическую проницаемость $PbTiO_3$ [9].

Напряженность электрического поля диполя определяется по формуле :

$$\mathbf{E} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{3(\mathbf{P}_e,\mathbf{r})\mathbf{r} - \mathbf{P}_e r^2}{r^5}, \qquad (1)$$

где для монодоменной частицы дипольный момент будет равна $\mathbf{P} = \mathbf{P}_s$*V (где V– объем частицы) и напряженность поля по направлению $\mathbf{P}_s$ можно записать как

$$\mathbf{E} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{\mathbf{P}_s}{r^3}V\,. \qquad (2)$$

В работах по исследованию сегнеоэлектрических композитов [10,11] было показано, учет граничных условий, приводит к выводу, что вблизи поверхности сегнетоэлектрических частиц напряженность электрического поля $E \sim P_s$ ($\varepsilon_1/\varepsilon_2$), где ε_1 – диэлектрическая проницаемость частиц титаната бария или титаната свинца, ε_2 – диэлектрическая проницаемость окружающей среды (в данном случае гексана ε_2=1.89). Как следует из [9], значение P_s для $PbTiO_3$ при комнатной температуре более чем в два раза превышает P_s для $BaTiO_3$, но значение диэлектрической проницаемости для $BaTiO_3$ в исследуемом температурном интервале примерно в 50 раз превосходит соответствующее значение для $PbTiO_3$, что вызывает большие поля и приводит к большей адсорбции молекул 3,4 бензперилена на титанате бария.

Если молекулы имеют собственный дипольный момент, то энергия взаимодействия (энергия Кеезома) двух противоположно направленных диполей будет определяться соотношением

$$W_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{2p_1p_2}{r_{12}^3}. \quad (3)$$

Если молекулы не имеют собственного дипольного момента взаимодействуют с энергией (энергия Дебая)

$$W_2 = \frac{\chi}{4\pi^2\varepsilon_o^2}\frac{2p_1^2}{r_{12}^6}, \quad (4)$$

где χ – поляризуемость (в данном случае 3,4-бензпирена). Эта энергия имеет меньшую величину и убывает пропорционально шестой степени расстояния.

При взаимодействии молекул 3,4-бензпирена с частицами сегнетоэлектриков в гексане преобладает диполь-дипольное взаимодействие. Соотношение (3) с учетом (2) и граничных условий дает соотношение для энергии электрического взаимодействия

$$W = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\left(\frac{2P_sV}{r_{12}^3}\right).\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}p_2. \quad (5)$$

Заключение. Таким образом, проведенные исследования показали, что сегнетоэлектрические порошки являются хорошими сорбентами для веществ с полярными молекулами. Сорбирующие способности сегнетоэлектриков пропорциональны произведению спонтанной поляризации на диэлектрическую проницаемость сегнетоэлектрика и зависят от размера частиц.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Геннадиев А. Н. Геохимия полициклических ароматических углеводородов в горных породах и почвах / М.: Изд-во МГУ, 1996. С.196.
2. Ильницкий А. П. Канцерогенные углеводороды в почве, воде и растительности // Канцерогены в окружающей среде. М.: Гидрометеоиздат, 1975. С.53-71.
3. ГН.2.1.7.2041-06 Предельно допустимые концентрации (ПДК) химических веществ в почве // Гигиенические нормативы. М.: Федеральный центр гигиены и эпидемиологии Роспотребнадзора. 2006. С.11.
4. Карнаухов А. П. Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов // Новосибирск: Изд-во Наука. 1999. 339 с.
5. Клар Э. Полициклические углеводороды . М.: Химия, 1971. 455 с.
6. Сушко О. А., Мукановская И. В. Квантово-механический подход к определению параметров нанофотонного сенсора при детектировании 3,4-бензпирена // Радиотехника. 2014. Вып. 176. С. 191-199.
7. Шпольский Э. В., Ильина А. А., Климова Л. А. Проблемы происхождения и структуры квазилинейчатых спектров органических соединений при низких температурах //УФН, 1962, т. 77. С. 321.
8. Осадько И. С., Персонов Р. И., Шпольский Э. В. Линейчатые спектры примесных молекул в н-парафиновых матрицах и теория примесного центра //Изв. АН СССР. Сер. физич., 1973, т. 37, № 3. С. 540.
9. Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы / Перевод с английского под редакцией Леманова В. В., Смоленского Г. А. М.: Мир, 1981. 736 с.
10. Stukova E. V. and Baryshnikov S. V., Stabilization of the ferroelectric phase in $(KNO_3)_{1-x} - (BaTiO_3)_x$ composites. //Inorganic materials: applied research. 2011, Vol. 2, P. 434-438.
11. Stukova E. V., Baryshnikov S. V., and Koroleva E.Yu.. Dielectric properties of ferroelectric composites $(NaNO_2)_{0.95}/(PbTiO_3)_{0.05}$ // Ferroelectrics 2016, Vol. 501, P. 1-8.

РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКЕ DIISOPROPYLAMMONIUM IODIDE, ВНЕДРЕННОМ В ОПАЛОВЫЕ МАТРИЦЫ

А. Ю. Милинский, С. В. Барышников, И. В. Егорова

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
г. Благовещенск, e-mail: a.milinskiy@mail.ru

Представлены результаты исследования диэлектрических свойств нанокомпозитов на основе опаловых матриц, заполненных иодидом диизопропиламмония ($C_6H_{16}IN$). По данным нелинейной диэлектрической спектроскопии, для $C_6H_{16}IN$ в порах опаловых матриц обнаружено появление сегнетоэлектрической фазы при нагревании в интервале температур 362 – 377 К.

Введение. Сегнетоэлектрики являются многофункциональными материалами с широким спектром применения. Зависящая от температуры спонтанная поляризация может переключаться электрическим полем или механическими напряжениями, что делает их привлекательными для создания механических приводов, различных датчиков и матриц памяти. Хотя к настоящему времени открыто более сотни сегнетоэлектрических кристаллов, основное практическое применение нашли перовскитоподобные сегнетоэлектрики, такие как $BaTiO_3$, $PbTiO_3$, $LiTaO_3$, $LiNbO_3$ и их твердые растворы [1]. Относительно указанных сегнетоэлектриков большинство молекулярных сегнетоэлектриков обладают низкой спонтанной поляризация P_s, слабым пьезоэлектрическим эффектом, имеют низкие температуры Кюри T_c и температуры плавления. В то же время молекулярные сегнетоэлектрики обладают рядом преимуществ: малым весом, экологически безопасной переработкой, так как не содержат тяжелых металлов. Некоторые из этих веществ являются механически гибкими. В последние годы был открыт ряд органических соединений с полярной точечной группой при комнатной температуре и относительно высокой температурой плавления (~450 К). К таким сегнетоэлектрикам относятся: diisopropylammonium chloride ($C_6H_{16}ClN$), сокращенно DIPAC P_s ~ 8.2 □C×cm^{-2}, T_c = 440 К [2]; diisopropylammonium bromide ($C_6H_{16}BrN$), сокращенно DIPAB P_s ~ 23 C×cm^{-2}, T_c = 426 К [3-5]; diisopropylammonium iodide ($C_6H_{16}IN$), сокращенно DIPAI P_s ~ 33 C×cm^{-2}, T_c = 415 К [6]. Например, DIPAB имеет спонтанную поляризацию и температуру Кюри близкую к классическому сегнетоэлектрику – титанату бария. Благодаря своим свойствам эти сегнетоэлектрики являются потенциальными материалами для применения в органической микроэлектронике [7]. Однако, для широкого практического применения эти вещества в наноразмерном состоянии пока слабо изучены. В частности, имеются единичные работы, где исследуются размерные эффекты в этих сегнетоэлектриках [8,9].

В данной работе приводятся результаты исследования линейных и нелинейных диэлектрических свойств нанокомпозитов на основе опаловых матриц, заполненных diisopropylammonium iodide.

Образцы и методика эксперимента. При комнатной температуре DIPAI принадлежит к орторомбической неполярной хиральной пространственной группе $P2_12_12_1$. Однако при нагревании, в зависимости от технологии получения, возможны два сценария. В первом случае согласно [6] при нагреве до температуры 369 К возникает полярная моноклинная фаза с симметрией $P2_1$, стабильная до 415 К. Выше 415 К DIPAI переходит в неполярную моноклинную фазу $P2_1/m$. В процессе охлаждения при 407 К наблюдается один фазовый переход, где DIPAI превращается непосредственно из $P2_1/m$ в полярную моноклинную фаза с симметрией $P2_1$. И остается в этом состоянии вплоть до комнатной температуры.

Согласно второму сценарию при нагреве образца до температуры 376 К наблюдался фазовый переход из неполярной орторомбической фазы $P2_12_12_1$ в неполярную моноклинную фазу $P2_1/m$ [10]. Тем не менее, наблюдаемая аномалия диэлектрической проницаемости близкая к сегнетоэлектрической. Диэлектрическая проницаемость монокристаллов DIPAI при фазовом переходе в процессе охлаждения составляет ~10^3 на частоте ~ 10^2 Hz. В процессе охлаждения

© Милинский А. Ю., Барышников С. В., Егорова И. В., 2018

при 464 K наблюдается фазовый переход, из $P2_1/m$ в неполярную фаза с симметрией $P2_12_12_1$. Авторы [10] отсутствие полярной симметрии $P2_1$ в DIPAI, объясняют тем, что связи N-H ⋯ I значительно слабее, чем связи N-H ⋯ Br в DIPAB. Таким образом, слабые связи, не способны преодолевать термически активированные вращения группы $C_6H_{16}N$.

В наших исследованиях diisopropylammonium iodide был получен реакцией диизопропиламина с 48%-ным водным раствором HI (молярное соотношение 1:1) по методике, приведенной в [6], с последующей перекристаллизацией из, метилового спирта при комнатной температуре. Использовавшиеся опаловые матрицы состоят из плотноупакованных однородных по размерам рентгеноаморфных сфер SiO_2 с диаметром 260−270 nm (рис. 1). Пустоты между сферами имеют регулярное периодическое распределение. Как показывают вычисления в предположении жестких сфер, пустоты (октаэдрические и тетраэдрические) должны иметь размеры (диаметры вписанных в них сфер) ~ 110 и ~ 60 nm соответственно. При идеальной форме сфер SiO_2 пустоты в опаловой матрице соединяются каналами, имеющими в сечении форму треугольника с вогнутыми сторонами. Диаметр вписанного в него цилиндра составляет ~ 35−45 nm [11].

Для диэлектрических исследований порошок DIPAI прессовался в виде таблеток диаметром 12 mm и толщиной около 1.5 mm при давлении 6000-7000 kg/cm^2. Внедрение сегнетоэлектрика в поры опалов производилось из нагретого до температуры 320 K насыщенного раствора DIPAI в метаноле. Затем образец медленно охлаждался, в результате чего в порах зарождались наночастицы, которые росли в течение нескольких дней. Для удаления оставшегося метанола использовалась вакуумная сушка. Степень заполнения пор, определенная по изменению массы опалов до и после внедрения, составляла не менее 60%. Электронная фотография пустого опала показана на рис. 1.

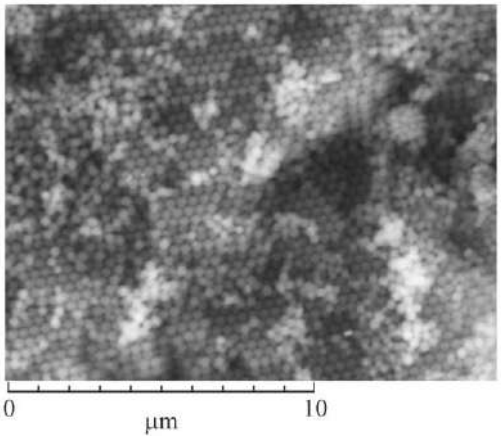


Рис. 1. Фотография поверхности образца опаловой матрицы, полученная при помощи электронного микроскопа

Для измерения комплексной диэлектрической проницаемости использовался цифровой измеритель иммитанса E7–25 с частотным диапазоном $20 \div 10^6$ Hz. Температура определялась с помощью электронного термометра ТС-6621 с хромель-алюмелевой термопарой. Исследования проводились в температурном интервале от 300 до 450 K в автоматическом режиме со скоростью 1K/min. Точность определения температуры составляла 0.1 K. Погрешность измерения диэлектрической проницаемости исследуемых образцов не превышала 5 %.

Установка для исследований нелинейных диэлектрических свойств образцов включала в себя генератор гармонических колебаний с рабочей частотой 2 kHz. Напряженность электрического поля для нанокомпозитных и объемных образцов DIPAI в процессе измерения составляла около 200 V/cm. Сигнал снимался с резистора, включенного последовательно с образцом, и подавался на цифровой анализатор спектра, в качестве которого служил компьютер с 24-разрядным аналого-цифровым преобразователем ZET 230 и программным обеспечением ZetLab. В процессе эксперимента записывались амплитуды третьей гармоники и основного сигнала. Коэффициент третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ определялся как отношение амплитуды третьей

гармоники к амплитуде основного сигнала. Более подробно методика нелинейных измерений описана в [12,13].

Экспериментальные результаты и обсуждения. Результаты исследований диэлектрической проницаемости ε′ для объемных образцов DIPAI на разных частотах представлены на рисунке 2. На зависимостях ε′(*T*), полученных в процессе нагрева, наблюдается одна аномалия, соответствующая переходу в орторомбическую фазу $P2_12_12_1$ [10]. Максимум ε′ наблюдается при температуре 378 К на всех исследованных частотах. При охлаждении фазовый переход происходит при 363 К. Тангенс угла диэлектрических потерь tgδ принимает минимальные значения при 378 и 363 К в режиме нагрева и охлаждения, соответственно (см. вставку на рис.1). Значительная частотная дисперсия приводит к уменьшению ε′ и tgδ с ростом частоты.

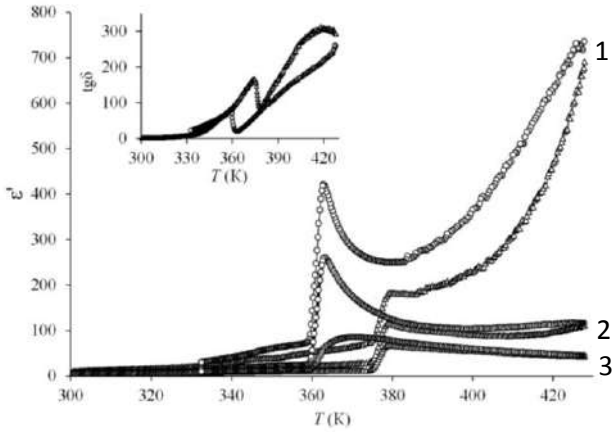


Рис. 2. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости ε' для поликристаллического образца DIPAI на частотах 1 kHz – 1, 10 kHz – 2, и 100 kHz – 3. На вставке показана зависимость tgδ(*T*), полученная на частоте 1 kHz. Треугольники соответствуют нагреву, круги – охлаждению

На рис. 3 представлены графики зависимости ε′(*T*) и tgδ(*T*) для опала, заполненного DIPAI. Для опалов с включениями DIPAI закон Кюри-Вейсса не выполняется. Это объясняется тем, что в нанокомпозитных образцах существенный вклад в диэлектрическую проницаемость дает поляризация Максвелла-Вагнера, возникающая за счет разных значений проводимости и диэлектрической проницаемости на границах раздела DIPAI и опала. Рост диэлектрической проницаемости связан с ростом проводимости сегнетоэлектрических нанокомпозитов с увеличением температуры [14]. Как следует из графиков ε′(*T*) и tgδ(*T*), при нагреве четко прослеживаются две аномалии. Первая при температуре 362 К и вторая при 377 К. В процессе охлаждения резкое уменьшение ε′ и минимум tgδ наблюдаются при 362 К.

Наличие двух фазовых переходов для частиц DIPAI включенных в опал, вероятно, связано с формирование промежуточной полярной фазы $P2_1$, согласно работе [6]. Для проверки наличия спонтанной поляризации были исследованы нелинейные свойства объемного и наноструктурированного образцов. Согласно полученным результатам, для поликристаллического образца коэффициент третьей гармоники в процессе нагрева слабо зависит от температуры и не имеет аномалии на фазовом переходе (рис.4). Тогда как для нанокомпозитного образца резкий рост коэффициента $\gamma_{3\omega}$ начинается при 362 К и заканчивается при 377 К. Указанные значения температур согласуются с данными, полученными при исследовании ε′ и tgδ. Формирование сегнетоэлектрической фазы для частиц DIPAI, находящихся в порах опалов, вероятно связано с механическим зажатием.

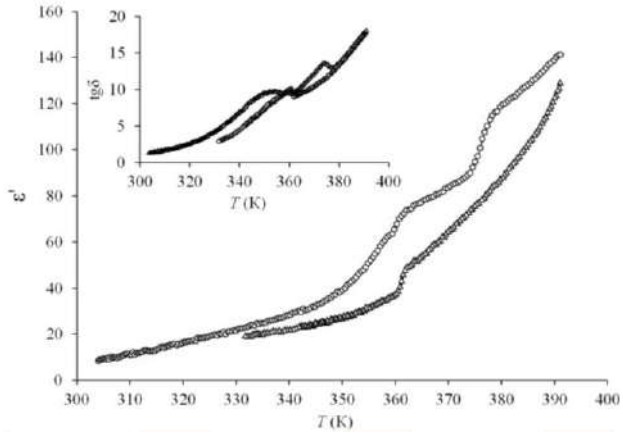


Рис. 3. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости ε' для частиц DIPAI в опале на частоте 1 kHz. На вставке показана зависимость tgδ(*T*), полученная на частоте 1 kHz. Круги соответствуют нагреву, треугольники – охлаждению

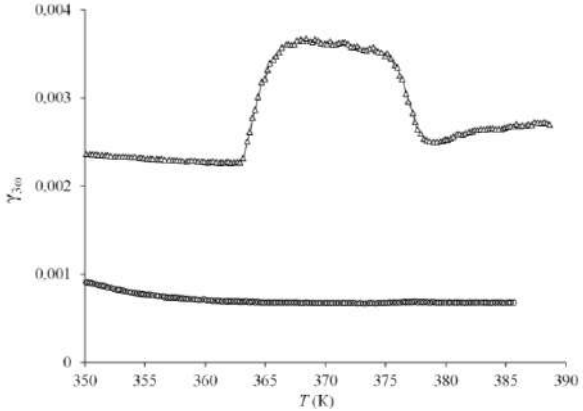


Рис. 4. Температурные зависимости коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$, полученные в режиме нагрева, для поликристаллического образца DIPAI (круги) и опала с включениями DIPAI (треугольники)

Незначительное понижение температуры фазового перехода при нагреве и охлаждении на 1 K для частиц DIPAI в порах опала, согласуется с выводами теоретических моделей, разработанных на основе феноменологической теории Ландау и модели Изинга [15]. Эти модели предсказывают, что температура структурного фазового перехода для малых изолированных частиц сферической или цилиндрической формы смещается в глубь сегнетоэлектрической фазы при уменьшении размеров частиц. Выводы этих моделей были экспериментально подтверждены также для отдельных малых частиц сегнетоэлектриков типа титаната бария (см. работу [18] и ссылки в ней). Взаимодействие электрической природы между сегнетоэлектрическими частицами в порах, как показал теоретический анализ [17], может значительно ослаблять влияние размерных эффектов, что, по-видимому, наблюдалось для малых частиц DIPAI в опале в настоящей работе.

Заключение. Таким образом, из температурного хода линейных диэлектрических свойств и амплитуды третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ можно заключить что для $C_6H_{16}IN$ внедренного в опаловые матрицы при нагревании в температурном интервале 362 – 377 K возникает сегнетоэлектрическая фаза, которая не обнаруживается в объемных образцах. Малое изменение температуры фазовых переходов вероятно связанно с относительно большим размером включений DIPAI в опалах, при которых размерный эффект проявляется слабо.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. M.E. Lines and A.M. Glass. Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials (Oxford University Press, New York, 1977).
2. D.-W. Fu, W. Zhang, H.-L. Cai, J.-Z. Ge, Y. Zhang, and R.-G. Xiong, Adv. Mater. 23, 5658 (2011).
3. D.-W. Fu, H.-L. Cai, Y. Liu, Q. Ye, W. Zhang, Y. Zhang, X.-Y. Chen, G. Giovannetti, M. Capone, J. Li, and R.-G. Xiong, Science 339, 425 (2013).
4. A. Piecha, A. Gagor, R. Jakubasa, and P. Szklarza, CrystEngComm 15, 940 (2013).
5. C. Thirmal, P. P. Biswas, Y. J. Shin, T. W. Noh, N. V. Giridharan, A. Venimadhav, and P. Murugavel, J. Appl. Phys. 120, 124107 (2016).
6. K. R. Saripalli, S. Diptikanta, P. Siva, N. Hariharan, L.B. Handady, N. Tayur, and E. Suja. Observation of ferroelectric phase and large spontaneous electric polarization in organic salt of diisopropylammonium iodide. J. Appl. Phys. 121, 114101 (2017).
7. J. Li, Y. Liu, Y. Zhang, H.-L. Cai, and R.-G. Xiong, Phys. Chem. Chem. Phys. 15(48), 20786 (2013).
8. C. Thirmal, P.P. Biswas, Y.J. Shin, T.W. Noh, N.V. Giridharan, A. Venimadhav, *and* P. Murugavel. Jour. of App. Phys. 120, 124107 (2016).
9. S.V. Baryshnikov, E.V. Charnaya, A.Yu. Milinskiy, V.A. Parfenov, I.V. Egorova. Phase Transitions 91, 293 (2018).
10. A. Piecha-Bisiorek, A. Gągor, D. Isakov, P. Zieliński, M. Gałązka and R. Jakuba. Inorg. Chem. Front., 2017, 4, 553.
11. В.Н. Богомолов, Л.М. Сорокин, Д.А. Курдюков, Т.М. Павлова, Дж. Хатчисон. ФТТ 39, 2090 (1997).
12. S. Ikeda, H. Kominami, K. Koyama, Y.J. Wada. Appl. Phys. 62, 3339 (1987).
13. С.В. Барышников, Е.В. Чарная, А.Ю. Милинский, Ю.А. Шацкая, D. Michel. ФТТ 54, 594 (2012).
14. K.W. Wagner. Die Isolierstoffe der Elektrotechnik. Springer, Berlin (1924).
15. W.L. Zhong, Y.G. Wang, P.L. Zhang, B.D. Qu. Phys. Rev. B 50, 698 (1994).
16. P. Sedykh, D. Michel. Phys. Rev. B 79, 134 119 (2009).
17. E.V. Charnaya, A.L. Pirozerskii, C. Tien, M.K. Lee. Ferroelectrics 350, 75 (2007).

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИЛИКАТНЫХ МАТРИЦ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВНЕДРЕННОГО В НИХ НИТРИТА НАТРИЯ

Е. В. Стукова, О. В. Ефимова, И. А. Голубева, О. В. Зотова

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: lenast@bk.ru

Исследованы диэлектрические свойства нанокомпозитов на основе нитрита натрия и мезопористых силикатных матриц. Показано, что на изменение температуры фазового перехода в нанокомпозитах влияют размеры пор матриц внедрения и удельная площадь свободной поверхности. Изменения значений диэлектрической проницаемости зависит в основном от удельной площади свободной поверхности, что приводит к появлению дополнительного механизма поляризации – ионно-миграционной.

Композиты на основе сегнетоэлектрических частиц, внедренных в поры наноразмерных матриц, являются объектом интенсивного исследования, т.к. представляют большой интерес в план практических применений. Физические свойства таких композитов будут отличаться от свойств объемного материала и определяться целым рядом факторов, связанных с параметрами матриц внедрения, например, таких как размеры и геометрия пор и т.д. Также на физические свойства влияют: степень заполнения пористой матрицы и взаимодействие частиц со стенками матрицы и между собой. Физические свойства нитрита, внедренного в поры различных матриц, исследовались во многих работах. Например, авторы [1] обнаружили гигантский рост диэлектрической проницаемости для нитрита натрия, внедренного в опаловую матрицу, в области температуры сегнетоэлектрического фазового перехода объемного нитрита натрия. В результате ЯМР-исследований нитрита натрия в матрицах MCM-41 и SBA-15 [3] было

© Стукова Е. В., Ефимова О. В., Голубева И. А., Зотова О. В., 2018

установлено, что нитрит натрия в порах находится одновременно в двух фазах – кристаллической и расплава. Наличие расплавленной фазы объясняет высокую электропроводность образцов. Кристаллическая часть нитрита натрия претерпевает сегнетоэлектрический фазовый переход.

Цель работы – определение влияния параметров матрицы на внедрения на изменение диэлектрических свойств наноразмерного нитрита натрия.

Нитрит натрия ($NaNO_2$) при комнатной температуре является сегнетоэлектриком со структурой, принадлежащей к объемно-центрированной ромбической группе. Известно, что примерно при 163 ºС в этих кристаллах совершается переход из нецентрисимметричной структуры в центросимметричную. Этот переход представляет собой сегнетоэлектрический фазовый переход [3].

Для внедрения нитрита натрия использовались мезопористые силикатные матрицы MCM-41, SBA-15 и 3D-SBA-15. Эти материалы имеют гексагональную структуру типа пчелиных сот с толщиной стенок h_W = 0,6 – 0,8 нм и калиброванным размером каналов-пор d, который можно направленно изменять в диапазоне 3 – 10 нм. Помимо размеров пор данные матрицы также отличаются удельной площадью свободной поверхности. Также для матрицы 3D-SBA-15 характерно наличие «крупных разрывов» (более 2 нм) в стенках каналов, называемых субмезопорами. За счет этих «окон» в стенке, поры могут сообщаться друг с другом [4].

Измерения диэлектрических свойств, исследуемых образцов проводились в режиме нагрев – охлаждение в температурном интервале от 60 °С до 180 °С в диапазоне частот от 1 Гц до 1 МГц. В ходе исследований были получены температурно-частотные зависимости диэлектрических свойств образцов $NaNO_2$, внедренного в наноразмерные силикатные матрицы, параметры которых представлены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры наноразмерных силикатных матриц, используемых для внедрения сегнетоэлектрика

Название матрицы	Диаметр пор, нм	Удельная площадь свободной поверхности пор, $м^2/г$
MCM-41	4,0	969,8
SBA-15	6,9	589,0
3D-SBA-15	9,4	497,0

Внедрение сегнетоэлектрика $NaNO_2$, в поры наноразмерной силикатной матрицы проводилось из водного раствора. Сегнетоэлектрик растворялся в дистиллированной воде до получения насыщенного раствора. Порошок мезопористого вещества засыпался в раствор так, чтобы весь раствор проник в поры, после чего смесь высушивалась. Из заполненного порошка при давлении 6000 – 7000 $кг/см^2$ прессовался образец в виде таблетки диаметром 12 мм и толщиной 2 мм.

Исследование образцов $NaNO_2$/MCM-41и $NaNO_2$/SBA-16, а также объемного нитрита натрия, используемого в качестве эталонного образца, выполнялось на диэлектрическом спектрометре LCRmeter HIOKI 3532-50, по следующей методике. В качестве электродов применялась In-Ga паста. Исследования свойств $NaNO_2$ внедренного, в мезапористые силикатные матрицы SBA-15 и 3D-SBA-15, проводились на широкополосном диэлектрическом спектрометре Novocontrol BDS-80. В качестве электродов использовалась серебряная паста. Стабильность поддержания температура составляла 0,1 К. Измерения проводились в температурном интервале от 30 до 180 ^oC в режимах нагрева и охлаждения

На рис. 1 представлены температурные зависимости диэлектрической проницаемости образцов нанокомпозитов в сравнении с объемным нитритом натрия. Как следует из представленных зависимостей, для всех образцов нанокомпозитов происходит изменение температуры фазового перехода и увеличение значений диэлектрической проницаемости.

Параметры этих изменений представлены в таблице 2.

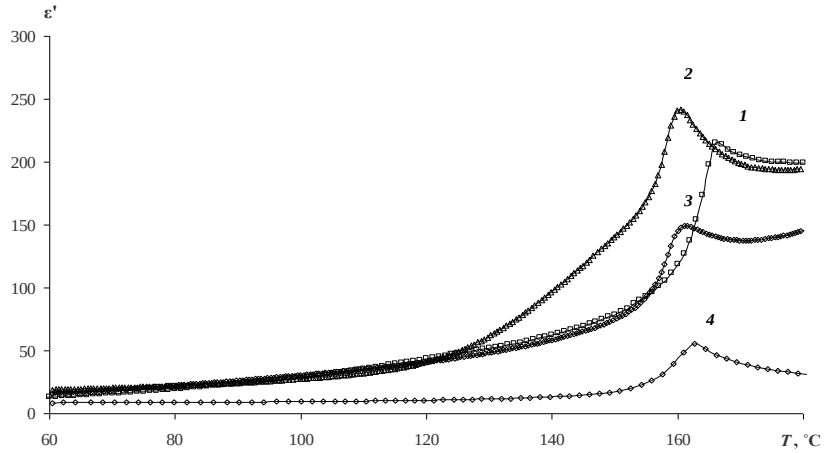


Рис. 1. Температурные зависимости ε´ при нагреве на частоте 1 МГц: *1* – $NaNO_2$/MCM-41; *2* – $NaNO_2$/SBA-15; *3* – $NaNO_2$/3D-SBA-15; *4* – объемный $NaNO_2$

Для образца нанокомпозита $NaNO_2$/MCM-41 температура фазового перехода повышается на 4 градуса по сравнению с объемным образцом, тогда как для остальных образцов нанокомпозитов она понижается. В литературе [43] описаны примеры как повышения, так и понижения температуры фазового перехода. Изменение температуры фазового перехода в ту или иную сторону может быть связано с параметрами матрицы: размеров пор и удельной площадь свободной поверхности. Самое значительное изменение температуры, причем в сторону повышения, наблюдается для образца $NaNO_2$/MCM-41, у которого наименьший размер пор и наибольшая площадь свободной поверхности.

Таблица 2

Диэлектрические параметры исследуемых образцов

Название образца	Температура перехода, T_K	ε'_{max}
объемный $NaNO_2$	163 ^oC	55,3
$NaNO_2$/MCM-41	167 ^oC	198,0
$NaNO_2$/SBA-15	160 ^oC	241,0
$NaNO_2$/3D-SBA-15	162 ^oC	140,6

Изменение температуры фазового перехода в параэлектрическую фазу в наноразмерных образцах может быть связано с механическим зажатием вещества в порах. Понижение или повышение температуры фазового перехода будет зависеть от того как взаимодействуют кристаллические решетки внедренного вещества и матрицы, т.е. растягивается решетка вещества или сжимается. Также, для объяснения изменения температуры фазового перехода T_c с изменением размера пор, можно предположить, что в случае наноразмерных частиц значительную роль играет поверхностное натяжение, следствием которого являются внутренние напряжения. Так, в работе[5] установлена зависимость между частотами фоновых мод в частицах $PbTiO_3$ наноразмерного диапазона от радиуса этих частиц, которая возникает за счет внутренних напряжений в результате поверхностного натяжения.

Возникающие в круглой частице радиуса r внутренние напряжения, аналогичны деформации всестороннего сжатия при давлении $p = 2k/r$, где k –коэффициент поверхностного натяжения [6]. Величина даления всегда будет больше нуля, но его влияние может действовать как в сторону уменьшения, так и в сторону увеличения температуры Кюри T_c. Это объясняет не только изменение температуры, но и размытие максимума при фазовом переходе. Увеличение значений диэлектрической проницаемости для образцов $NaNO_2$/SBA-15, $NaNO_2$/3D-SBA-15, $NaNO_2$/ MCM-41 объясняется наличием большой площади границ. Это способствует появлению дополнительного механизма поляризации, межслоевой или поляризации Максвелл-Вагнера, при которой на границах разделов двух сред (матрица и

нитрит натрия) накапливаются свободные носители (ионы), которые образуют диполи, сориентированные по направлению электрического поля. За счет этого механизма происходит возрастание диэлектрической проницаемости.

Между увеличением проводимости и диэлектрической проницаемости наблюдается прямо пропорциональная зависимость, как было показано в работе [7]. Из приведенных на рисунке 2 температурных зависимостей удельной проводимости следует, во-первых, что оба образца композита имеют высокие значения проводимости, а во-вторых, что характер этих зависимостей аналогичен зависимостям диэлектрической проницаемости. Также, как и в случае диэлектрической проницаемости значения проводимости для образца $NaNO_2$/SBA-15 больше, чем для образца $NaNO_2$/3D-SBA-15. Это свидетельствует о наличии дополнительного вклада в общий механизм поляризации – ионно-миграционной поляризацией.

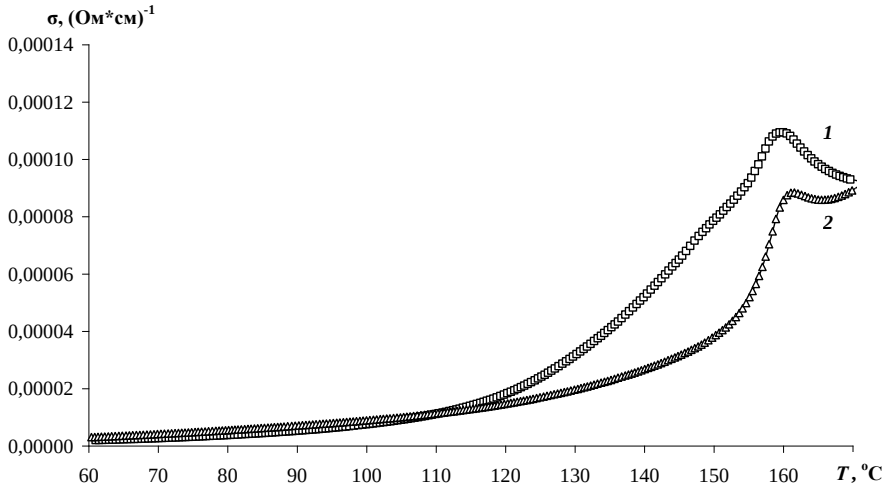


Рис. 2. Температурные зависимости σ при нагреве на частоте 1 МГц:
1 – $NaNO_2$/SBA-15; *2* – $NaNO_2$/3D-SBA-15

Как было отмечено ранее, нанокомпозиты на основе пористых матриц за счет большой удельной площади свободной поверхности обладают развитой сетью границ раздела внутри нанокомпозитного материала, при этом необходимо учитывать наличие в таких материалах градиентов напряжений и химических потенциалах между отдельными наночастицами. Это обусловлено тем, что в поверхностных слоях на межфазной границе вследствие разного состава и строения соприкасающихся фаз и из-за различия в связях поверхностных атомов и молекул одной и другой фазы существует ненасыщенное поле межатомных, межмолекулярных сил. Для учета поверхностных явлений в свободную энергию необходимо добавить слагаемое ΔF_s, учитывающее поверхностный вклад

$$\Delta F_s = \sum \int_{S_i} \sigma_i dS_i + \sum \int_{S_i} \mu_i dN_i + \sum \int_{S_i} \varphi_i \delta_i dS_i \qquad (1)$$

где σ_i – поверхностное натяжение, S_i – площадь поверхности частицы, μ_i , N_i – химический потенциал и число частиц в системе i-го компонента, φ_i – электрический потенциал, δ_i – плотность поверхностного заряда.

Наличие развитой сети границ раздела в этих материалах приводит к тому, что в выражении 1 величина слагаемого σdS является определяющей. На границе двух фаз (матрица-сегнетоэлектрик) происходит образование двойного электрического слоя за счет миграции носителей или экранирования спонтанной поляризации, а также ориентации диполей в поле поверхностных сил приводит к появлению электрических поверхностных явлений: поверхностной проводимости, поверхностного электрического потенциала, электронной эмиссии и т.д. Такие поверхностные явления, тоже вносят вклад в появление дополнительного механизма поляризации Максвелл-Вагнера (ионно-миграционной).

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Pan'kova S.V., Poborchii V.V., Solov'ev V.G. The giant dielectric constant of opal containing sodium nitrate nanoparticles // Journal of Physics: Condensed Matter. 1996. V. 8. P. L203.
2. Барышников С. В., Стукова Е. В., Чарная Е. В., Tien Cheng, Lee M. K., Bohlmann W., Michel D. Диэлектрические и ЯМР-исследования нанопористых матриц, заполненных нитритом натрия // Физика твердого тела. 2006. Т. 48. С. 551-557.
3. Струков Б. А., Леванюк А. П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. М.: Наука, 1995. 302 с.
4. Марченко В. И. Возможные структуры и фазовые переходы на поверхности кристаллов // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т.33. С.397-401.
5. Ma W., Zhang M., Lu Z. A Study of Size Effects in $PbTiO_3$ Nanocrystals by Raman Spectroscopy // Phys. Stat. Sol. 1998. V.166. P.811-815.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М Статистическая физика. М.: Наука,1964. 570 с.
7. Барышников С. В., Стукова Е. В., Чарная Е. В., Tien C., Michel D., Андриянова Н.П. Диэлектрические параметры мезопористых решеток, заполненных $NaNO_2$ // Физика твердого тела. 2007. Т. 49. В. 4. С. 751-755.

Секция «Физическое материаловедение»

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Ti-Al-SiC, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ПОРОШКОВОЙ МЕТАЛЛУРГИИ

И. А. Астапов, Т. Б. Ершова, Н. М. Власова, Е. А. Кириченко, М. А. Кулик

ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВО РАН
г. Хабаровск, e-mail: immaterial_khv@mail.ru

Методом порошковой металлургии с использованием исходных чистых порошков титана, алюминия и карбида кремния, получены композиционные материалы, содержащие MAX-фазы. Использовалось два режима спекания в вакуумной печи с выдержкой при температурах 1300°С и 1400°С в течение одного часа. Методами оптической и электронной микроскопии изучена структура сплава. С помощью дифрактометра определен фазовый состав каждого композита. Исследованы твердость, прочность и жаростойкость материалов. Показано, что наиболее оптимальным режимом спекания является нагрев до 1400°С композиции (3Ti-Al)+15%SiC. Данный материал состоит из двух фаз – Ti_2AlC и $Ti_5Si_3C_x$, а также отвечает относительно высоким показателям прочности и жаростойкости.

Введение. Поиск новых составов композиционных материалов и исследование их свойств является актуальной задачей современного машино- и авиастроения, в том числе при использовании аддитивных технологий [1]. Так, например, использование селективного лазерного спекания для получения цельных сложнопрофилированных изделий, предполагает применение композитов с высокой температурой плавления и способностью сохранять исходный фазовый состав после воздействия. Среди таких материалов с уникальными свойствами можно выделить композиты на основе тугоплавких MAX-фаз (где M – переходный d-металл; A – p-элемент (например, Si, Ge, Al, и др.); X – углерод или азот), которые, благодаря своему строению (ламинатная структура), обладают низкими плотностью, электросопротивлением и высокими значениями трещиностойкости, прочности и жаростойкости [2].

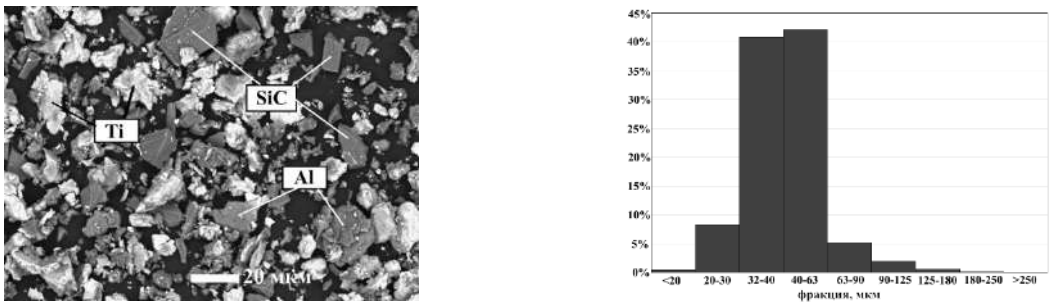
Наибольший интерес представляют MAX-фазы систем Ti-Al-C и Ti-Si-C. Известно несколько методов получения таких соединений. Так, например, в работе [3] описан процесс синтеза фазы Ti_3SiC_2 в виде тонких слоёв, полученных химическим осаждением из газовой фазы. Методом магнетронного распыления в вакууме получено покрытие авторами работы [4]. Для создания объемных образцов, содержащих MAX-фазы, используют метод самораспространяющегося высокотемпературного синтеза [5], который отличается высокой скоростью процесса и возможностью применения в качестве исходных компонентов оксидных соединений. В тоже время данный способ не позволяет добиться высокой чистоты материала и отличается сложностью в контроле процесса. Для синтеза MAX-фаз применимы методы горячего прессования [6], механического легирования [7], литья [8], плазменного спекания [9] и др. Использование методов порошковой металлургии дает возможность регулировать соотношение фаз и структуру композитов за счет варьирования состава исходной шихты и режимов спекания. Данный способ отличается относительной простотой, при этом позволяет получить материалы, практически не содержание примеси. В предыдущей работе нами методом высокотемпературного спекания был синтезирован материал, содержащий MAX-фазу Ti_2AlC [10].

В настоящей работе решалась задача получения и исследования композиционных материалов на основе интерметаллида Ti-Al с различным содержанием в исходной смеси карбида кремния.

Методика и материалы. Для составления исходной смеси использовались: порошок титана марки ПТОМ-1, порошок алюминия ПА-1 и порошок карбида кремния. Составы готовили из соотношения Ti:Al = 3:1 (что соответствует 84 масс.% Ti и 16 масс.% Al) с добавкой к этой смеси порошка SiC в количестве 5; 10 и 15 масс.%. Смешивание и измельчение произво-

© Астапов И. А., Ершова Т. Б., Власова Н. М., Кириченко Е. А., Кулик М. А., 2018

дилось в планетарной мельнице РМ 400. Внешний вид порошка и распределение частиц по размерам показано на рис. 1. Далее применялся метод холодного прессования с последующим спеканием в вакуумной печи Carbolite STF при давлении 10-2 Па при температурах спекания 1300 и 1400 °С и продолжительности спекания 1 час с последующим охлаждением с печью. Анализ фазового состава проводился на дифрактометре ДРОН-7 ($Cu_{K\alpha}$-излучение). Структура исследовалась с применением электронного микроскопа JEOL «JCM-6000». Показатели жаростойкости определяли на приборе синхронного термического анализа Netzsch «STA 449 F3 Jupiter» (воздух, равномерный нагрев до 1200°С и выдержка 5 ч.). Микротвердость исследовалась на микротвердомере ЛОМО ПМТ-3. Предел прочности при трехточечном поперечном изгибе изучали с помощью испытательного пресса ИП-250М (расстояние между опорами 14 мм).



а б

Рис. 1. РЭМ-изображение частиц смеси Ti-Al-SiC после измельчения (а) и гранулометрический состав (б)

Результаты и обсуждение. Исследованы процессы фазообразования для всех трех составов (рис. 2). При температуре спекания 600-700°С формируется интерметаллидная фаза $TiAl_3$. Дальнейшее спекание приводит к насыщению данного соединения атомами титана и образуется Ti_3Al. Этот алюминид титана является основным в структуре композита (3Ti:Al)+5%SiC. Также, согласно реакции SiC+Ti→TiC+Si, происходит формирование карбида титана, решетка которого является базой для кристаллизации карбосилицида титана. Присутствие в составе спеченных материалов MAX-фазы Ti_2AlC отмечено для образцов с исходным содержанием карбида кремния более 10%. Композиционный материал (3Ti:Al)+15%SiC состоит только из двух фаз - Ti_2AlC и $Ti_5Si_3C_x$.

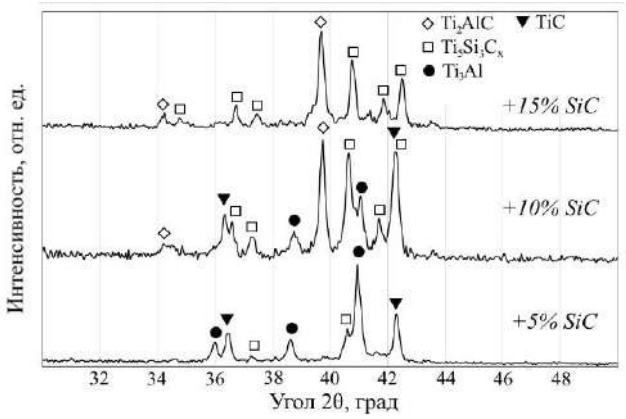
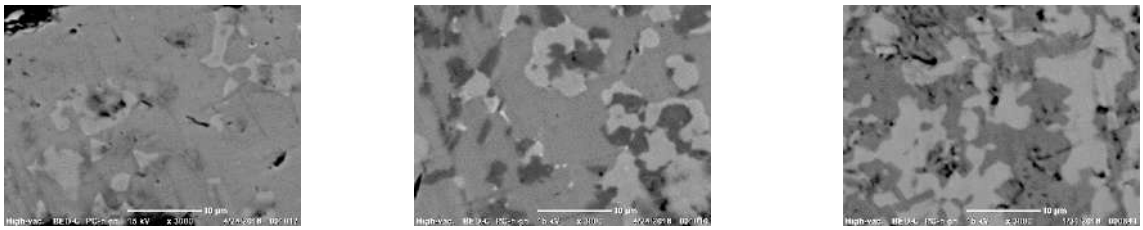


Рис. 2. Дифрактограммы образцов с различным содержанием карбида кремния в исходной смеси, спеченных при температуре 1400°С

Микроструктура композитов представлена на рис. 3. Относительно невысокое содержание карбида кремния в порошковой смеси обуславливает малое количество фазы $Ti_5Si_3C_x$ в структуре (светлые области на рис. 3-а). В образце (3Ti:Al)+10%SiC в матрице Ti_3Al отмечены двухфазные «островки», состоящие из Ti_2AlC и $Ti_5Si_3C_x$. Увеличение относительного содержания карбида кремния в исходной шихте приводит к формирования равномерно распределенных в структуре композиционного материала двух MAX-фаз.



a b c

Рис. 3. РЭМ-изображения микроструктуры образцов, полученных спеканием: a - (3Ti:Al)+5%SiC, b - (3Ti:Al)+10%SiC, c - (3Ti:Al)+15%SiC

На показатели прочности исследуемых материалов, в первую очередь, должно влиять объемное содержание MAX-фаз, слоистое строение которых положительно сказывается на значения сопротивления при поперечном изгибе. В целом, данный тезис подтверждается для всех образцов (рис. 4). Так, образец с минимальным содержанием $Ti_5Si_3C_x$ и отсутствием Ti_2AlC, при температуре спекания 1300°C, является менее прочным. Повышение температуре синтеза поводит к росту прочности. При этом для образца (3Ti:Al)+15%SiC значения прочности максимальны и сопоставимы с таковыми для монофазных материалов из MAX-фазы.

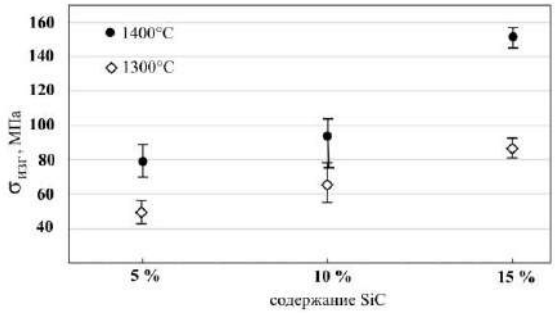


Рис. 4. Предел прочности на изгиб образцов с различным содержанием SiC и температурой спекания.

Микротвердость измерялась для отдельных зерен в спеченных образцах. На числа микротвердости, в основном, влияет относительное содержание конкретных фаз в месте индентирования. Относительно высокое содержание карбида титана в образце (3Ti-Al)+10%SiC способствует росту микротвердости. Композит, состоящий только из двух MAX-фаз, легче поддается механической обработке. Также, присутствие этих фаз положительно влияет на относительную стойкость к высокотемпературному окислению (табл.).

Таблица

Значения микротвердости и жаростойкости для исследованных образцов

Образец	Микротвердость, ГПа	Жаростойкость, привес массы, %
(3Ti-Al)+15%SiC	$5{,}7^{+1{,}5}_{-1{,}7}$	13,6
(3Ti-Al)+10%SiC	$10{,}1^{+2{,}6}_{-3{,}1}$	16,2
(3Ti-Al)+5%SiC	$5{,}6^{+1{,}4}_{-1{,}3}$	25,5

Предварительные исследования показали, что композиционные материалы с различным содержанием SiC после спекания можно подвергнуть измельчению в течение 30-40 минут для получения мелкодисперсного порошка, с сохранением фазового состава.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Фейгенбаум Ю. М., Бутушин С. В., Божевалов Д. Г., Соколов Ю. С. Композиционные материалы и история их внедрения в авиационные конструкции // Научный вестник ГосНИИ ГА, 2015. №7. с. 24-37.
2. Сметкин А. А. Свойства материалов на основе MAX-фаз (обзор) / А.А. Сметкин, Ю.К. Майорова // Вестник ПНИПУ, 2015. Т. 17, № 4. С. 120-138.
3. Fakih H. Phase Equilibria and Reactive Chemical Vapor Deposition (RCVD) of Ti3SiC2 / H. FakihS. JacquesO. Dezellus et al. // Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 2008. V. 29, № 3. Pp. 239-246.
4. Tang C. Synthesis and characteri-zation of Ti2AlC coatings by magnetron sputtering from three elemental targets and ex-situ annealing / C. Tang, M. Klimenkov, U. Jaentsch et al. // Surface and Coatings Technology, 2017. V.309. pp. 445-455.
5. Gorshkov V. A., Mi-loserdov P. A., Luginina M. A., Sachkova N. V., Belikova A. F. High-temperature synthesis of a cast material with a maximum content of the max phase Cr2AlC // Inorganic Materials, 2017. V. 53, № 3. pp. 271-277.
6. Prikhna T. A. Mechanical properties of materials based on MAX phases of the Ti-Al-C system / T.A. Prikhna, S.N. Dub, A.V. Starostina et al. // Journal of Superhard Materials, 2012. V. 34, № 2. pp. 102-109.
7. Atazadeh N. Reviewing the effects of different additives on the synthe-sis of the Ti3SiC2 MAX phase by mechanical alloying technique / Navid Atazadeh, Mina Saeedi Hey-dari, Hamid Reza Baharvandi, Naser Ehsani // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, 2016. V.61. pp. 67-78.
8. Ziqi Sun Surface Chemistry, Dispersion Behavior, and Slip Casting of Ti3AlC2 Suspensions / Ziqi Sun, Meishuan Li, Longfei Hu e al. // Journal of the American Ceramic Society, 2009. V. 92, № 8. pp. 1695-1702.
9. Farle A.-S. M. Oxidation and self-healing behaviour of spark plasma sintered Ta2AlC / Ann-Sophie M. Farle, Julia Stikkelman, Sybrandvan der Zwaag et al. // Journal of the European Ceramic Society, 2017. V.37, № 5. pp. 1969-1974.
10. Теслина М. А., Ершова Т. Б., Власова Н. М., Астапов И. А. Получение MAX-фазы системы Ti–Al–C методом порошковой металлургии / М. А. Теслина, // Перспективные материалы, 2016. №3. С. 75-80.

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ КАРБИДА КРЕМНИЯ НА ИЗНОС Ti-Al ЭЛЕКТРОИСКРОВЫХ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ Ti_6Al_4V

А. А. Бурков, С. А. Пячин, Н. М. Власова, М. А. Кулик

ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВО РАН
Хабаровск, e-mail: burkovalex@mail.ru

*Были нанесены покрытия на титановый сплав Ti_6Al_4V методом электроискровой обработки с помощью электродов на основе интерметаллида титана-алюминия с добавкой 5-15 вес.% карбида кремния. В составе покрытий обнаружены интерметаллиды Ti_3Al и TiAl, карбид и силицид титана. Содержание последних повышалось с ростом концентрации добавки в составе электродов. Износостойкость покрытий в режиме сухого скользящего трения снижалась с ростом содержания бора с 24,5 до 1,2 $\times 10^{-6}$ мм^3·Н$^{-1}$м$^{-1}$. Износостойкость покрытия с добавкой 15% карбида кремния была в 1.5*10^2 раз выше, по сравнению со сплавом Ti_6Al_4V без покрытий. Согласно обзору последних работ сделано заключение, что покрытия на основе Ti_3Al + SiC, полученные методом электроискрового легирования являются одними из лучших кандидатов для защиты сплава Ti_6Al_4V от сухого скользящего износа.*

Введение. Титановые сплавы широко применяются в аэрокосмической, химической, медицинской и прочих областях, из-за их низкой плотности, высокой удельной прочности, коррозионной стойкости, биосовместимости и других привлекательных характеристик. Сплав Ti6Al4V является наиболее распространенным среди титановых сплавов с момента его разработки в начале 1950-х годов. На его долю приходится не менее 50 % всего рынка титана [1]. Он широко используется в авиационной промышленности и медицинской технике благодаря своей высокой пластичности, малой массе и высокой механической прочности [2], коррозионной стойкости и биосовместимости. Однако применение титанового сплава в некоторых важных конструкционных элементах ограничено из-за его плохой износостойкости [3]. Поэтому по-

© Бурков А. А., Пячин С. А., Власова Н. М., Кулик М. А., 2018

верхностная модификация сплава Ti6Al4V является главной задачей для многих исследователей [1-4]. Электроискровое легирование является наиболее простой, эффективной и перспективной технологией модификации поверхности титановых сплавов [5, 6].

При электроискровом легировании материал анода подвергается электрической эрозии в условиях воздействия электрических разрядов, переносится на катод, перемешивается и образует покрытие, металлургически связанное с подложкой [5-6]. Для создания износостойких покрытий на сплаве Ti6Al4V зачастую используют твердые тугоплавкие соединения. Поэтому, в настоящей работе исследовалась износостойкость покрытий на основе карбида кремния со связкой из интерметаллидов титана-алюминия.

Электродные материалы (аноды) были получены методом порошковой металлургии из порошка титана (х.ч.) и алюминиевой пудры. Порошки Ti и Al были взяты в мольных долях 3:1, к ним был добавлен порошок карбида кремния SiC в количестве 5, 10 и 15 вес.% (Табл. 1). Электроды были получены в форме брусков с размерами 4×4×40 мм. Покрытия были нанесены с помощью электроискровой установки IMES-40, разработанной в Институте материаловедения ХНЦ ДВО РАН, оснащенной ручным электродом инструментом с вибропривод. Частота следования разрядных импульсов прямоугольной формы составляла 1 кГц, а длительность разрядов – 100 мкс. Амплитуда импульсов тока была 110±10 А; межэлектродное напряжение – 30±5 В, частота колебаний вибратора – 100 Гц. Покрытия осаждали на шайбы диаметром 12 и высотой 5 мм из титанового сплава Ti6Al4V при обдуве аргоном. Количество перенесенного с анода на катод вещества контролировали посредством взвешивания электродов через каждую минуту электроискровой обработки на весах Vibra HT с точностью 10^{-4} г. Фазовый состав полученных покрытий изучали с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-7 в Cu-Kα излучении. В целях идентификации линий рентгенограмм применялся программный пакет PDWin. Износостойкость покрытий согласно стандарту ASTM G99 – 04 исследовалась при сухом трении скольжения с применением контртел в виде дисков из быстрорежущей стали Р6М5 на скорости 12 м/с при нагрузке 25 Н. Изменение массы образцов измеряли с использованием лабораторных весов с чувствительностью 10^{-4} г (табл).

Таблица

Состав, прочность электродов и обозначения соответствующих покрытий на титановом сплаве Ti6Al4V

Состав, %масс.		Мольные соотношения		Электроды	Покрытия
3Ti+Al	SiC	3Ti+Al	SiC		
95	5	4,47	1	Э5	П5
90	10	2,11	1	Э10	П10
85	15	1,33	1	Э15	П15

В процессе ЭИЛ масса анодов уменьшалась, а масса катодов увеличивалась, что объясняется интенсивным разрушением анодного материала под действием электрических разрядов и частичным переносом его на катод (рис. 1). Характерно, что суммарные эрозия анода и привес катода за 4 минуты обработки снижались с ростом концентрации добавки в составе электродов. Так эрозия электрода Э5 была в 3 раза больше чем Э15. Соответственно, привес катода при использовании Э5 был почти в 2 раза выше, по сравнению с электродом Э15. С другой стороны, эффективность электроискрового осаждения покрытий, выражаемая как отношение привеса катода к эрозии анода, повышалась почти в два раза с 37 до 60 % при увеличении концентрации добавки в электродах. Снижение скорости электроискровой эрозии электродных материалов с ростом содержания добавки SiC вероятно обусловлено повышением их прочности. Оптимальное время осаждения Ti_3Al сплава с добавкой SiC не превышало 4 мин×см$^{-2}$, поскольку при дальнейшей обработке масса катода начинала снижаться у большинства образцов вследствие наступления «порога хрупкого разрушения легированного слоя».

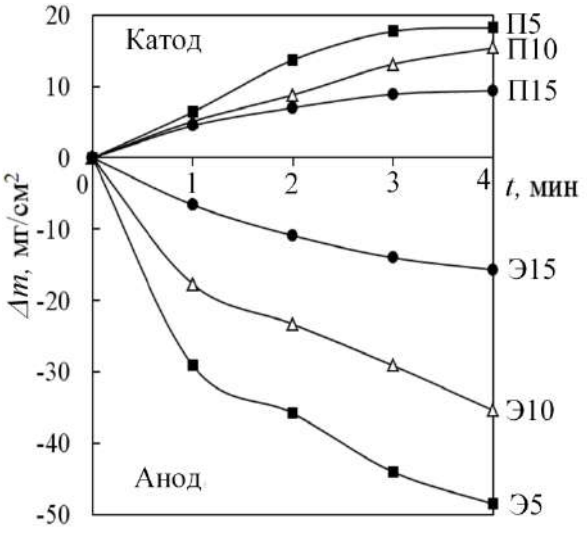


Рис. 1. Кинетика изменения массы электродов при ЭИЛ

Согласно результатам рентгенофазового анализа в составе полученных покрытий преобладают алюминид Ti_3Al и карбид титана TiC (рис. 2а). В покрытиях П10 и П15 также обнаружены карбид кремния, силицид титана Ti_5Si_3 и интерметаллид TiAl.

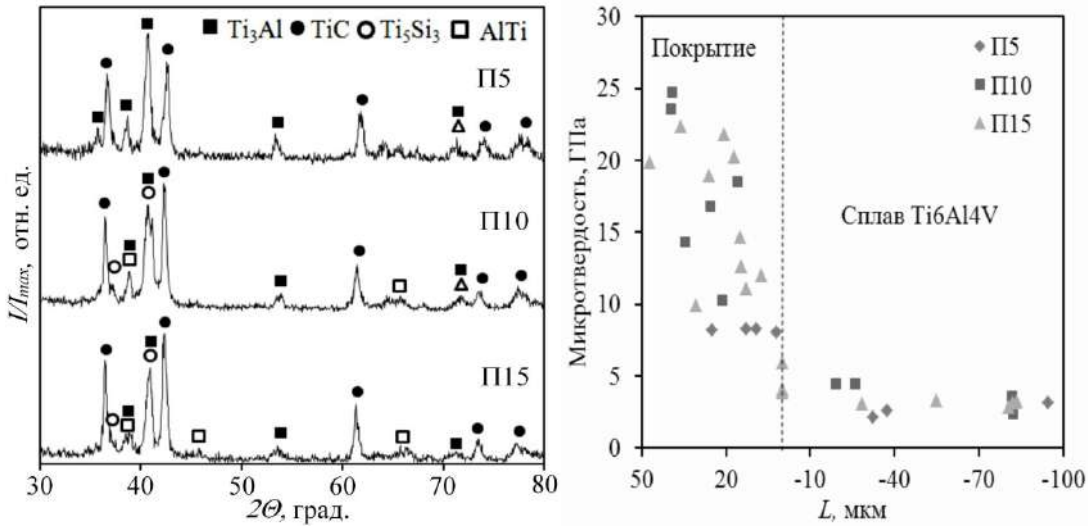


Рис. 2. Рентгеновские дифрактограммы осажденных покрытий (а)
и распределение микротвердости по сечению образцов с покрытиями (б)

Микротвердость покрытий различалась в зависимости от содержания добавки SiC в электродных материалах (рис. 6). Так для покрытия П5 она составляла 8,2±0,1 ГПа, а для образцов П10 и П15 микротвердость была близка и находилась в диапазоне10,2-24,7 и 9,9-22,4 ГПа, соответственно. По мере приближения к подложке микротвердость покрытий снижалась. Таким образом, осажденные покрытия позволяют повысить твердость сплава Ti6Al4V в 2.5 – 5 раз. Коэффициент трения сплава Ti6Al4V и покрытий на основе Ti_3Al с добавкой карбида кремния при сухом трении скольжения относительно стали Р6М5 показан на рисунке 3а. На графике видно, что коэффициент трения всех покрытий возрастал в процессе испытаний в отличие от сплава Ti6Al4V. Поэтому в среднем коэффициент трения покрытий был выше, чем у сплава Ti6Al4V на 21 – 28 %. Самый низкий кэффициент трения среди покрытий был у образца П15, в среднем он составил – 0,27.

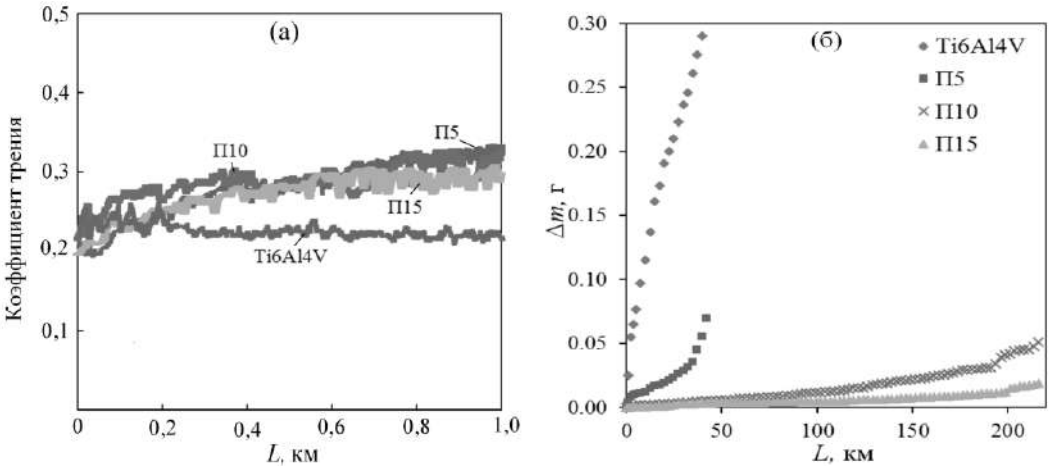


Рис. 3. Коэффициент трения (а) и скорость износа (б) покрытий по сравнению со сплавом Ti6Al4V

Сравнение скоростей износа сплава Ti6Al4V и покрытий на основе Ti_3Al с добавкой карбида кремния при сухом трении скольжения продемонстрировано на рисунке 3б. Из него следует, что средняя скорость износа покрытий за 3,7 км пути скольжения была от 7,7 до 154,8 раз меньше, чем у сплава Ti6Al4V. С ростом содержания добавки в покрытиях скорость износа сильно снижалась. Так скорость износа покрытия П5 была в двадцать раз выше, чем П15. Это показывает, что добавка SiC в покрыте на основе Ti_3Al с значительно повышает устойчивость титанового сплава Ti6Al4V к изнашиванию. Скорость изнашивания покрытия с П15 составила $1{,}2\times10^{-6}$ мм3·$Н^{-1}м^{-1}$. Согласно обзору последних работ с 2015 года скорость износа защитных покрытий на сплаве Ti6Al4V составляла 0,22 – 7000 $\times10^{-6}$ $мм^3\cdot Н^{-1}м^{-1}$ [5-16]. Сопоставление полученных результатов с литературными данными показало, что покрытие П15 находится на третьем месте по износостойкости среди рассмотренных работ [7-12]. Период стойкости покрытий к изнашиванию повышался с ростом содержания карбида кремния. Так для покрытия П5 и П10 он составил 33 и 191 км, а покрытие П15 полностью не износилось за все 213 км испытаний.

Выводы. Методом электроискрового легирования на титановый сплав Ti6Al4V нанесены композиционные покрытия с использованием в качестве легирующего (анодного) материала - сплавов, полученных спеканием порошков интерметеллида Ti_3Al с 5–15 вес.% добавкой карбида кремния SiC. Установлено, что в ходе переноса вещества с анода на титановую подложку состав электродных материалов меняется, в результате осажденные поверхностные слои содержат алюминиды Ti3Al и TiAl, карбид титана TiC и силицид титана Ti_5Si_3. Результаты испытаний, показали, что электроискровые покрытия позволяют повысить твердость титанового сплава 2,5 – 5 раз и снизить скорость износа при сухом трении скольжения до 160 раз.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Ganjeh E., Sarkhosh H. Microstructural, mechanical and fractographical study of titanium-CP and Ti–6Al–4V similar brazing with Ti-based filler // Materials Science and Engineering A. 2013. V. 559. P. 119-129.
2. Liu Y. H., Hu J. D., Zhang Y P., Guo Z. X., Yang Y. Joining of zirconia and Ti6Al4V using a Ti-based amorphous filler // Journal of Materials Science and Technology. 2007. V. 27. P. 4983-4993.
3. Martini C., Ceschini L. A comparative study of the tribological behaviour of PVD coatings on the Ti–6Al–4V alloy // Tribology International. 2011. V. 44. P. 297-308.
4. Du S, Zhang K., Wen M., Qin Y., Li R., Jin H., Bao X., Ren P., Zheng W. Optimizing the tribological behavior of tantalum carbide coating for the bearing in total hip joint replacement // Vacuum. 2018. V. 150. P. 222-231.
5. Пячин С. А., Бурков А. А., Ершова Т. Б., Власова Н. М., Теслина М. А., Зайкова Е. Р. Исследование износостойкости и жаростойкости электроискровых Ti-Al-покрытий на титановом сплаве // Заготовительные производства в машиностроении. 2016. № 8. С. 37-44.
6. Пячин С. А., Бурков А. А., Власова Н. М., Кириченко Е. А. Влияние добавок оксидов и карбидов металлов на свойства интерметаллидных Ti_3Al электроискровых покрытий // Фундаментальные пробле-

мы современного материаловедения. 2016. Т. 13. № 2. С. 168-173.
7. Anand A., Das M., Kundu B., Balla V.K., Bodhak S., Gangadharan S. Plasma-sprayed Ti6Al4V alloy composite coatings reinforced with in situ formed TiB-TiN // Journal of Thermal Spray Technology. 2017. V. 26. P. 2013-2019.
8. Li X., Dong C., Zhao Q., Pang Y., Cheng F., Wang S. Characterization of Microstructure and Wear Resistance of PEO Coatings Containing Various Microparticles on Ti6Al4V Alloy // Journal of Materials Engineering and Performance. 2018. V. 27. P. 1642-1653.
9. Tao Y.-F., Li J., Lv Y.-H., Hu L.-F. Effect of heat treatment on residual stress and wear behaviors of the Ti-Ni/Ti2Ni based laser cladding composite coatings // Optics and Laser Technology. 2017. V. 97. P. 379-389.
10. Li J.-L., Cai G.-Y., Zhong H.-S., Wang Y.-X., Chen J.-M. Tribological properties in seawater for Ti/TiCN coatings on Ti6Al4V alloy by arc ion plating with different carbon contents // Rare metals. – 2016. - V. 36. - P. 858-864.
11. Cai C., Song B., Wei Q., Xue P., Wen S., Liu J., Shi Y.. In-situ integrated fabrication of Ti–Ni coating during hot isostatic pressing of Ti6Al4V parts: Microstructure and tribological behavior // Surface and Coatings Technology. 2015. V. 280. P. 194-200.
12. Wang J., Ma Y., Guan J., Zhang D. Characterizations of anodic oxide films formed on Ti6Al4V in the silicate electrolyte with sodium polyacrylate as an additive // Surface and Coatings Technology. 2018. V. 338. P. 14-21.

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ УГЛЕРОДА НА ОБРАЗОВАНИЕ ГРАДИЕНТА В ТВЕРДОМ СПЛАВЕ

М. И. Дворник Е. А. Михайленко

ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВО РАН
г. Хабаровск, e-mail: mea80@list.ru

Наноструктурный функциональный градиентный твердый сплав был получен путем спекания при температурах от 1350°С до 1410°С двухслойных образцов, состоящих из слоя WC-15Co-0.4VC-0.4Cr_3C2 с нормальным содержанием углерода и слоя WC-8Co-0.4 VC-0.4Cr_3C_2 с дефицитом углерода. Исследование показало, что образование в слое с дефицитом углерода η-фазы (Co_3W_3C) вызывает миграцию кобальта в него и препятствует возвращению кобальта обратно. При пониженных температурах спекания пористость полученных образцов равна 7%. Пористость наноструктурного твердого сплава, полученного при 1410°С, снижается до 2%. Максимальная твердость поверхностного слоя с низким содержанием кобальта (10%) достигает 1945HV.

Введение. Современные вольфрамокобальтовые твердые сплавы, применяемые для резания и бурения, должны обладать высокой твердостью [1]. Наибольшие требования к твердости предъявляются к режущей поверхности твердосплавных инструментов. В остальном объеме необходимо поддерживать необходимый уровень трещиностойкости (1600-1700 МПа√м). Изделия из градиентных твердых сплавов обладают твердой поверхностью режущей кромки и вязкой основой, что делает их более привлекательными для изготовления режущего инструмента. Градиент как правило возникает за счет миграции кобальтовой связки во время спекания образцов [2,3]. Для создания градиентной структуры применяют методы послойной насыпки [4], жидкофазным спеканием заготовок разного состава, но все они приводят к появлению необходимого распределения свойств по объему материала.

Методика. Для изготовления образцов наноструктурных твердых сплавов использовали следующие порошки (в скобках указана чистота порошков) WC, фирмы Hongwu (99.9%); Co, фирмы Kokkola (99.9%); Cr_3C_2 Донецкого завода химреактивов (99.7%,); VC, компании ВЕКТОН (99.7%,)

Смешивание проводили в мельнице Retsch PM 400 в течение 80 минут при соотношении массы шаров к массе смеси порошков 10:1. После добавления пластификатора (4% парафина), порошки прессовали при давлении 150 МПа. Для создания градиента применяли послойную

© Дворник М. И., Михайленко Е. А., 2018

засыпку порошков наноструктурного WC-15Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 и WC-8Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 сплавов. Масса одного слоя равна 6 грамм. Было создано четыре стандартных образца твердого сплава, которые спекали в вакуумной печи Carbolite STF при температурах 1350, 1370, 1390 и 1410°C. Выдержка при максимальной температуре составляла 60 минут. Твердость по Виккерсу всех сплавов измеряли с помощью твердомера HVS-50 (погрешность 2%) при нагрузке P=490,3 Н (50 кгс). Анализ микроструктуры образцов после шлифовки и полировки производили на растровом микроскопе TESCAN VEGA 3. Средние диаметры зерен WC в образцах были определены методом секущих.

Результаты и обсуждения. Использование послойного заполнения нанопорошков с различным содержанием углерода обеспечивает перераспределение кобальта при спекании образцов за счет его миграции из слоя WC-15Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 с нормальным содержанием углерода в область WC-8Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 с дефицитом углерода [3].

Коняшин и др. [2] описал обратную миграцию кобальта и постепенное выравнивание его концентрации в слоях исследуемых образцов. Но образцы, изученные в данной работе, характеризуются безвозвратной миграцией кобальта в слой WC-8Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2. По мере повышения температуры спекания с 1350 до 1410 °C содержание кобальта не выравнивается, так как дефицит углерода в слое WC-8Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 сохраняется. Градиент концентрации кобальта между поверхностью и объемом образцов составляет примерно 5% (рис. 1b). Миграция кобальта из слоя WC-15Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 в слой WC-8Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 с дефицитом углерода приводит к уменьшению его содержания в слое WC-15Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 от 15% до 10% (рис. 1b) и увеличению в слое WC-8Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 от 8% до 14%.

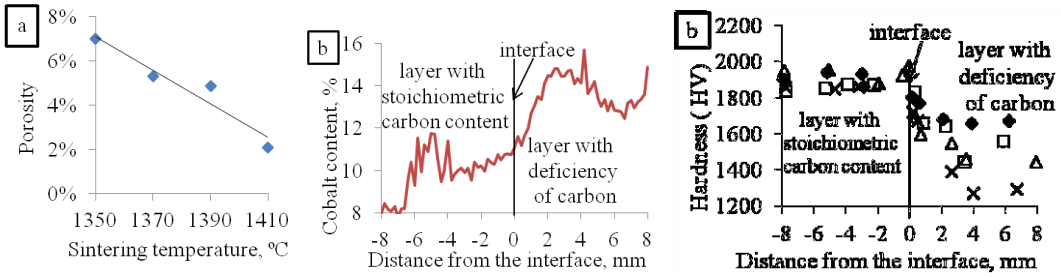


Рис. 1. Зависимость пористости от температуры спекания (а), распределение кобальта по поперечному сечению образца, спеченного при 1410 (б), распределение твердости по поперечному сечению образцов, спеченных (с) при 1350°C (×), 1370°C (□), 1390°C (Δ), 1410°C (♦)

Градиентный твердый сплав, спеченный при 1350°C характеризуется высокой пористостью (7%) и высокую твердость (1860 HV) WC-15Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2. Градиент твердости этого наноструктурного твердого сплава WC-Co равен 590 единицам Виккерса. Градиентный твердый сплав, спеченный при 1410°C, имеет максимальную твердость (1945HV) поверхностного слоя (рис. 2а) должный к зернам карбида вольфрама более малого среднего диаметра и низкой пористости (2%). Градиент твердости WC-Co наноструктурного твердого сплава равен 285 единицам Виккерса. Снижение градиента твердости обусловлено ростом среднего диаметра зерен WC и уменьшением пористости при высокой температуре спекания.

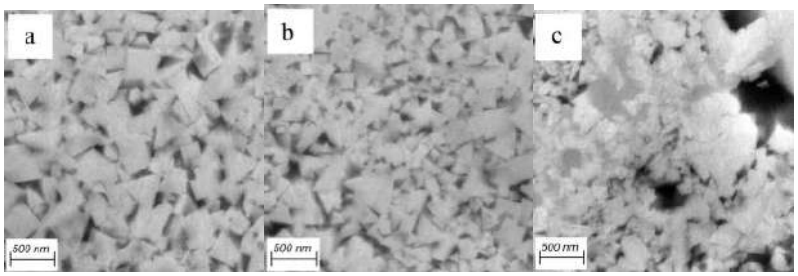


Рис. 2. Микроструктура сплава, спеченного при 1410°C в слое со стехиометрическим содержанием углерода (а), на границе раздела (в), в слое с дефицитом углерода (с)

Повышение температуры спекания привело к снижению пористости образцов с 7% до 2% (рис. 1a), что приводит к увеличению твердости слоя WC-15Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2. Микроструктура слоя WC-8Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2, представленная на рисунке 2c, состоит из WC зерен (серая область), кобальта (черные области) и η-фазы Co_3W_3C (светло-серая область). Наличие η-фазы приводит к снижению его твердости (рис. 1c). Твердость WC-8Co-0.4VC-0.4Cr3C2 равна 1660HV при максимальной температуре спекания (1410°C).

Поверхность между двумя слоями (WC-15Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2 и WC-8Co-0.4VC-0.4Cr_3C_2) (рис. 2b) не имеет η -фазы в широком температурном диапазоне. Твердость этой области достигает 1800HV.

Выводы. Наличие слоя, содержащего η -фазу (Co_3W_3C), стабилизирует градиент содержания кобальта и градиент твердости в градиентных нанокристаллических твердых сплавах в широком диапазоне температур спекания (1350-1410°C). Высокая температура спекания (1410°C) приводит к снижению пористости с 7% до 2%. Твердость поверхностного слоя с низким содержанием кобальта (10%) достигает 1945HV в этом образце.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Панов В. С., Чувилин А. М. Технология и свойства спеченных твердых сплавов и изделий из них. М.: МИСИС. 2001. .452с.
2. Konyashin I., Ries B., Lachmann F., Fry A.T. A novel sintering technique for fabrication of functionally gradient WC–Co cemented carbides // J Mater Sci. 2012. № 20. P 7072-7084.
3. Лисовский А. Ф. Формирование градиентной структуры в спеченных твердых сплавах (Обзор)/ Сверхтвердые материалы, 2010, № 4, с. 36-53.
4. Дворник М. И., Зайцев А. В. Изменение прочности, твердости и трещиностойкости при переходе от среднезернистого к ультрамелкозернистому твердому сплаву // Известия высших учебных заведений. порошковая металлургия и функциональные покрытия, 2017, № 2, с. 39-46

ФОРМИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИЦИИ $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ / ½y$(BiO)_2CO_3$ В ПРОЦЕССЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ МЕТИЛЕН СИНЕГО

О. И. Каминский, К. С. Макаревич, А. В. Зайцев, С. А. Пячин, Е. А. Кириченко, И. А. Астапов

ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВО РАН
г. Хабаровск, e-mail: kamin_div0@mail.ru

В работе проведено исследование фотокаталитически активной композиции $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ / ½y$(BiO)_2CO_3$. Установлено, что полученные фотокатализаторы поглощают свет видимого диапазона вплоть до 500 нм за счёт наличия узкозонного полупроводника $SrBi_4O_7$. Присутствие широкозонного полупроводника $(BiO)_2CO_3$ обеспечивает эффективное разделение электронно-дырочных пар. Спектры диффузного отражения (ДО) композиций имеют отличия от аналогичных спектров механической смеси данных полупроводниковых фаз того же состава, что позволяет предполагать гетероструктурное строение полупроводниковой системы. Показана возможность управления оптическими свойствами и фотокаталитической активностью композиции за счёт совместного формирования фазы висмутата стронция и фазы оксикарбоната висмута.

Введение. Поиск новых кататалитически активных систем, способных к фотолизу воды под действием солнечного света ведётся в направлении создания композиций на основе узкозонных полупроводников, обладающих областью поглощения в видимом диапазоне спектра [1]. Однако фотокатализаторы такого состава имеют существенный недостаток, связанный с токсичностью входящих в них тяжёлых металлов (например, Cd, Pb и др.) [2], что делает невозможным использование подобных веществ для очистки воды. Известно, что висмут составляет исключение по уровню токсикологической опасности среди тяжёлых металлов [3].

© Каминский О. И., Макаревич К. С., Зайцев А. В., Пячин С. А., Кириченко Е. А., Астапов И. А., 2018

Среди соединений Bi высокую каталитическую активность, сопоставимую с анатазом, демонстрирует карбонат $(BiO)_2CO_3$. Однако область его собственного поглощения лежит в УФ диапазоне спектра. Для сенсибилизации $(BiO)_2CO_3$ к видимому свету его легируют азотом [4]. Другие соединения висмута, например, узкозонный полупроводник $CaBi_6O_{10}$, не требуют применения добавок, поскольку характеризуются собственным поглощением в видимом диапазоне спектра [5]. Одним из способов увеличения реакционной способности узкозонных полупроводников является создание гетероструктурных композитов с широкозонными полупроводниками. В исследовании использован разработанный ранее пиролитический метод синтеза на основе комплексов висмута с сорбитом [6], который позволят одновременно получать композицию из двух полупроводников. В качестве широкозонного полупроводника в составе композиции был сформирован $(BiO)_2CO_3$, а поглощение видимого света достигалось за счёт введения $SrBi_4O_7$, который занимает центральное положение в области твердых растворов на диаграмме $SrO\text{-}Bi_2O_3$ [7].

Материалы и методы исследований. Образцы композиций синтезированы путём изотермической выдержки, предварительно пиролизованной смеси в муфельной печи при температурах 300, 400, 500, 600 и 700°C в течение 24 часов. Полученные композиции $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ / ½y$(BiO)_2CO_3$ обозначены как SBC-X, где X – температура синтеза. Содержание оксикарбоната висмута в образцах композиций определяли методом химического анализа. Удельную площадь поверхности частиц определяли по методу БЭТ. Фазовый состав образцов исследовали с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-7. Спектры диффузного отражения в УФ и видимом диапазонах получены с использованием спектрофотометрического комплекса на базе монохроматора МДР-41. Фотокаталитическая активность катализаторов была изучена по скорости разложения водного раствора красителя метиленового синего (МС) до бесцветных продуктов. Для этого использована автоматизированная фотометрическая установка [8]. В качестве источника облучения была использована газоразрядная лампа Aqua Arc (Sylvania-Osram), имитирующая спектр солнечного излучения. В качестве модельного загрязнителя был использован метилен синий (МС).

Результаты исследований. Синтезированные композиции представляют собой частицы диаметром несколько нанометров (рис. 1). Они собираются в агломераты диаметром 1.5-3.5 мкм. При этом по данным РФА (рис. 1) образуется продукт, фазовый состав которого при дальнейшем нагревании не изменяется вплоть до 300°C, поэтому далее нами будут приведены только результаты исследования образцов, полученных в температурном интервале 300–700°C. Изучение процесса фазообразования происходящего в исследуемой нами системе при нагревании показало, что композиция при 300-400°C состоит из трёх фаз: α-Bi_2O_3 и $(BiO)_2CO_3$, твердый раствор на основе $SrBi_{4-y}O_{7-z}$, где y=1.7. В температурном интервале 500-600°C имеет двухфазный состав: $(BiO)_2CO_3$, $SrBi_3O_{5.5}$, $SrBi_{4-y}O_{7-z}$, где y= 1.2. При 700°C состав становится однофазным: $SrBi_4O_7$.

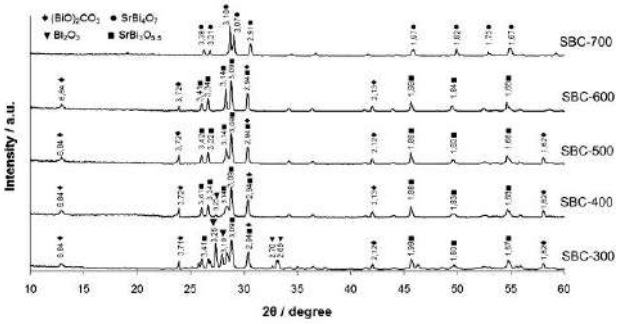


Рис. 1. Дифрактограммы образцов, полученных при различных температурах синтеза

Химический анализ с титрометрическим окончанием определения показал, что концентрация карбонатов в образцы, полученные при 300 – 400°C, примерно одинаковая и равна 29-32 масс.%. Содержание $(BiO)_2CO_3$ в образце SBC-500 чуть меньше – 27 масс.%, а в композиции SBC-600 – 18 масс.%.

Каталитическая активность полученных композиций и однофазных фотокатализаторов

Образец	Удельная поверхность S, $м^2/г$	Константа скорости $k \cdot 10^{-3}$, $мин^{-1}$	Удельная константа скорости $k_s \cdot 10^{-4}$, $г \cdot мин^{-1} \cdot м^{-2}$
α-Bi_2O_3	2.1	4	1.90
SBC-300	3.2	9	2.81
SBC-400	3.5	1.3	3.71
SBC-500	3.2	1.5	4.69
SBC-600	3.0	1.3	4.33
$SrBi_4O_7$	2.4	8	3.33

По данным БЭТ-метода наибольшей удельной площадью поверхности 3.5 $м^2/г$ обладает композиция SBC-400 (таблица). При дальнейшем нагревании происходит разрушение карбонатной фазы и укрупнение частиц. Таким образом, присутствие карбонатной фазы способствует формированию более развитой поверхности у двухфазных композиций.

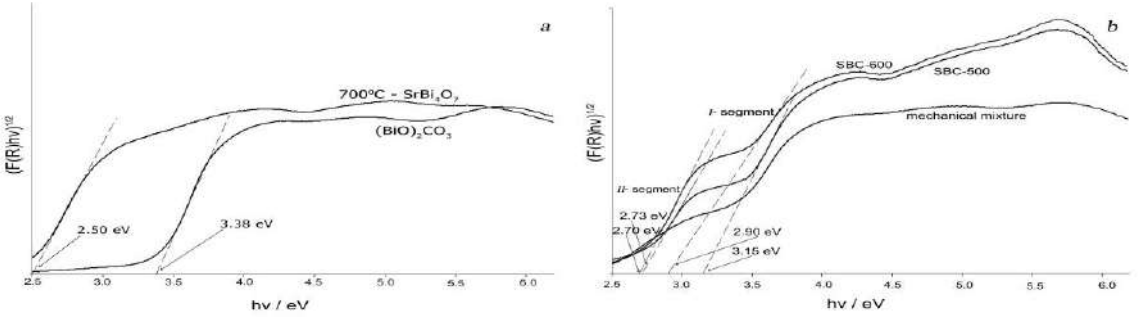


Рис. 2. Зависимости $(F(R)hv)^{1/2}$ композиций SBC-300, SBC-400, SBC-500, SBC-600, однофазных образцов $SrBi_4O_7$, $(BiO)_2CO_3$ и их механической смеси состава $73\%SrBi_4O_7 + 27\%(BiO)_2CO_3$ от энергии фотона

На основе спектров диффузного отражения для каждой синтезированной композиции, а также для $SrBi_4O_7$ и $(BiO)_2CO_3$, была рассчитана функция Кубелки-Мунка $F(R) = 0.5(1-R)^2/R-1$, где R – коэффициент отражения. Согласно оценкам, ширина запрещённой зоны $SrBi_4O_7$ и $(BiO)_2CO_3$ составила $E_g = 2.50$ eV и $E_g = 3.38$ eV, соответственно (рис 2a). Анализ зависимостей $(F(R)hv)^{1/2}$ для композиций SBC-500 и SBC-600 показал, что них можно выделить два линейных участка I и II (рис. 2b). Они представляют собой суперпозицию графиков двух полупроводников, входящих в состав композиции. Участок I соответствует оксикарбонату висмута, участок II – висмутату стронция. Сравнивая аналогичные кривые для механической смеси $73\%SrBi_4O_7 + 27\%(BiO)_2CO_3$, можно заметить, что между ними существует отличие.

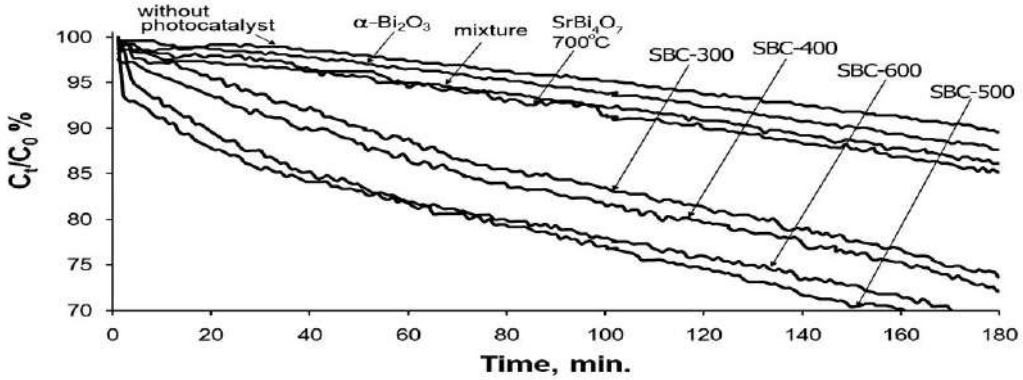


Рис. 3. Кривые фотокаталитического разложения МС при облучении светом видимого диапазона в присутствии композиций SBC-300, SBC-400, SBC-500, SBC-600, однофазных образцов $SrBi_4O_7$, α-Bi_2O_3 и механической смеси состава $73\%SrBi_4O_7 + 27\%(BiO)_2CO_3$

Изучение фотокаталитической активности проводили с использованием МС в качестве

модельного загрязнителя. Кинетические зависимости изменения концентрации МС без и в присутствии катализаторов: синтезированных композиций, $SrBi_4O_7$ и α-Bi_2O_3 – показаны на рис. 3. Из всех исследованных образцов наименьшей каталитической активностью обладают однофазные образцы $SrBi_4O_7$ и α-Bi_2O_3. Каталитическая активность двухфазных композиций во всех случаях оказывалась выше. При этом наибольшую активность образца SBC-500 мы связываем с тем, что при 500°C сформировалось достаточное количестве висмута стронция, благодаря чему композиция оказывается сенсибилизирована к видимому свету. С другой стороны, сохраняется $(BiO)_2CO_3$ в достаточном количестве 27% для эффективной работы катализатора.

Константа скорости реакции k были определены посредством нахождения параметров уравнений линейной регрессии для зависимостей $\ln(C/C_0) = f(t)$. Полученные значения k представлены в таблице. По мере увеличения температуры синтеза образцов, их каталитическая активность растет и становится наибольшей для композиции SBC-500 ($k_s = 4.69$). Дальнейшее повышение температуры сначала приводит к снижению константы k_s до 4.33 для образца SBC-600. Затем следует значительное падение k_s до 3.33 при температуре 700°C, когда композиция становится однофазной.

Обсуждение результатов. Полученные результаты могут быть объяснены сокаталитическим эффектом различных фаз в композиции $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ / ½y$(BiO)_2CO_3$. Формирование такой структуры возможно за счет эпитаксиального роста в процессе совместного синтеза обоих полупроводников составляющих композицию. На возможность эпитаксиального роста так же указывают сходные рентгеноструктурные параметры полученного висмутата стронция и оксикарбоната висмута. Каталитическая активность смеси $SrBi_4O_7$ и $(BiO)_2CO_3$ (рис. 3) показала промежуточное значение между активностями входящих в ее состав фаз и уступает активности любой из полученных композиций, включая SBC-500. Следовательно, совместное фазообразование в процессе синтеза повышает эффективность фотокаталитической композиции.

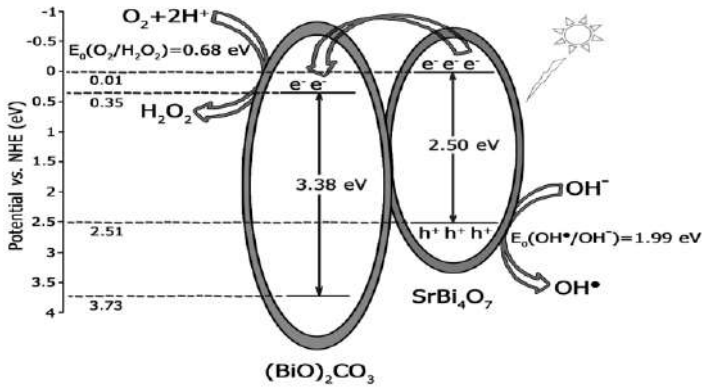


Рис. 4. Возможный механизм деструкции МС в присутствии полученных композиций

Согласно расчетам верхняя граница зоны VB и нижняя граница CB для $SrBi_4O_7$ равны 2,51 и 0,01 eV, соответственно, а для $(BiO)_2CO_3$ - 3.73 и 0,35 eV. Зонную структуру полученных образцов можно изобразить в виде схемы, показанной на рис. 4.

Облучение видимым светом приводит к генерации электронно-дырочных пар только в узкозонном полупроводнике $SrBi_4O_7$, поскольку $(BiO)_2CO_3$ не обладает способностью использовать энергию видимой части спектра (рисунок 4). Энергии CB и VB $SrBi_4O_7$ выше, чем у $(BiO)_2CO_3$, соответственно переход фотогенерированных электронов из зоны проводимости $SrBi_4O_7$ в зону проводимости $(BiO)_2CO_3$ является энергетически выгодным. В результате электроны накапливаются в зоне проводимости широкозонного полупроводника, тогда как дырки остаются в валентной зоне $SrBi_4O_7$, что приводит к пространственному разделению носителей заряда. Таким образом, время жизни носителей заряда значительно возрастает, что способствует более эффективному течению фотолиза воды.

Выводы. (1) Показано, что методом окислительного пиролиза комплексов соответству-

ющих металлов с сорбитом можно получить композицию состава $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ / ½y$(BiO)_2CO_3$, где *y* 1.2-1.7. Фотокаталитическая активность такой композиции под действием света видимого диапазона выше, чем у механической смеси того же состава, а также фаз α-Bi_2O_3 и $SrBi_4O_7$. Наибольшей каталитической активностью обладают композиции, полученные при 500-600°С и содержащие 73-82 масс.%, $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ и 18-27 масс. % $(BiO)_2CO_3$. (2) Исследование оптических свойств показало, что спектры (ДО) композиций не являются простой суперпозицией образующих их полупроводниковых фаз и отличаются от спектров механической смеси того же состава. (3) Особенности спектров диффузного отражения полученных композиций $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ / ½y$(BiO)_2CO_3$, а так же синергетический эффект формирующих её фаз отмеченный при катализе, позволяют предполагать гетероструктурный характер строения композиций. (4) Механизм фотокаталитической активности полупроводниковых фаз, образующих композицию $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ / ½y$(BiO)_2CO_3$, объяснено на основе анализа зонной структуры.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Robab AhmadkhaniAziz Habibi-Yangjeh , Facile ultrasonic-assisted preparation of Fe3O4/Ag3VO4 nanocomposites as magnetically recoverable visible-light-driven photocatalysts with considerable activity // Journal of the Iranian Chemical Society. Vol. 14. Is. 4. P. 863–872. 2017.
2. H. Zhu, B. Yang, J. Xu et al., Construction of Z-scheme type CdS-Au-TiO2 hollow nanorod arrays with enhanced photo-catalytic activity // Applied Catalysis B. 2009.vol. 90. №. 3-4. P. 463-469.
3. Юхин Ю. М., Михайлов Ю. И., Химия висмутовых соединений и материалов // Новосибирск: Издательство СО РАН. 2001. 360 с.
4. Chongjun Wang, Zaiwang Zhao, Bin Luo, Min Fu, Fa Dong , Tuning the Morphological Structure and Photocatalytic Activity of Nitrogen-Doped (BiO)2CO3 by the Hydrothermal Temperature, Corporation // Journal of Nanomaterials. 2014. Vol. 2014.
5. Y. J. Wang, Y.M. He, T.T. Li, J. Cai, M.F. Luo, L.H. Zhao, Photocatalytic degradation of methylene blue on CaBi6O10/Bi2O3 composites under visible-light // Chem. Eng. J. 2012. №. 189-190. P. 473-481.
6. R. S. Roth, C. J. Rawn, B. P. Burton, F. Beech Phase Equilibria and Crystal Chemistry in Portions of the System SrO-CaO-Bi203-CuO, Part II-The System SrO-Bi203-CuO // J. Res. Natl. Inst. Stand. echnol. 1990. №. 95. 291.
7. Карякин Ю. В., Ангелов И. И., Чистые химические вещества. М: Химия. 1974. 408 с.
8. Зайцев А. В., Каминский О. И., Макаревич К. С., Пячин С. А., Автоматизированный комплекс для исследования сорбционной и фотокаталитической активности с объединенной реакционной и измерительной частью // Сборник научных сообщений (ДВГУПС). 2017. № 22. С. 57-63.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗОМОРФНЫХ ФОРМ ОКСИДА ВИСМУТА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ПИРОЛИЗА ЕГО ОРГАНО-МИНЕРАЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Е. А. Кириченко[1], О. И. Каминский[1], А. В. Зайцев[1], С. А. Пячин[1], К. С. Макаревич[1], В. О. Крутикова[2]

[1]ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВО РАН
[2]ФГБУН «Институт тектоники и геофизики им. Ю.А. Косыгина» ДВО РАН
г. Хабаровск, e-mail: himicc@mail.ru

В работе исследованы оптические и морфологические характеристики оксида висмута (III) Bi_2O_3, полученного методом низкотемпературного окислительного пиролитического синтеза. В качестве прекурсоров использованы комплексы висмута с сорбитом. Показано, что при мольном соотношении в комплексе висмут: сорбит 2,6-2,7: 1 удается получить β-Bi_2O_3, имеющий площадь поверхности 4,7 $м^2/г$. При соотношении 3,0-3,5: 1 продуктом пиролиза является рентгенаморфный Bi_2O_3, имеющий развитую поверхность до 6,5 $м^2/г$. Установлено, что с увеличением содержания сорбита в составе прекурсорного комплекса, площадь поверхности образца увеличивается, при этом доля микропор в продуктах синтеза уменьшается, а доля макропор- и мезопор растет. Ширина запрещенной зоны полученных полупроводников составила 2,82 эВ для β-Bi_2O_3 и 3,07 эВ для рентгеноаморфного оксида висмута.

Введение. Соединения висмута характеризуются исключительно низкой степенью ток-

© Кириченко Е. А., Каминский О. И, Зайцев А. В., Пячин С. А., Макаревич К. С., Крутикова В. О., 2018

сичности по сравнению с соединениями других тяжелых металлов [1]. Возрастающие требования к биогенной безопасности веществ, используемых в современной технике, обусловили вновь возросший интерес исследователей к висмутовым материалам. Многие из них характеризуются ценными оптическими и электрофизическими свойствами и могут рассматриваться как потенциальные заменители соединений токсичных тяжелых металлов, для создания, безвинцовых и безкадмиевых полупроводников, сигнетоэлектриков, катализаторов и т.д.

Работы последних лет, посвященные синтезу оксида висмута, в основном ведутся в двух направлениях: (1) разработка методов получения оксида с развитой поверхностью (не менее 3 $м^2/г$) для использования его в качестве прекурсора при синтезе висмутовых материалов; (2) создание методов получения и стабилизации изоморфных форм оксида висмута, которые в качестве индивидуальных соединений сами по себе обладают ценными оптическими и электрофизическими свойствами [2].

Оксид висмута (III) Bi_2O_3 существует в виде четырех основных изоморфных форм. Три из них β-Bi_2O_3, γ-Bi_2O_3, δ-Bi_2O_3 являются метастабильными, в то время как α-Bi_2O_3 термодинамически устойчив. Особый интерес представляют β-Bi_2O_3 и δ-Bi_2O_3 формы оксида висмута. В частности, β-Bi_2O_3 по сравнению с α-Bi_2O_3 имеет более широкую область собственного поглощения в видимой части спектра и уникальную «туннельную» структуру кристаллической решетки, что делает его перспективным фотокатализатором видимого света [3]. Кислород-ионная проводимость кубического δ-Bi_2O_3 на несколько порядков превышает электропроводность других форм Bi_2O_3, что делает её перспективным твердотельным проводником [4].

Методы. Растворы органо-минеральных комплексов висмута с сорбитом были получены из нитрата висмута (III) пентагидрата $Bi(NO_3)_3 \cdot 5H_2O$ и сорбита, с использованием в качестве растворителя только кристаллогидратной воды первого. Пиролиз проводился на воздухе при температуре 200°С.

Удельную площадь поверхности частиц определяли по методу БЭТ. Фазовый состав образцов исследовали с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-7. Спектры диффузного отражения в УФ и видимом диапазонах получены с использованием спектрофотометрического комплекса на базе монохроматора МДР-41.

Результаты и обсуждение. Изучение продуктов пиролиза комплексов висмута с сорбитом показало, что при мольном соотношении в комплексе висмут: сорбит 2,6-2,7 : 1 продуктом является β-Bi_2O_3. На рентгенограмме (рис. 1) присутствуют все рефлексы характерные для этой фазы. Дополнительных рефлексов других фаз или не идентифицированных рефлексов не отмечается. Продуктом пиролиза комплекса содержащего висмут: сорбит в соотношении 3,0-3,5 : 1 является рентгенаморфный Bi_2O_3. Все пики рентгенограммы имеют малую интенсивность и значительное уширение, поэтому по данным РФА точнее идентифицировать фазу не удается.

Для идентификации рентгеноаморфной фазы дополнительно были определены её оптические характеристики методом спектрометрии диффузного отражения (СДО). Анализ спектров СДО показал (рис. 2), что ширина запрещенной зоны данной фазы составляет 3,08 эВ и соответствует значениям, приводимым для δ-Bi_2O_3 в ряде работ [3, 5]. Ширина запрещенной зоны, полученной β-Bi_2O_3, составляет 2,38 эВ и так же соответствует известным в литературе значениям.

Исследование морфологии полученных форм Bi_2O_3 показало, что оксид характеризуется развитой поверхностью, за счет формирования высокопористой структуры (рис. 3). Был проведен сравнительный анализ микрофотографий продуктов пиролиза, полученных при различном соотношении висмут: сорбит в составе прекурсорного комплекса (от 2,6 : 1 до 3,5 : 1). Показано, что чем меньше содержание сорбита в составе прекурсорного комплекса, тем больше диаметр наблюдаемых макропор. В результате, полученный β-Bi_2O_3 является наиболее мелкопористым, среди исследованных образцов, тогда как рентгенаморфный Bi_2O_3 характеризуется порами наибольшего диаметра.

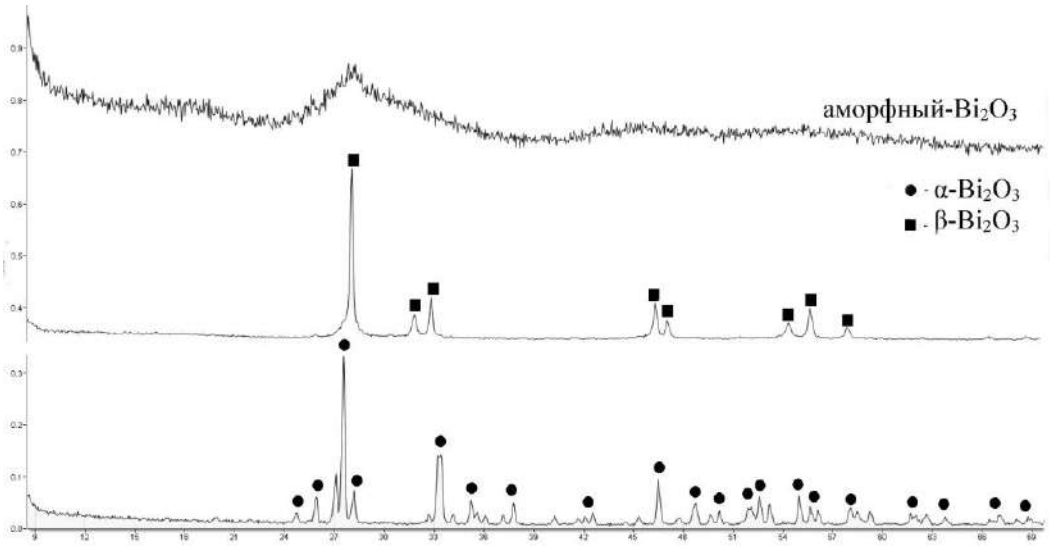


Рис. 1. Рентгенограммы полученных форм оксида висмута и α-Bi_2O_3 (приведен для сравнения)

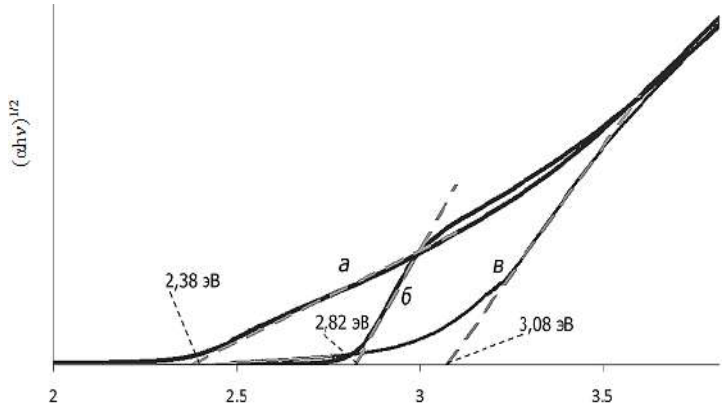


Рис. 2. Спектры диффузного отражения синтезированных образцов (а)- β-Bi_2O_3; (в)- аморфный-Bi_2O_3; спектр (б)- α-Bi_2O_3 приведен для сравнения

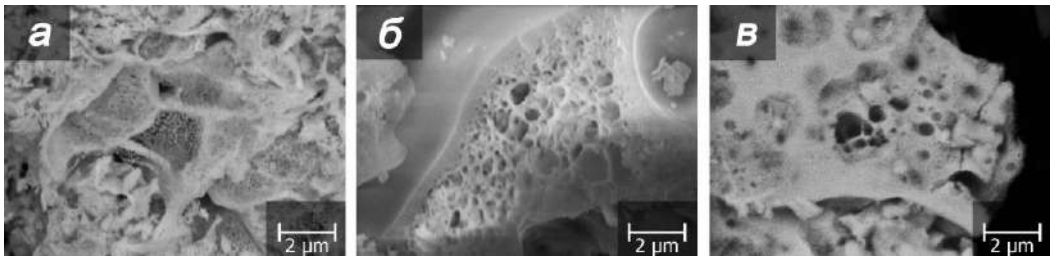


Рис. 3. СЭМ изображение форм оксида висмута, полученных при различном отношении висмут : сорбит в составе органического прекурсорного комплекса: (а) 2.6 : 1; (б) 3 : 1; (в) 3.5 : 1

На основе проведенного исследования полной изотермы адсорбции/десорбции азота, посредством алгоритма, реализованного в приборе Sorbi 4.2., было изучено распределение пор по диаметрам для исследуемых образцов (рис. 4). Показано, что для β-Bi_2O_3 (полученного пиролизом комплекса висмут: сорбит 2,6 : 1) наиболее характерны поры в диаметром от 3 до 38 нм. При этом около 25% от общего объема пор приходится на поры диаметрами от 6 до 10 нм (рис 4 а). В свою очередь для аморфного Bi_2O_3 (полученного пиролизом комплекса висмут: сорбит 3,5: 1) характерно наличие более крупных пор от 64 до 190 нм в количестве около 25% от общего объема пор (рис 4 в). Промежуточный состав (полученный пиролизом комплекса вис-

мут: сорбит - 3,0: 1) характеризуется распределением размерных групп пор диаметром 3-20 нм. и 20-65 нм примерно в равных долях (1:1) (рис 4 б). Установлено, что с уменьшением содержания сорбита в составе прекурсорного комплекса, площадь поверхности образца увеличивается от 4,7 до 6,5 $м^2/г$, а максимум распределения пор по диаметрам смещается в сторону пор большего диаметра от 65 до 190 нм.

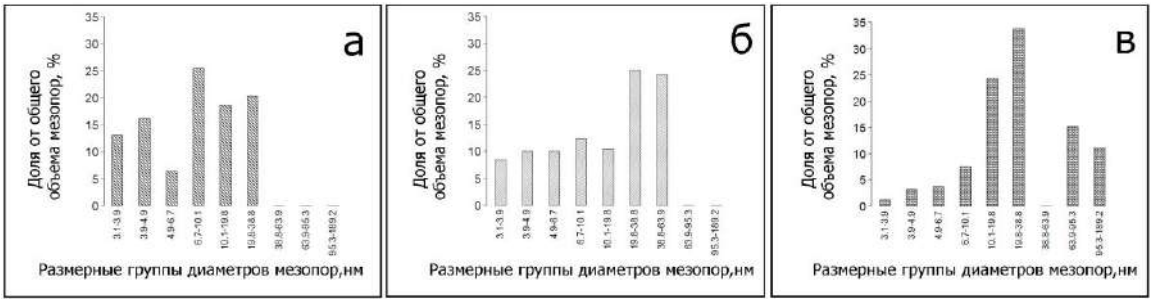


Рис. 4. Распределение пор по диаметрам для образцов полученных из прекурсорного комплекса с соотношением висмута к сорбиту: (а) 2.6: 1; (б) 3: 1; (в) 3.5: 1

Таким образом, благодаря развитой поверхности полученный β-Bi_2O_3 может являться эффективным фотокатализатором в реакторах очистки воздуха, а аморфный-Bi_2O_3 может быть использован, как высокореакционный прекурсор для низкотемпературного синтеза полупроводников, сегнетоэлектриков, люминофоров и сверхпроводников.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Slikkerveer A., de Wolff F., Toxicity of bismuth and its compounds // Toxicol. Met. 1996. №. 2. P. 439-454.
2. Юхин Ю. М., Михайлов Ю. И., Химия висмутовых соединений и материалов. Новосибирск: Издательство СО РАН. 2001. 360 с.
3. Hefeng Cheng, Baibiao Huang, Jibao Lu, Zeyan Wang, Bing Xu, Xiaoyan Qin, Xiaoyang Zhang and Ying Dai, Synergistic effect of crystal and electronic structures on the visible-light-driven photocatalytic performances of Bi2O3 polymorphs // Phys Chem Chem Phys. 2010. №. 12. P. 5468-15475.
4. H. A.HarwigA.G.Gerards, Electrical properties of the α, β, γ, and δ phases of bismuth sesquioxide // Journal of Solid State Chemistry. 1978. V. 26. Is. 3. P. 265-274.
5. Lin Zhou, Wenzhong Wang, Haolan Xu, Songmei Sun, and Meng Shang, Bi2O3 Hierarchical Nanostructures: Controllable Synthesis, Growth Mechanism, and their Application in Photocatalysis // Chemistry A Europian Journal. 2009. №. 15. P. 1776-1782.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ЛЕГИРОВАННОГО СЛОЯ И ЕГО СВОЙСТВ ПРИ МЕХАНИЗИРОВАННОМ ЭЛЕКТРОИСКРОВОМ ЛЕГИРОВАНИИ СТАЛИ Х12Ф1 МОДЕЛЬНЫМИ МАТЕРИАЛАМИ

С. В. Коваленко[1], А. В. Козырь[2], Л. А. Коневцов[3], С. В. Николенко[3]

[1]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, 004936@pnu.edu.ru
[2]ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, a-v-kozyr@yandex.ru
[3]ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВ РАН
г. Хабаровск, konevts@narod.ru

В статье представлено исследование формирования легированного слоя и его свойств при механизированном электроискровом легировании стали Х12Ф1 модельными материалами. Показана кинетика механизированного ЭИЛ стали Х12Ф1 модельными переходными металлами Ti, V, Cr, Zr, Nb, Mo, Ta, W, а также Co и Ni и выявлены лучшие условия формирования ЛС, которые определяются взаимной растворимостью материалов электродов и соотношением количества эродированного материала анода.

© Коваленко С. В., Козырь А. В., Коневцов Л. А., Николенко С. В., 2018

Введение

Электроискровое легирование (ЭИЛ) – метод создания защитных покрытий исполнительных поверхностей инструментов, деталей машин и механизмов для повышения их эксплуатационных свойств, надёжности и долговечности, предложенный в 1943 году советскими учёными супругами Б. Р. и Н. И. Лазаренко [1]. Является одной из простых, эффективных и перспективных современных наукоёмких технологий модификации различных поверхностей.

При ЭИЛ эффективность процесса зависит от объёма, гранулометрического и фазового состава материала, выброшенного из эрозионной лунки анода под воздействием электрического разряда и перенесённого на поверхность обрабатываемой детали-катода. Величина этого объёма, при прочих равных условиях, зависит от эрозионных свойств электродного материала. Поэтому эрозия является одной из важнейших характеристик материала легирующего электрода (анода), ответственных за формирование легированного слоя (ЛС).

Для повышения эффективности применения технологии ЭИЛ создают функциональные анодные материалы с учётом специфики их поведения в условиях рассматриваемого процесса [2, 3]. При этом нет общепризнанного мнения о влиянии эрозии на процесс формирования ЛС, её зависимости от теплофизических и механических констант материала электродов. В связи с этим представляет научный и практический интерес исследование процесса формирования ЛС при механизированном ЭИЛ сталей «модельными объектами» – чистыми металлами [4].

Методика, материалы и оборудование.

Известно, что при ЭИЛ сталей лучшие условия формирования ЛС и его свойств возможны при использовании материалов анода, образующих неограниченно твёрдые растворы с материалом катода. В силу условий и особенностей «чистового» механизированного ЭИЛ вращающимся торцевым электродом-инструментом (ЭИ), большинство материалов подвержено хрупкому разрушению под действием импульсных нагрузок и нуждается в защите от образования оксидных фаз.

Поэтому проведены исследования влияния физико-химических и эксплуатационных свойств переходных металлов IV-VI групп периодической системы элементов: Ti, V, Cr, Zr. Nb. Mo, Ta, W, и Co, Ni, как модельных материалов легирующего электрода, на состав, структуру, свойства ЛС при ЭИЛ стали Х12Ф1 на экспериментальной механизированной установке, оснащённой адаптивной следящей системой за позиционированием анода в межэлектродном промежутке (МЭП), с использованием в качестве генератора импульсов технологического тока промышленного «Элитрон-22А» ($I_р$ =1,4 А. $U_{хх}$=40 В; С=360 мкФ; Е=0,29 Дж; f=100 Гц).

В процессе ЭИЛ определяли изменение массы катода из инструментальной легированной стали Х12Ф1, применяемой для штамповой оснастки, и эрозии анодов от времени ЭИЛ. Проведены металлографические исследования поперечных срезов, рентгенофазовый анализ легированных образцов.

Исследовали кинетику процесса ЭИЛ, включающую временные зависимости суммарных и удельных эрозий анода $\sum^{t_x}\Delta_\alpha;\ \Delta_\alpha$, а также суммарных и удельных привесов катода $\sum^{t_x}\Delta_k;\ \Delta_k$. Эффективность процессов формирования ЛС и ЭИЛ рассчитывалась по формулам: $\gamma = \sum^{t_x}\Delta_k K_{ср} t_x$ (см^3/мин) и $\gamma' = \sum^{t_x}\Delta_k K_{ср} T_x K_{упр}$, (см^3/мин), где t_x – порог хрупкого разрушения ЛС, определяемый временем ЭИЛ, при котором наступает отрицательный удельный привес катода $\Delta_к$; T_x – порог хрупкого разрушения ИПС, $К_{ср}$ – коэффициент переноса материала за время t_x, равный отношению $\Delta_к$ /$\Delta_а$., ($\Delta_к$ и $\Delta_а$ – привес катода и эрозия анода за каждую минуту ЭИЛ), $К_{упр}$ – коэффициент упрочнения, принятый как отношение величин микротвёрдости ЛС к основе: $Н_\mu^{лс}/Н_\mu^{осн.}$.

Результаты и обсуждение. Согласно формуле Л. С. Палатника [5], чем выше коэффициент эрозионной стойкости материала анода, тем большей эрозионной стойкостью обладает материал. В условиях «чистового» ЭИЛ не выявлено прямой зависимости эрозионной стойкости материала анода от температуры его плавления как до наступления времени хрупкого разрушения ЛС, так и по истечении 10 минут процесса (рис. 1), хотя наиболее эрозионностойкими являются наиболее тугоплавкие электроды из Та и W.

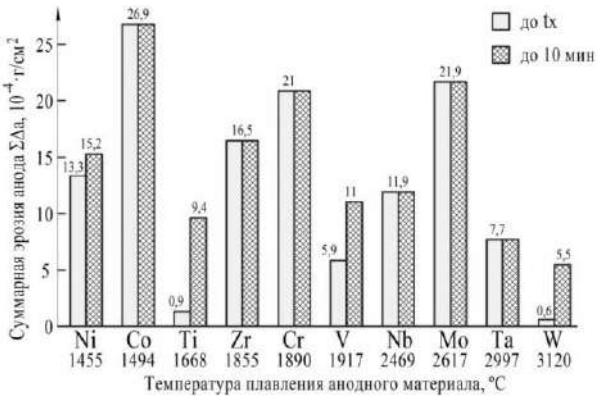


Рис. 1. Зависимость суммарной эрозии металлов от их температуры плавления после механизированного ЭИЛ стали Х12Ф1 до достижения порога хрупкого разрушения и 10 минут

Это связано с тем, что в процессе ЭИЛ на эрозию оказывают влияние кроме теплофизических констант материала и механические. То есть, эрозия происходит в жидкой, паровой и твёрдой фазах. Кроме того, в процессе ЭИЛ на поверхности электродов образуются «вторичные структуры». Вследствие их периодического разрушения увеличивается или уменьшается доля хрупкого разрушения материалов электродов, что влечёт изменение значений эрозии. Это подтверждает высказывание авторов [2] о невозможности построения абсолютного ряда материалов по их эрозионной стойкости ввиду сложных зависимостей фазовых составляющих эрозии от режимов обработки, межэлектродных сред и образования «вторичных структур» на рабочих поверхностях электродов.

Таким образом, привес катода за время достижения порога хрупкого разрушения t_x и эффективность формирования ЛС определяется, в основном, количеством эродированного материала анода (рис. 2). В связи с этим количество переносимого материала находится в прямой зависимости от энергетической устойчивости металла анода. Следовательно, для повышения эффективности «чистового» ЭИЛ необходимо обеспечить наибольшее количество жидкой фазы в продуктов эрозии, т.к. реакционная способность жидкости значительно выше, чем у твёрдого тела.

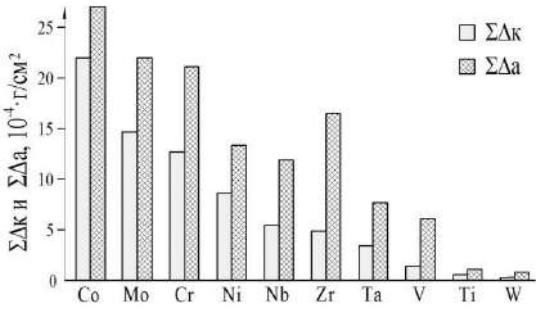


Рис. 2. Сравнение рядов суммарных привесов катода и суммарных эрозий анода

Данные металлографического анализа (рис. 3) поверхности катода после ЭИЛ показывают, что сплошность покрытий на стали Х12Ф1 наиболее высокая у Ni (100 %), а также Cr, Zr (до 99,8 %) Co и Ta (до 98 %), а наименьшая у W, Ti и V. Толщина ЛС наибольшая у Co и Ta, Mo и Cr, а наименьшая у Ti, имеющего наибольшую склонность к охрупчиванию.

Выявлено, что микротвёрдость ЛС наибольшая при ЭИЛ стали Х12Ф1 Mo и Cr (11,05 и 8,47 ГПа), что объясняется образованием с Fe интерметаллидной фазы: Fe_2Mo и образованием интерметаллида FeCr и карбидного соединения Cr_7C_3. Подтверждается взаимосвязь количества жидкой фазы при ЭИЛ. Ni, имеющий наибольшее содержание жидкой фазы (72 %), имеет наибольшую сплошность ЛС – 100 %. Однако ЛС из Cr анода при жидкофазной составляющей 4 %, имеет сплошность до 99,8%. Это связано с неограниченной растворимостью Cr в α-твёрдом растворе железа, способностью к образованию интерметаллидов, карбидов.

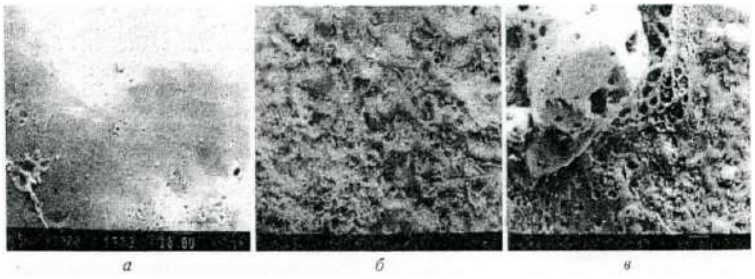


Рис. 3. Электронномикроскопические снимки ЛС стали Х12Ф1 при ЭИЛ: а) W; б) Ni, в) Cr (×1000)

Результаты рентгенофазового анализа ЛС приведены в таблице. Среди соединений на подложке идентифицируются интерметаллиды материала электрода и Fe, карбиды Fe различной стехиометрии, оксиды материала электродов; и в элементной форме – Cr, Co и Zr.

Таблица

Рентгенофазовый анализ ЛС после ЭИЛ стали Х12Ф1 модельными металлами

Материал электрода	Фазовый состав
Ti	γ-Fe; TiO; Fe-; C; Cr
V	α-Fe; γ-Fe; Fe_2C; Cr; FeV
Cr	γ -Fe; Fe_2C; Cr; FeCr, Cr_7C_3
Zr	γ -Fe; FeO; Fe_2C; $ZrO_{(Куб)}$; Zr; $FeZr_2$
Nb	α -Fe; Nb_2Fe_5; Fe_2C
Mo	α -Fe; Fe_3C_2; Fe_2Mo
Ta	γ-Fe; FeC; FeO; Fe_3C; Cr; $CrTaO_4$
W	α-Fe; WC_{1-x}
Co	α-Fe; Co; Fe_3C_2
Ni	FeNi

Все исследуемые модельные анодные металлы упрочняют поверхность стали Х12Ф1. Подсчитано, что наиболее высокий коэффициент упрочнения $К_{упр.}$ (рис. 4) у Mo (4,23) и Cr (3,25), а наименьший у Co (1,54) и Ni (1,49), что объясняется неспособностью ими образовывать карбиды и нитриды в присутствии Fe.

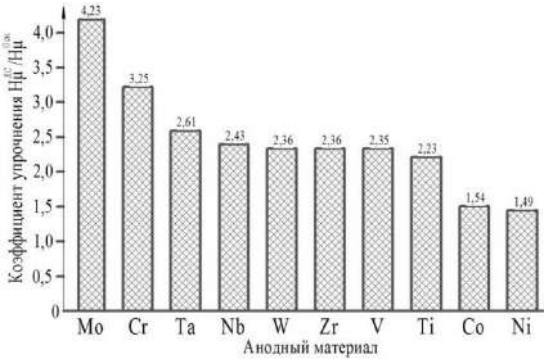


Рис. 4. Гистограмма $К_{упр.}$ стали Х12Ф1 при ЭИЛ модельными металлами

На рис. 5 показаны результаты износа образцов после ЭИЛ. Материалом контртела служила закалённая сталь 45 (HRC=48-50). Анализируя полученные данные на гистограммах, можно сделать вывод, что на износостойкость стали марки Х12Ф1 существенное влияние оказывает ЛС.

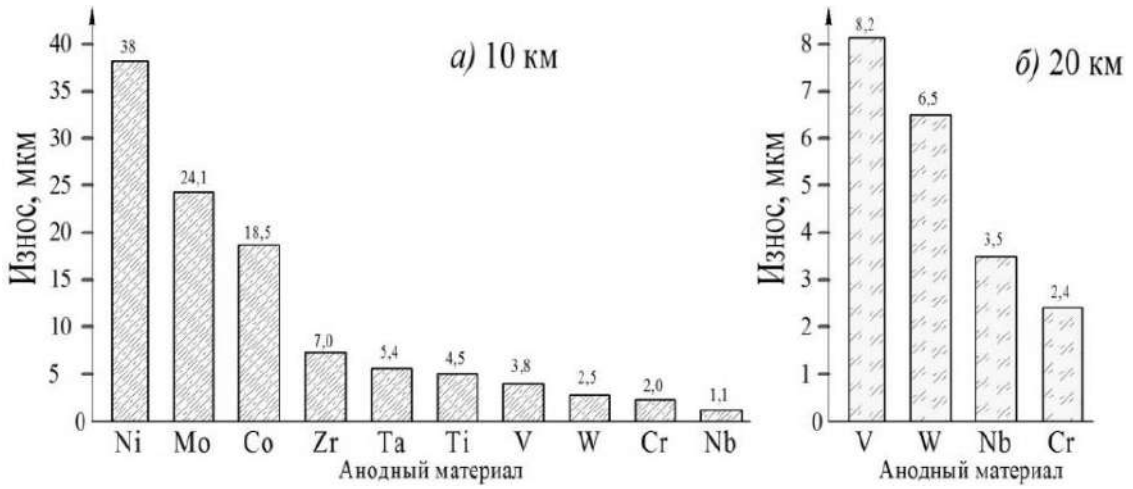


Рис. 5. Гистограммы относительного износа ЛС после ЭИЛ стали Х12Ф1 модельными металлами при пути трения: а) 10 км; б) 20 км

Выводы

1. Выполненные исследования кинетики механизированного ЭИЛ стали Х12Ф1 модельными переходными металлами Ti, V, Cr, Zr, Nb, Mo, Ta, W, а также Co и Ni показали, что лучшие условия формирования ЛС определяются взаимной растворимостью материалов электродов и соотношением количества эродированного материала анода.

2. Износостойкость в значительной степени зависит от толщины ЛС, состава модельных материалов легирующего анода и находится в прямой зависимости от времени испытаний.

3. Микротвёрдость ЛС не всегда является основным фактором повышения износостойкости. Средняя микротвёрдость ЛС, полученного при ЭИЛ Zr (6,16 ГПа) в 2,52 раза, а ЛС, полученного при ЭИЛ Mo (11,05 ГПа), что в 4,53 раза превышает микротвёрдость материала основы (2,44 ГПа). Износостойкость ЛС у них меньше, чем Nb (2,59) и Cr (3,47).

4. Показана общая тенденция увеличения износостойкости ЛС при ЭИЛ с увеличением его микротвёрдости. На износостойкость ЛС значительное влияние оказывает его структура.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Лазаренко Б. Р., Лазаренко Н. И. Электроискровой способ изменения исходных свойств металлических поверхностей. М.: Изд-во АН СССР, 1958. 117 с.
2. Верхотуров А. Д., Подчерняева И. А., Самсонов Г. В., Фоменко В. С. Зависимость эрозии анода от состояния поверхности при электроискровом легировании // Электронная обработка материалов. 1970, № 6. С. 29-31.
3. Верхотуров А. Д., Иванов В.И., Коневцов Л.А. О влиянии физико-химических свойств чистых металлов на их эрозию при электроискровом легировании / Труды ГОСНИТИ, 2016. Т. 125 С. 202-215.
4. Верхотуров А. Д., Козырь А.В., Коневцов Л.А. Научные основы разработки и получение слоистых материалов на поверхности твёрдых сплавов: монография / ред. А.Д. Плутенко. Владивосток: Дальнаука, 2016. 475 с.
5. Палатник Л. С. Фазовые превращения при электроискровой обработке металлов и опыт установления критерия наблюдаемых взаимодействий // ДАН СССР, 1953. Т. 89. № 3. С. 455-458.

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ОСОБЕННОСТИ И СВОЙСТВА МАГНЕТРОННОЙ ПЛЕНОЧНОЙ ТЕРМОПАРЫ Ni + NiCr

А. И. Колпаков, А. П. Кузьменко, П. В. Абакумов, Тант Син Вин

ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет»
г. Курск, E-mail: artem.kolpakov.96@mail.ru

Методом магнетронного распыления металлических мишеней из никеля и нихрома, в качестве модельного материала, на установке МВУ ТМ-Магна Т (Зеленоград) отработаны методики формирования пленочных слоев с разной конфигурацией и размерами зоны их взаимного перекрытия, а также толщины. Представлены результаты наноразмерных исследований (методами атомно-силовой микроскопии (АСМ), четырехточечным методом и рентгеноструктурного анализа (РСА)) магнетронной пленочной металлической термопары из Ni + NiCr на керамической подложке из ситалла. Проведены исследования морфологических особенностей нанопленочных термопар с помощью цифрового голографического микроскопа. Описана методика прецизионного измерения скорости роста и толщины пленок в такой термопаре в зависимости от времени магнетронного распыления (120 и 300 с). Определено влияние толщины, варьируемой для каждого из этих компонент (чистого никеля или его слава с хромом – нихрома) от 10 до 0.5 мм и конструкции нанопленочного термопарного соединения с разной шириной зоны перекрытия, взаимного расположения и формы каждого из металлических нанослоев. Установлено, что основные параметры (термоэлектрическая мощность, электропроводность и теплопроводность) определяющие эффективность термоэлектрического материала уменьшаются с ростом толщины пленочной структуры.

Твердотельные термоэлектрические преобразователи энергии имеют бесспорных ряд преимуществ перед традиционными электрическими генераторами и охладителями, в частности, за счет реализации непосредственного и обратимого цикла «тепло ↔электроэнергия». Интерес к ним в значительной степени стимулировался в связи с интенсивным развитием, так называемых, тонкопленочных технологий для создания многокомпонентных нанокомпозитов с разными типами проводимости, в частности $Sb_{0.9}Bi_{1.1}Te_{2.9}Se_{0.1}$ [1]. Теоретически переход к наноструктурированным материалам должен сопровождаться увеличением термоэлектрическую эффективности [2–4]. Это связывается с рассеянием фононов на границах наночастиц [2], которое снижает решеточную теплопроводность, а также квантовым туннелированием носителей заряда через вакуумные, либо диэлектрические зазоры между частицами, приводящее к росту электропроводности, термоэдс и фактора мощности [3, 4]. Условием для возникновения термоэлектрических явлений является градиент температур. Низкая добротность термоэлектриков (η) ограничивает их более широкое и активное использование. Для анализа возможностей повышения уровня термоэлектрического преобразования используется термоэлектрическая эффективность ($ZT = S^2\sigma T/k$), позволяющая установить роль и влияние: коэффициента Зеебека, определяющего термоэлектрическую мощность – S, электропроводности – σ и теплопроводности – k [5 – 9]. Очевидно, величин $S = dU/dT$ и σ должны быть наибольшими, так чтобы даже при незначительной разности температур давать приемлемые величины ZT. Значение же теплопроводности – k должно быть минимизированным, что обеспечит снижение рассеяния тепла в самом термопреобразователе без изменения градиента температур. Подбор термоэлектрических материалов со столь жесткими взаимоисключающими свойствами нановключений весьма затруднен [5, 8]. Термоэлектрические преобразователи становятся конкурентно способными с современными холодильными машинами при достижении $ZT > 3$ [9], к сожалению, в настоящее время достигнутое значение ZT лишь приближается к 2 [10].

Перспективными в этом отношении, как уже отмечено, являются полупроводники с наибольшей значением S как объемные [11], так и пленочные, создаваемые [11 – 13], в частности, при магнетронном распылении [14, 15].

В этой ситуации представляется целесообразным провести анализ возможности увеличения термоэлектрической эффективности ZT за счет тонкопленочного структурирования термоэлектриков, выбора области их перекрытия изменением взаимной конфигурации при магне-

© Колпаков А. И., Кузьменко А. П., Абакумов П. В., Тант Син Вин, 2018

тронном распылении. В настоящей работе для этой цели в качестве модельного материала были выбраны металлические мишени из никеля и нихрома, объемные термопары из которых характеризуются незначительным коэффициентом Зеебека *S*.

Пленочная термопара из NiCr + Ni наносилась на керамические подложки из ситалла на малогабаритной вакуумной установке магнетронного распыления МВУ ТМ-Магна Т. Предварительно рабочая камера вакуумировалась до давления не хуже 5×10^{-4} Па. ИК-нагреватель на двух галогеновых лампах по 500 Вт обеспечивал нагрев подложки до 178°С. После чего в камеру напускался инертный газ – Ar (99.998 %) до рабочего давления 0.5 Па. Поддерживался расход инертного газа на уровне 0.7 л/ч. Установка имела 2 магнетрона. Индукция магнитного поля 0.03 – 0.1 Тл. Магнетроны поочередно подключались к постоянному источнику с мощностью 3 кВт при токе до 7 А. К распыляемой мишени прикладывалось отрицательное напряжение до 650 В. Магнетронный разряд возникал при 1200 В. При магнетронном распылении по методике, предложенной в [14, 15], определялись наиболее оптимальные режимы формирования нанослоев с минимальной шероховатостью. Таким образом нанопленки из NiCr и Ni с разными толщинами и размерами области перекрытия (рис. 1) были нанесены при одинаковой мощности 300 Вт. Время распыления составляло 120 и 300 с.

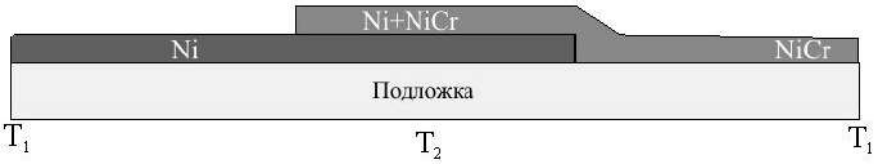
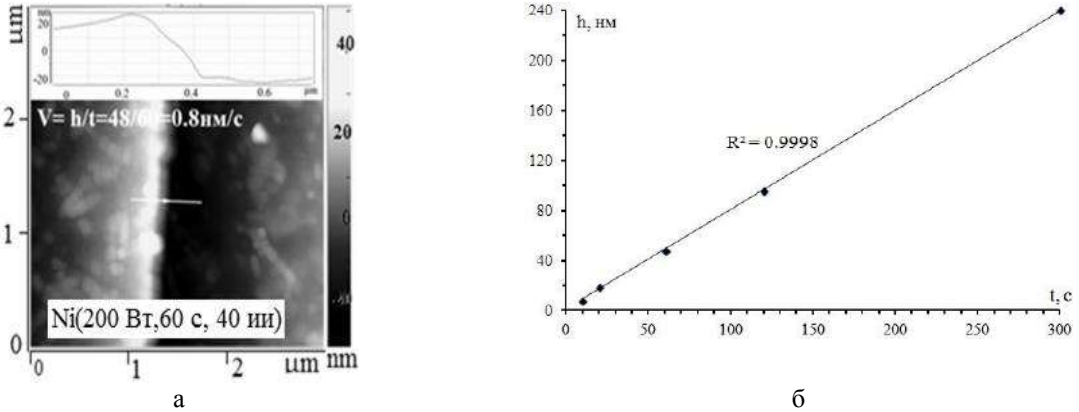


Рис. 1. Схематичное изображение тонкопленочной термопары Ni+NiCr

По аналогии с [14, 15], полученные нанопленки из термоэлектриков NiCr и Ni были исследованы рентгеноструктурным методом (РСА) (GBC EMMA, 60 кВ, 80 мА, Cu K_α, 2θ от 30 до 150°), методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) (AistNT SmartSPM с пространственным разрешением по Z-координате 30 пм). Было так же измерено удельное сопротивление на квадрат по стандартной 4-х зондовой схеме (на установке ИУС–3).

Толщина, наносимых пленок и перепад высоты между ними в зоне перекрытия определены с помощью АСМ методом ступеньки. АСМ-изображение такой ступеньки, полученной при мощности 200 Вт за время распыления 60 с после предварительная ионная чистка поверхности подложки в течение 40 с, показано на рис. 2, а. На вставке показано изображение профиля этой ступеньки. Перепад высот, определенный с точностью 30 пм, составил 48 нм. Зависимость высоты ступенек (толщины нанопленок) оказалась строго линейной (рис. 2, б). Скорость нанесения никелевых магнетронных пленок составила 0.8 нм/с. Аналогично проанализированы пленочные структуры из нихрома. Получена несколько меньшая скорость магнетронного распыления. Зависимость так же была линейной. Были изучены термоэлектрические характеристики Ni и NiCr термопар с толщиной пленок 96 и 240 нм. При этом ширина зоны перекрытия изменялась от 10 до 0.5 мм



а б

Рис. 2. Изменения толщины, никелевой магнетронной пленки

Результаты измерений 4-х зондовым методом удельного сопротивления магнетронной пленочной термопары Ni+NiCr с толщиной d = 96 и 240 нм в зависимости от ширины области перекрытия представлены на рис. 3, а. Как и ожидалось, наблюдалось уменьшение более чем 3 раза удельного сопротивления в пленочной термопаре с большей толщиной. Удельное сопротивление для пленочных термопар с этой толщиной линейно убывало с ростом ширины области перекрытия, тогда как при толщине 96 нм ρ(l) становилась явно нелинейной, достигая максимума при l = 5 мм.

Термоэлектрическая эффективность нанопленочных термопар измерялась по стандартной методике с использованием универсального вольтметра В7–78/1 с нагреванием до 100 С. Выбор именно такой температуры диктовался практическими потребностями создания пленочных гибких термоэлектрических преобразователей для бытовых нужд. Контроль температуры осуществлялся с помощью проволочной термопары хромель-алюмель. Измерена термоэд при разных площадях зон перекрытия при одинаковой температуре нагрева. По этим данным была рассчитана термоэлектрическая эффективность Z, зависимости которой при разных значениях ширины зоны перекрытия – l для 2 толщин нанопленок d = 96 и 240 нм представлены на рис. 3, б. Наибольший коэффициент Зеебека для пленочной термопары Ni+NiCr составил 5 мВ/^{0}С.

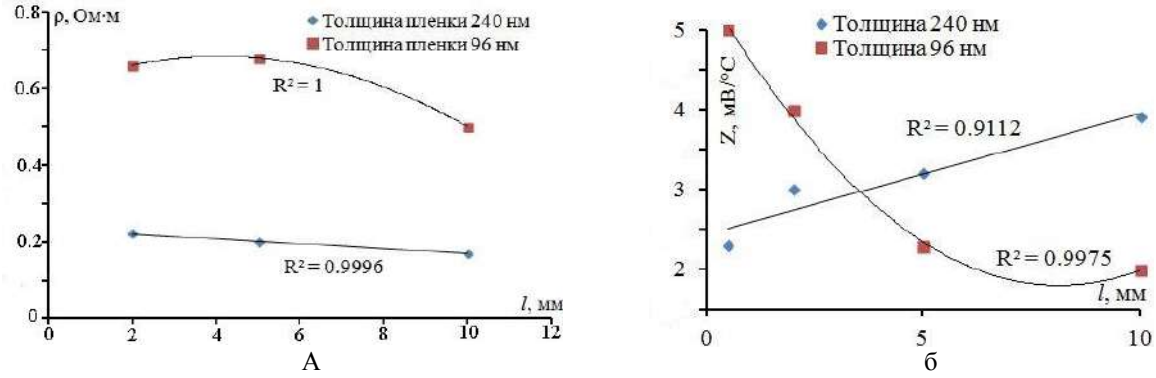


Рис. 3. Влияние ширины зоны перекрытия нанопленок из Ni и NiCr на:
а – удельное сопротивление, б – термоэлектрическую эффективность

Следует отметить, что в области высоких температур применительно к металлам оценочная величина S определяется соотношением, к примеру [16]: $S = \{(E_1 - \varepsilon_{F1}) + (E_2 - \varepsilon_{F2})\}/kT = \{(E_1 + E_2) - (\varepsilon_{F1} + \varepsilon_{F2})\}/kT$. Если учесть, что уровень Ферми (ε_F) для каждого из контактирующих металлов находится в зоне валентности, то для возникновения термоэдс необходимо, чтобы разность между энергией континуума всех электронов проводимости за вычетом соответствующей ε_F: $(E - \varepsilon_F)$ была выше энергии их тепловых движений – kT. Отсюда можно заключить, что термоэлектрическая эффективность будет наибольшей в паре металлов не только с наибольшей разностью $\varepsilon_F = \varepsilon_{F1} - \varepsilon_{F2}$ для каждого из них, но и при самом низком уровне энергии Ферми в каждом из них.

Исследованиями тонкопленочных термопар Ni+NiCr (с толщинами 96 и 240 нм) на ситалловой подложке, полученных методом магнетронного распыления, с разными конструкциями зоны перекрытия и ее размеров, установлено их оптимальное сочетание.

Показано, что все основные термоэлектрические параметры тонкопленочной Ni+NiCr термопары (термоэлектрическая мощность, электропроводность, теплопроводность) увеличиваются с ростом ее толщины.

В результате измерений четырехзондовым методом удельного сопротивления установлены, толщина нанопленок из Ni и NiCr, их конструкция и размеры зоны перекрытия, при которых проводимость становится наибольшей, то есть возрастает термоэлектрическая эффективность. Предложено качественное объяснение возможности формирования металлических термопар с увеличенной термоэлектрической мощностью, работающих в области высоких температур, за счет подбора пар металлов с металлической проводимостью и минимальными уровнями Ферми.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Калинин Ю. Е., Макагонов В. А., Ситников А. В. Термоэлектрические свойства тонкопленочных композитов $Sb_{0.9}Bi_{1.1}Te_{2.9}Se_{0.1}$ // Физика Твердого Тела. 2015. Т. 57. выпуск 10.
2. Булат Л. П., Драбкин И. А., Каратаев В. В. Влияние рассеяния на границах на теплопроводность наноструктурированного полупроводникового материала на основе твердого раствора $Bi_xSb_{2-x}Te_3$ // Физика Твердого Тела. 2010. Т. 52. выпуск 9.
3. Булат Л. П., Освенский В. В., Пархоменко Ю. Н., Пшенай-Северин Д. А. Исследование возможностей увеличения термоэлектрической эффективности в наноструктурированных материалах на основе Bi_2Te_3–Sb_2Te_3 // Физика Твердого Тела. 2012. Т. 54. выпуск 11.
4. Снарский А. А., Сарычев А. К., Безсуднов И. В., Лагарьков А. Н. Термоэлектрическая добротность объемных наноструктурированных композитов с распределенными параметрами // Физика и техника полупроводников. 2012. Т. 46. выпуск 5.
5. Немов С. А., Благих Н. М., Иванова Л. Д. Влияние межзонного рассеяния на кинетические коэффициенты и параметров зонного спектра Sb_2Te_3 // Физика твердого тела. 2014. Т. 56. выпуск 9.
6. Шульгин Д. А., Матухин В. Л., Шмидт С. В. Наноструктурированные материалы в термоэлектричестве // Наноматериалы и нанотехнологии в энергетике. 2014. С. 162-177.
7. Фреик Д. М., Юрчишин И. К., Лысюк Ю. В. Квантово-размерные эффекты в наноструктурах и проблемы термоэлектричества // Термоэлектричество. 2012. №2. С. 5-30.
8. Кульбачинский В. А., Кытин В. Г., Кудряшов А. А., Лунин Р. А., Banerjee A. Термоэлектрические свойства, эффект Шубникова-де Гааза и подвижности носителей заряда в теллуридах и селенидах висмута-сурьмы и нанокомпозитах на их основе Low Temperature physics / Физика низких температур // Физика низких температур. 2017. Т. 43. №4. С. 566-580.
9. Majumdar A. Enhanced: Thermoelectricity in semiconductor nanostructures. Science. 2004. p. 777-778.
10. Иванова Л. Д., Петрова Л. И., Гранаткина Ю. В., Леонтьев В. Г. и др. Спиннингование расплава – перспективный метод получения материалов твердого раствора теллуридов висмута и сурьмы // Термоэлектричество. 2013. № 1. С. 34-45.
11. Гольцман Б. М., Дашевский З. М., Кайданов В. И. Пленочные термоэлементы: физика и применение // Наука. 1985. 232 с.
12. Pushin V. G., Kuranova N. N., Pushin A. V., et al./ Formation of nanocrystalline structure in the amorphous $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$ alloy upon severe thermomechanical treatment and the size effect of the thermoelastic martensitic $B_2 \leftrightarrow B_{19}$ transformation // Fizika Metallov i Metallovedenie. 2012. Vol. 113. №.3. p. 286-298.
13. Priyadarshini B. G./ Structural and morphological investigations on DC-magnetron-sputtered nickel films deposited on Si (100) / B. G. Priyadarshini, S. Aich, M. Chakraborty // J Mater Sci. 2011. V. 46. № 9. P. 2860-2873.
14. Кузьменко А. П., Нау Динт, Мьо Мин Тан. Температурные изменения структуры магнетронных медных пленок на ситалловой подложке // Изв. Юго-Западного гос. ун-та. Сер. техника и технологии. 2015. Т. 16. № 3. С. 60-71.
15. Кузьменко А. П., Нау Динт, Кузько А. Е., Мьо Мин Тан, ТантСин Вин, Колпаков А. И./ Наноразмерная характеризация металлических магнетронных нанопленочных мультислоев из Cr, Cu, Al, Ni на ситалле // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2016. Т. 19. №. 3. С. 194-202.
16. Овсянников Д. А., Попов М. Ю., Буга С. Г., Кириченко А. Н., Тарелкин С. А., Аксененков В. В., Татьянин Е. В., Бланк В. Д. Транспортные свойства нанокомпозитных термоэлектрических материалов на основе Si и Ge // Физика твердого тела. 2015. т. 57. № 3. С. 590-597.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕТОИНДУЦИРОВАННОГО РЕЛЬЕФА НА ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКОСТИ

Д. С. Маленко

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
г. Хабаровск, e-mail: tmeh@festu.khv.ru

Экспериментально исследован светоиндуцированный механизм образования рельефа на свободной поверхности жидкости.

© Маленко Д. С., 2018

Поверхностные явления и силы поверхностного натяжения начинают оказывать существенное влияние на процессы переноса в тонких жидких слоях и зачастую становятся определяющими в слоях толщиной менее 1 мм. В этих случаях становится необходимым принимать во внимание термокапиллярные, концентрационно-капиллярные и термоконцентрационно-капиллярные механизмы оптической нелинейности дисперсных сред [1–3]. Изучение процессов на свободной поверхности жидкости имеет важное значение для развития рельефографии [4–6].

В данной работе приведены результаты экспериментального исследования рельефной нелинейности фотоабсорбционным методом.

В данном методе интенсивность прошедшего излучения определяется толщиной поглощающей жидкости. Распределение интенсивности прошедшего излучения фиксировалось с помощью видеокамеры и в цифровом виде записывалось на ПК.

В месте фокусировки пучка жидкость нагревалась и в результате теплопереноса формировалось неоднородное осесимметричное температурное поле, которое за счет термокапиллярных эффектов [7] и конвекции [8] приводило к образованию рельефа (впадины) на поверхности жидкости. На рисунке приведены полученные после цифровой обработки в системе Mathlab графики профилей прошедшей интенсивности в сечении кюветы, где наблюдается максимум прогиба поверхности.

По профилю пропускания легко рассчитывается толщина (рельеф) слоя жидкости.

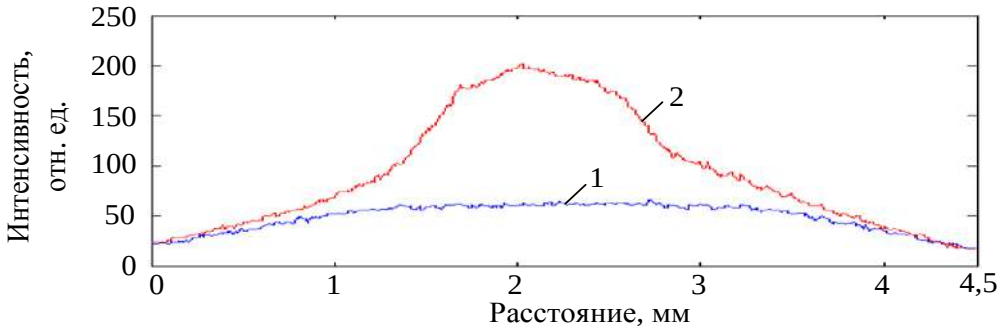


Рис. 1. Профили интенсивности прошедшего излучения:
1 – при отсутствии лазерного излучения (*I* = 0 мВт); *2* – при воздействии лазерного излучения (*I* = 60 мВт)

Таким образом, предлагаемая методика позволяет регистрировать термоиндуцированный рельеф поверхности жидкости.

Изучение светоиндуцированных процессов на свободной поверхности жидкости имеет важное значение для развития рельефографии [1-3]. Известно использование этого типа нелинейностей для записи динамических голограмм [4], создания элементов адаптивной оптики [5], для визуализации фазовых объектов [6]. Описание термогидродинамических механизмов образования рельефа обычно требует решения трудоемких численных задач, что значительно увеличивает ценность экспериментальных результатов.

В данной работе приведены результаты экспериментального исследования рельефной нелинейности фотоабсорбционным методом.

В данном методе интенсивность прошедшего излучения определяется толщиной поглощающей жидкости. Распределение интенсивности прошедшего излучения фиксировалось с помощью видеокамеры и в цифровом виде записывалось на ПК. В месте фокусировки инициирующего излучения наблюдалось просветление изображения, вызванное тем, что при неравномерном нагреве поверхности жидкости уменьшалась толщина пленки и, соответственно, увеличивалась интенсивность опорного излучения, падающего на объектив видеокамеры. На рис. 2 приведены полученные изображения с интервалом в 4 с.

На рис. 3 приведено распределение интенсивности, полученное после цифровой обработки в системе Mathlab.

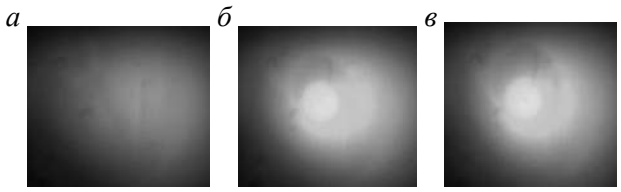


Рис. 2. Распределение интенсивности прошедшего
излучения в разные моменты времени при воздействии инициирующего излучения,
интервал между изображениями 4 с

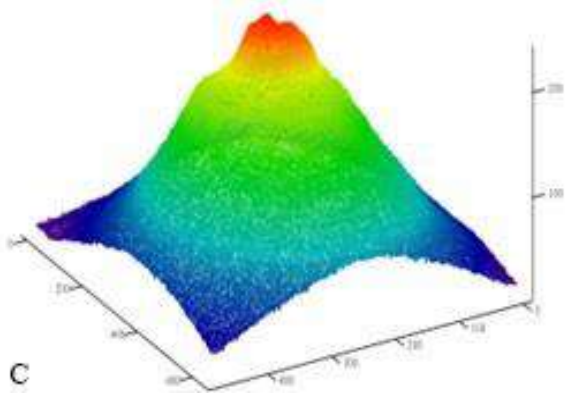


Рис. 3. Распределение интенсивности опорного излучения, прошедшего через кювету
при воздействии лазера

По профилю пропускания легко рассчитывается толщина (рельеф) слоя жидкости. Преимуществом метода является бесконтактность и возможность регистрировать светоиндуцированный рельеф в реальном времени [7].

Полученные результаты в области светоиндуцированного массопереноса представляют интерес в прикладных задачах лазерной физики [8].

Преимуществом метода является бесконтактность и возможность регистрировать светоиндуцированный рельеф в реальном времени. Полученные результаты в области светоиндуцированного массопереноса представляют интерес в прикладных задачах лазерной физики.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Иванов В. И. Термоиндуцированные механизмы записи динамических голограмм. Владивосток: Дальнаука, 2006. 142 с.
2. Гущо Ю. П. Фазовая рельефография. М.: Радио. 1974. 168 с.
3. Брюханова Т. Н., Иванова Г. Д., Кузин А. А., Рекунова Н. Н. Пространственно-временные характеристики термооптической рельефографии//Фундаментальные исследования. 2015. № 8-2. С. 243-246.
4. Симаков С. Р., Иванов В. И. Рельефные динамические голограммы в тонкослойной среде с термоиндуцированным фазовым переходом// Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В. М. Самсонова, Н. Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016.№ 8. С. 354-358.
5. Иванов В. И., Илларионов А. И., Коростелева И. А. Обращение волнового фронта непрерывного излучения в условиях сильного самовоздействия //Письма в "Журнал технической физики". 1997. Т. 23. № 15. С. 60-63.
6. Иванов В. И., Ливашвили А. И., Брюханова Т. Н., Рекунова Н. Н. Пространственно-временные характеристики термоиндуцированного механизма записи рельефных динамических голограмм//Вестник Тихоокеанского государственного университета. 2011. № 1. С.065-068.
7. Иванов В.И., Симаков С.Р. Голографическая чувствительность наногетерогенной среды с размытым фазовым переходом//Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр./под общей редакцией В. М. Самсонова, Н. Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2015. Вып. 7. С. 216-219.
8. Иванов В. И., Иванова Г. Д., Хе В. К. Термолинзовая спектроскопия двухкомпонентных жидкофазных

сред // Вестник Тихоокеанского государственного университета. 2011. № 4. С. 39-44.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДРЕВЕСИНЫ КАК МАТЕРИАЛА, РАЗНОСОПРОТИВЛЯЮЩЕГОСЯ РАСТЯЖЕНИЮ-СЖАТИЮ

О. А. Одинокова[1], А. А. Доко[2]

[1]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
[2]ООО «МС ПРОЕКТ групп»
г. Хабаровск, e-mail: odi37@mail.ru

Исследование посвящено экспериментальному изучению свойств разносопротивления растяжению-сжатию строительного материала из древесины. В настоящей работе исследуются опытные образцы из сосны 2-го сорта на разное сопротивление растяжению-сжатию.

Древесина как строительный материал обладает сравнительно достаточными механическими свойствами, относительно небольшим удельным весом. Однако разное сопротивление материала растяжению-сжатию делает затруднительным применение существующих положений теории упругости, обоснованных на предположении изотропности материала.

1. Цель проведения исследования

В данной статье на основе эксперимента выявляется, что древесина, как естественный полимер, обладает свойствами ползучести и разномодульности при растяжении и сжатии.

2. Краткие теоретические обоснования

Для выявления пределов напряжений были выполнены испытания опытных образцов на разрушающее напряжение при растяжении и сжатии.

2.1. Испытание опытных образцов на растяжение

Для испытания на растяжение было принято 3 образца, схема нагружения представлена на рис. 1.

Полученные результаты эксперимента, а также требуемые расчеты приведены в табл. 1.

Разрушение древесины при растяжении начинается со скольжения мицелия и заканчивается разрывом волокон. Разрыв древесины происходит при малых деформациях (менее 1%) и носит хрупкий характер.

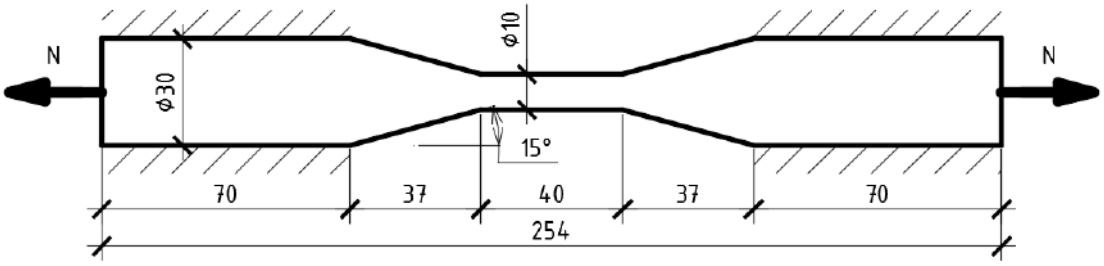


Рис. 1. Схема приложения нагрузки на растягиваемый образец

Таблица 1

Обработка полученных результатов эксперимента на растяжение

№ п/п	Разрушающая нагрузка N, кг	Площадь поперечного сечения образца: $A=\pi\cdot r^2$, см^2	Разрушающее напряжение: $\sigma_p=\frac{N}{A}$, МПа	Напряжение, с учетом коэффициента запаса k=1,4:	Усредненное значение напряжения: $\sigma=\frac{\sigma_p}{[K]}$, МПа
1	880	0,785	112,1	80,08	88,56
2	1000		127,38	90,98	

© Одинокова О. А., Доко А. А., 2018

3	1040		132,48	94,62	

2.2. Испытание опытных образцов на сжатие

Для испытания на сжатие было принято 3 образца, схема нагружения представлена на рис. 2.

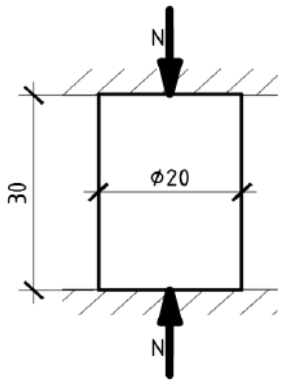


Рис. 2. Схема приложения нагрузки на сжимаемый образец

Полученные результаты эксперимента, а также требуемые расчеты приведены в табл. 2

Таблица 2

Обработка полученных результатов эксперимента

№ п/п	Разрушающая нагрузка N, кг	Площадь поперечного сечения образца: $A=\pi\cdot r^2$, см^2	Разрушающее напряжение: $\sigma=\frac{N}{A}$, МПа	Напряжение, с учетом коэффициента запаса k=1,4:	Усредненное значение напряжения: $\sigma=\frac{\sigma_p}{[K]}$, МПа
1	2200	3,14	70,06	59,04	**47,01**
2	2100		66,88	47,77	
3	1900		60,51	43,22	

При сжатии вдоль волокон образец разрушается от потери устойчивости отдельными наиболее прочными, а потому и наиболее нагруженными волокнами с изгибом их на небольшой длине в сторону более мягких соседних слоев древесины.

3. Испытание образцов на ползучесть

Эксперимент проводится для выявления изменчивости материала во времени. Испытываемый образец подвергается постоянному напряжению, деформации замерялись во времени в течение 8 минут. Для исследования ползучести был выбран материал сосна 2-го сорта.

Исследование проводилось на растяжной машине настольного типа с использованием реверсора, который позволяет проводить исследование одного и того же образца при переходе с режима растяжения на режим сжатия, без переустановки образца и измерительной аппаратуры [2].

На рис. 3 представлен испытываемый образец.

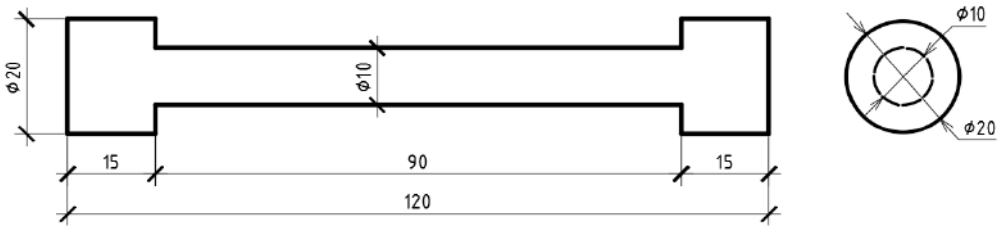


Рис. 3. Испытываемый образец

3.1. Растяжение - сжатие образца нагрузкой 100 кг ($\sigma = 12,74$ МПа)

Результаты исследования приведены в табл. 3.

Таблица 3

Результаты исследования образца нагрузкой 100 кг

Время исп.	0	15''	30''	1'	2'	4'	8'
Растяжение	1,0	1,1	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2
Δl^+		**+0,1**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**
Сжатие	1,1	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
Δl^-		**-0,1**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**

3.2. Растяжение - сжатие образца нагрузкой 200 кг ($\sigma = 25,48$ МПа)

Результаты исследования приведены в табл. 4

Таблица 4

Результаты исследования образца нагрузкой 200 кг

Время исп.	0	15''	30''	1'	2'	4'	8'
Растяжение	1,0	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3
Δl^+		**+0,3**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**
Сжатие	0,8	0,7	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
Δl^-		**-0,1**	**-0,1**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**

3.3. Растяжение сжатие образца нагрузкой 600 кг ($\sigma = 76,4$ МПа)

Результаты исследования приведены в табл. 5

Таблица 5

Результаты исследования образца нагрузкой 200 кг

Время исп.	0	15''	30''	1'	2'	4'	8'
Растяжение	2,1	2,8	2,8	2,8	2,8	2,8	2,8
Δl^+		**+0,7**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**
Сжатие	1,0	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
Δl^-		**-0,4**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**	**0,0**

На рис. 4 представлена диаграмма работы древесины вдоль волокон при растяжении и сжатии, которая наглядно показывает, что древесина, не обладая в указанных пределах напряжений ползучестью, имеет разное сопротивление при растяжении-сжатии вдоль волокон.

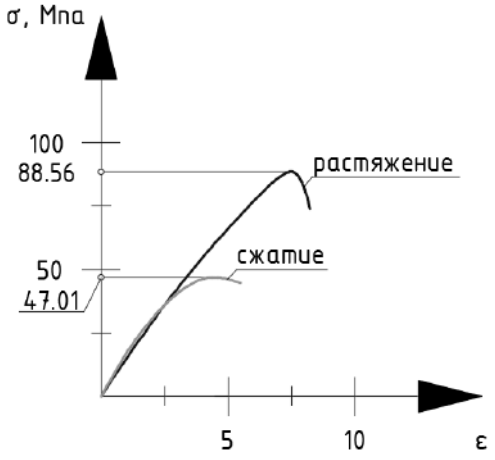


Рис. 4. Диаграмма работы древесины вдоль волокон

Заключение. По итогам проведенных опытов выяснилось, что при воздействии различных напряжений в установленных пределах древесина не обладает ползучестью, хотя проявляет в значительной степени свойство различно сопротивляться растяжению и сжатию.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. СП 64.133330.2011. Деревянные конструкции актулизированная редакция СНиП II-25-80. М., 2011. 92 с.
2. А.с. 35651. СССР, МКИ601№3/02 Универсальный реверсор для испытаний на растяжение-сжатие/О.А. Одинокова, В.В. Одиноков, П.В. Меленьтьев (СССР). 1972, Блок №32.3с

АНАЛИЗ ОПТИЧЕСКОЙ ОДНОРОДНОСТИ КРИСТАЛЛОВ $LiNbO_3$:Zn (4.5 МОЛЬ. %) С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛАЗЕРНОГО КОНОСКОПИЧЕСКОГО МЕТОДА

О. Ю. Пикуль[1], Н. В. Сидоров[2], Н. А. Теплякова[2], М. Н. Палатников[2]

[1]ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения», г. Хабаровск
[2] ФГБУН «Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева» ФИЦ «Кольский научный центр РАН» (ИХТРЭМС КНЦ РАН)
г. Апатиты, e-mail: pikoul2008@gmail.com

Методом лазерной коноскопии исследована оптическая однородность монокристалла $LiNbO_3$:Zn(4.5 моль. %). Изменения в коноскопических картинах кристалла, связанные с локальными изменениями его упругих характеристик и появлением механических напряжений, позволяют оценить аномальную оптическую двуосность кристаллического образца..

Нелинейно-оптические монокристаллы ниобата лития $LiNbO_3$, имеющие максимально низкие значения эффекта фоторефракции и коэрцитивного поля, особенно востребованы и актуальны в качестве оптических материалов для преобразования излучения. Наиболее сильное снижение фоторефракции и коэрцитивного поля в кристалле $LiNbO_3$ происходит скачком, при превышении «пороговых» значений концентраций «нефоторефрактивных» легирующих добавок Zn, Mg, Gd и др. [1]. При этом в области концентрационных порогов наблюдаются явно выраженные аномалии структуры и многих физических параметров кристалла. Для кристалла $LiNbO_3$:Zn характерны два концентрационных порога: при ~ 4.0 мол. % ZnO и ~ 7,0 мол. % ZnO в расплаве [1]. Однако при содержании цинка в расплаве > 7,0 мол. % ZnO (выше второго концентрационного порога) кристаллы $LiNbO_3$:Zn имеют низкое оптическое качество, являются композиционно неоднородными и, как правило, двухфазными. В тоже время монокристаллы $LiNbO_3$ с содержанием ZnO между пороговыми значениями ~ 4,0 и ~ 7,0 мол. % ZnO в расплаве являются композиционно и оптически однородными. Важно отметить и то, что заметное снижение эффекта фоторефракции в кристалле $LiNbO_3$:Zn происходит уже после первого концентрационного порога. В этой связи для решения технологических задач создания оптически и структурно совершенных нелинейно-оптических материалов с низкими значениями эффекта фоторефракции и коэрцитивного поля представляет интерес исследование структуры и оптических свойств монокристаллов LiNbO3:Zn (4.5 моль. %) с концентрацией легирующей добавки между пороговыми значениями.

Коноскопический анализ [2] кристалла LiNbO3:Zn (4.5 мол. %) обнаружил интересную особенность (рис. 1.) Уже при плотности мощности 0.039 Вт/см^2 коноскопическая картина имеет признаки явно выраженной аномальной оптической двуосности: наблюдается деформация в центре черного «мальтийского креста» в виде вертикального смещения от центра фрагментов креста, что соответствует направлению деформации оптической индикатрисы кристалла, рис. 1, (а). Существует просветление в центральной части черного «мальтийского креста», а углы между его ветвями отличны от 90º. Расстояние b между выходами наведенных осей на коноскопической картине (рис. 1, а) позволяет оценить значение угла аномальной двуосности

© Пикуль О. Ю., Сидоров Н. В., Теплякова Н. А., Палатников М. Н., 2018

[3] 2V~22-25´, что соответствует аномальному двулучепреломлению [3] $\Delta n_a \sim 0{,}1 \cdot 10^{-5}$. При этом изохромы сохраняют целостность и правильную геометрическую форму, но вытянуты в направлении смещения фрагментов креста и приобретают форму эллипсов. Кроме того, в области всех ветвей «мальтийского креста» имеются видимые аномалии.

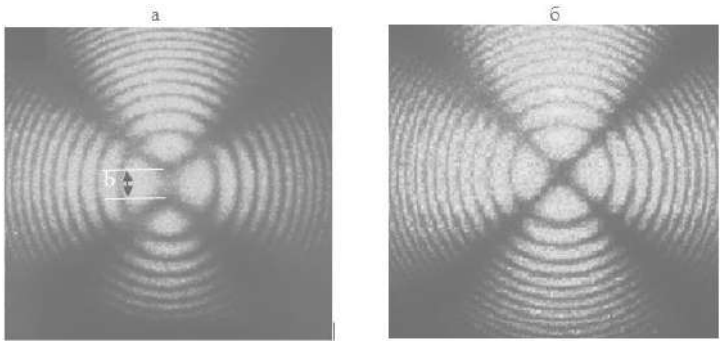


Рис. 1. Коноскопические картины кристаллов $LiNbO_3:Zn^{2+}$ (4.5 мол. %) λ = 532 нм:
а – плотность мощности P = 0.039 Вт/см^2; б – P = 3.54 Вт/см^2

Подобные искажения коноскопической картины, несомненно, связаны со структурной неоднородностью кристалла, вероятно, вследствие неравномерного вхождения (при столь высокой концентрации) катионов Zn^{2+} в структуру в процессе роста кристалла. Этот вывод подтверждается данными исследований фотоиндуцированного рассеяния света (ФИРС) и комбинационного рассеяния света (КРС). Для кристалла $LiNbO_3$:Zn (4.5 мол. %) была обнаружена гораздо большая рассеивающая способность по сравнению с другими кристаллами $LiNbO_3$:Zn, а в спектрах КРС обнаружено проявление уширения линий, соответствующих как внутренним колебаниям кислородных октаэдров O_6, так и колебаниям катионов Nb^{5+} и Li^+ в октаэдрах O_6.

Необычно и то, что при увеличении плотности мощности наоборот наблюдается стандартная коноскопическая картина одноосного кристалла высокого оптического качества, рис. 1, (б), существенно лучшая, чем при меньшей плотности мощности. Наблюдается круговая симметрия, черный контрастный «мальтийский крест» сохраняет целостность в центре поля зрения, а изохромы представляют собой концентрические окружности с центром в точке выхода оптической оси. Лишь в области левой верхней ветви «мальтийского креста» имеется незначительное снижение контраста изображения. Такое улучшение оптического качества кристалла может быть вызвано «залечиванием» дефектов лазерным излучением при увеличении его мощности. При этом не обнаружено изменений в коноскопической картине кристалла LiNbO3:Zn(4.5 мол. %), обусловленных фоторефрактивным эффектом. Это хорошо коррелирует с данными ФИРС, согласно которым в кристалле $LiNbO_3$:Zn (4.5 мол. %) фоторефрактивный отклик отсутствует даже при мощности лазерного излучения в 160 мВт.

На рис. 2 представлены коноскопические картины кристалла $LiNbO_3$:Zn (4.5 мол. %) после процесса монодоменизации (отжига в закороченном состоянии). Коноскопическая картина, полученная при малой плотности мощности лазерного излучения, рис. 2 (а), значительно отличается от коноскопической картины кристалла $LiNbO_3:Zn^{2+}$(4.5 мол. %) до отжига, рис. 1 (а). А именно: коноскопическая картина кристалла $LiNbO_3:Zn^{2+}$(4.5 мол. %) после отжига отличается большей резкостью и в целом имеет вид, характерный для одноосных кристаллов. Изохромы (линии одинакового фазового сдвига) имеют вид концентрических окружностей с центром в точке выхода оптической оси, а «мальтийский крест» сохраняет минимальную интенсивность в пределах всего поля зрения. Имеется незначительное вытягивание «мальтийского» креста в вертикальном направлении, однако признаков аномальной оптической двуосности, как это наблюдалось для кристалла $LiNbO_3:Zn^{2+}$(4.5 мол. %) до отжига не обнаружено. При увеличении плотности мощности лазерного излучения до 3.54 Вт/см2 также получена практически стандартная коноскопическая картина одноосного кристалла, рис. 2, (б). Таким образом, кристалл $LiNbO_3:Zn^{2+}$(4.5 мол. %) после отжига оптически однороден и имеет хорошее оптическое качество.

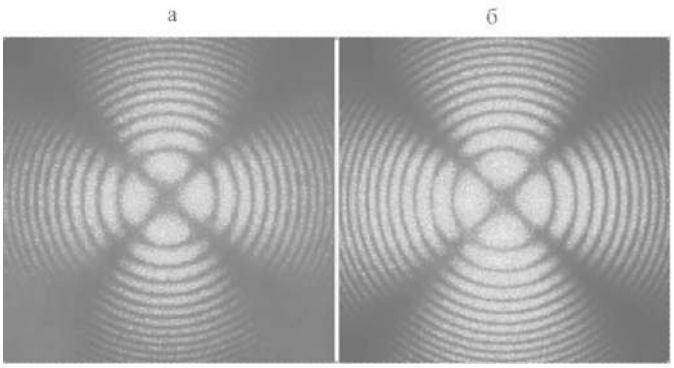


Рис. 2. Коноскопические картины кристаллов $LiNbO_3:Zn^{2+}$ (4.5 мол. %) после процесса монодоменизации λ = 532 нм. а – плотность мощности P = 0.039 Вт/см^2; б - P = 3.54 Вт/см^2

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Сидоров Н. В., Волк Т. Р., Маврин Б. Н., Калинников В. Т. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны. М.: Наука, 2003. 255 с.
2. Пикуль О.Ю. Особенности оптической системы для создания коноскопических фигур больших размеров / О. Ю. Пикуль, [и др.] // ИВУЗ. Приборостроение. 2004. № 12. С. 53-55.
3. Штукенберг А. Г., Пунин Ю. О. Оптические аномалии в кристаллах. СПб.: Наука, 2004. 263 с.

ФОРМИРОВАНИЕ ПОКРЫТИЙ НОВЫМ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОИСКРОВОГО ОСАЖДЕНИЯ ИЗ ГРАНУЛ АЛЮМИНИДА ТИТАНА С МОДИФИЦИРУЮЩИМИ ДОБАВКАМИ

С. А. Пячин, Т. Б. Ершова, А. А. Бурков, Н. М. Власова, И. А. Астапов, Е. А. Кириченко, М. А. Кулик

ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВО РАН
г. Хабаровск, e-mail: pyachin@mail.ru

В работе исследованы свойства интерметаллидных покрытий, сформированных на титановом сплаве Ti6Al4V новым методом электроискрового осаждения с использованием гранул Ti_3Al и Ti_3Al+15%SiC в качестве анодного легирующего материала вместо электрода-стержня. Показано, что осажденные слои содержат алюминиды титана, карбид титана TiC, силицид Ti_5Si_3, которые обеспечивают высокие показатели микротвердости, износостойкости и жаростойкости по сравнению с титановой подложкой.

Введение. Титановые сплавы находят все более широкое применение в различных отраслях современного производства, таких как аэрокосмическая, автомобильная, химическая промышленность, судостроение и др. Тем не менее, изделия из титановых сплавов имеют ряд недостатков, к которым можно отнести склонность к контактному схватыванию при трении, сравнительно низкая жаростойкость и охрупчивание при высоких температурах. Для их устранения разрабатываются методы модифицирования титана путем введения легирующих добавок и осаждения упрочняющих и защитных покрытий. К перспективным материалам для нанесения покрытий на титановые сплавы можно отнести интерметаллиды – алюминиды титана, обладающие уникальными свойствами, такими как высокая температура плавления, низкая плотность, высокий модуль упругости, жаропрочность, стойкость к окислению и возгоранию [1]. В настоящее время для получения покрытий из алюминидов титана применяют различные методы осаждения: магнетронное распыление, вакуумно-дуговое осаждение,

© Пячин С. А., Ершова Т. Б., Бурков А. А., Власова Н. М., Астапов И. А., Кириченко Е. А., Кулик М. А., 2018

ионную имплантацию, газо-плазменное напыление, лазерную наплавку, электронно-лучевую наплавку и др. Часто в интерметаллидные сплавы вводят легкие элементы C, B, Si, которые благодаря образованию тройных соединений сложных силицидов, карбидов, боридов и дисперсного упрочнения повышают жаростойкость, кратковременную и длительную прочность композиции, твердость, износоустойчивость. В данной работе для создания покрытий на основе алюминидов титана применена технология электроискрового легирования (ЭИЛ), основанная на переносе металлов с анода на катод при воздействии электрических разрядов и обладающая рядом преимуществ, к которым можно отнести простоту осуществления технологической операции осаждения металлов в газовой среде, однородность по составу поверхностного слоя и высокую адгезию покрытия с подложкой [2]. Одним из новых направлений в области ЭИЛ является электроискровое легирование в среде гранул с использованием крупных (диаметром до 10 мм) частиц из проводящих материалов, которые служат источником вещества для нанесения покрытий [3]. Новая схема нанесения электроискровых покрытий позволяет повысить однородность осаждаемого слоя и сократить время на электроискровое легирование поверхности обрабатываемой детали за счет увеличения числа контактов гранул с подложкой [4]. Использование гранул из композиционных материалов на основе алюминида Ti_3Al с модифицирующими добавками должно способствовать улучшение свойств покрытий на титановых сплавах. Целью работы являлось установление влияния состава гранул - легирующих материалов на структуру, состав и свойства электроискровых интерметаллидных покрытий для получения модифицированных поверхностных слоев на титановом сплаве Ti6Al4V с заданными свойствами.

Получение материалов и методы исследования. Алюминид титана Ti_3Al был получен путем смешивания порошков технического титана и алюминиевой пудры, взятых в мольных долях 3:1, в шаровой мельнице РМ 400 в течение 4 часов и последующего спекания при температуре 1400°С в течение 3 часов в вакууме 1,3 Па. Кроме того, к смеси порошков Ti и Al были отдельно добавлены порошки SiC в количестве 15 масс.%. Данные порошковые смеси спекали при тех же самых условиях, что и Ti_3Al. Интерметаллидные сплавы были изготовлены в форме брусков, которые затем разрезали на гранулы с размерами 3–5 мм.

Поверхностный слой осаждали на образцы из сплава Ti6Al4V в форме цилиндров диаметром 12 мм и высотой 10 мм. Для нанесения покрытий использована установка, содержащая стальной контейнер, соединенным ременной передачей с электромотором, и генератор разрядных импульсов. Внутри контейнера закреплялся образец-подложка, на поверхность которого необходимо было нанести покрытие, а оставшееся пространство заполняли гранулами. Положительный потенциал от генератора импульсов подавался на контейнер, а отрицательный – на подложку. Во время прохождения разрядов контейнер вращался со скоростью 60 об/мин, катод-подложка – с аналогичной скоростью в обратном направлении. Частота следования разрядных импульсов составляла 1 кГц, а длительность разрядов – 0,1 мс. Амплитуда импульсов тока была 110±10 А; межэлектродное напряжение – 30±5 В. Внутрь рабочего объема контейнера с гранулами подавали аргон для предотвращения окисления металлов во время электроискровой обработки.

Количество вещества, перенесенного с гранул на катод, контролировали посредством взвешивания образцов через каждую минуту электроискровой обработки на весах Vibra HT с точностью 10^{-4} г. Фазовый состав полученных покрытий изучали с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-7 в Cu-Kα излучении. Для идентификации линий рентгенограмм применен программный пакет PDWin (НПП «Буревестник»). Твердость образцов измеряли с поверхности покрытий на микротвердомере ПМТ-3М с нагрузкой 0,5 Н. Стойкость полученных образцов к высокотемпературной газовой коррозии исследована на термическом анализаторе Netzsch STA 449 F3 посредством нагрева и изотермической выдержки образцов при 900°С в воздушной среде. Износостойкость покрытий изучена в соответствии со стандартом ASTM G99-04, т.е. в режиме скольжения с использованием дисков из быстрорежущей стали Р6М5 в качестве контртела Диск вращался со скоростью 12 м/с. На испытуемый образец оказывалось нагрузка 25 Н.

Результаты и обсуждение. В процессе электроискрового легирования масса катодов увеличивалась (рис. 1), что объясняется интенсивным разрушением материала гранул под дей-

ствием электрических разрядов и переносом его на катод. При осаждении сплава Ti_3Al с добавкой SiC привес титанового катода был меньше почти в 2 раза, чем при нанесении интерметаллида Ti_3Al без добавки. Рентгеновские дифрактограммы электродных материалов и соответствующих им покрытий показаны на рис. 2.

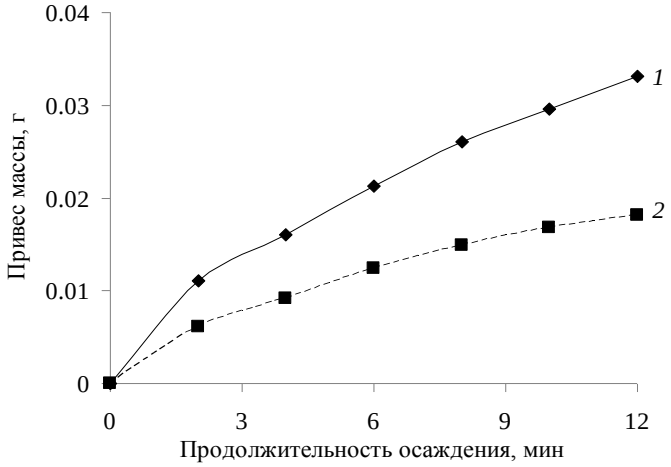


Рис. 1. Изменения массы подложки из сплава во время нанесения электроискровых покрытий:
1 – Ti_3Al; *2* – Ti_3Al-15%TiC

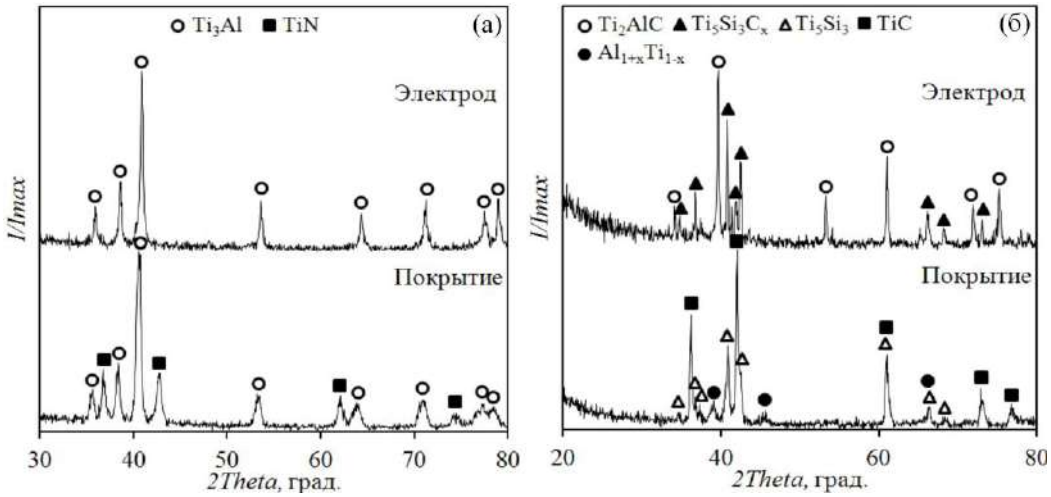


Рис. 2. Рентгеновские дифрактограммы гранул и соответствующих электроискровых покрытий:
а) Ti_3Al; б) Ti_3Al+15%TiC

Согласно результатам дифракционного анализа, при осаждении чистого интерметаллида Ti_3Al состав формируемого поверхностного слоя практически совпадает с исходным электродным материалом, с той лишь разницей, что дополнительно образуется нитрид титана TiN. Гранулы, полученные спеканием порошков Ti, Al и SiC, содержат сложные карбиды Ti_2AlC и $Ti_5Si_3C_x$. При переносе вещества с поверхности данных гранул на титановый сплава формируется покрытие уже другого состава. Основу его составляет карбид титана TiC, силицид Ti_5Si_3, и алюминид титана переменой стехиометрии $Ti_{1+x}Al_{1-x}$. Объяснением наблюдаемых фактов служит то, что при нанесении электроискровых покрытий происходят фазово-структурные превращения вследствие высоких температур в области воздействия разрядов и взаимодействия с титаном подложки.

Результаты испытания на жаростойкость показали, что скорость окисления сплава Ti6Al4V уменьшается в 1,9 и 2,3 раза, если на него нанести покрытие из чистого алюминида титана Ti_3Al и Ti_3Al с добавкой SiC, соответсвенно (рис. 3а). Установлено также, что за счет интерметаллидных покрытий потери массы титанового сплава на изнашивание при сухом

трении снижаются значительно, более, чем в 19 раз (рис. 3б). Покрытие из алюминида Ti_3Al с 15 масс.% добавкой карбида титана по износостойкости обладает преимуществом по сравнению с покрытием без добавки, поскольку скорость его износа в два раза ниже. Аналогичная тенденция прослеживается при измерении микротвердости осажденных слоев. Микротвердость Ti_3Al-покрытия составляет 9,5±1,9 ГПа, а Ti_3Al+15%SiC-покрытия – 14,5±2 ГПа, что примерно в 4 раза выше, чем микротвердость титанового сплава Ti6Al4V (3,8±0,5 ГПа).

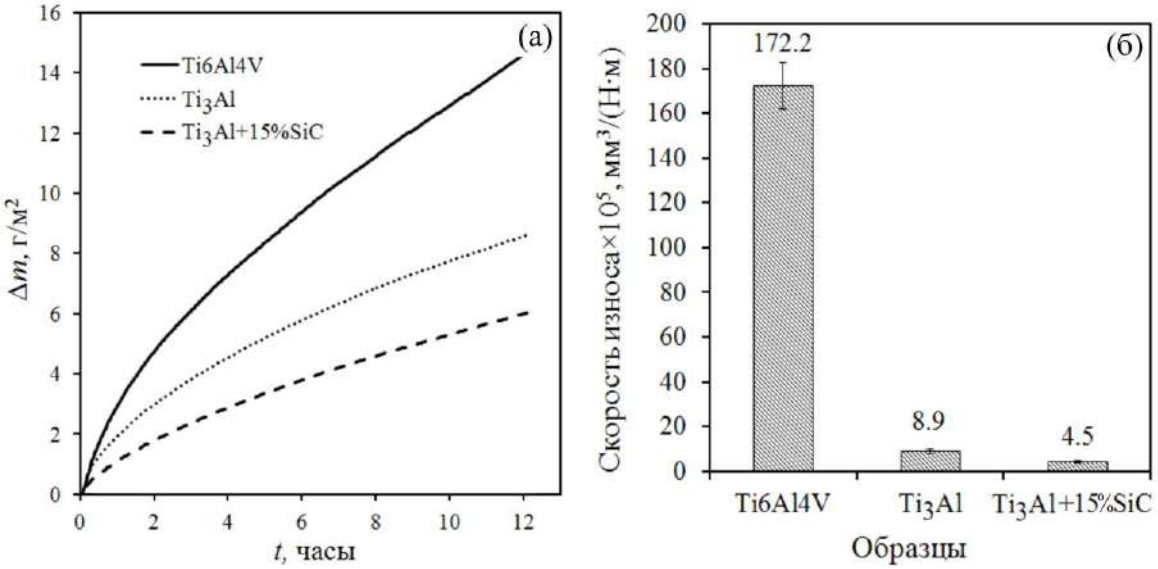


Рис. 3. Результаты испытания на (а) жаростойкость и (б) износостойкость электроискровых покрытий Ti_3Al и Ti_3Al+15%TiC по сравнению с материалом подложки

Выводы. Методом порошковой металлургии получены гранулы интерметаллида Ti_3Al и Ti_3Al с 15% добавками карбида кремния. С использованием этих материалов в качестве легирующих материалов и новой технологии осаждения получены электроискровые покрытия на титановом сплаве Ti6Al4V в среде аргона, которые обладают более высокой жаростойкостью (примерно в 2 раза), микротвердостью (примерно в 4 раза) и износостойкостью (более чем в 19 раз) по сравнению с титановой подложкой. Улучшение этих характеристик объясняется образованием в осажденном слое соединений с повышенной прочностью - карбида титана TiC и силицида Ti_5Si_3.

Работа поддержана Правительством Хабаровского края (*договор 2018 г.*).

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Wu X. Review of alloy and process development of TiAl alloys // Intermetallics. 2006. V. 14. P. 1114-1122.
2. Пячин С. А., Бурков А. А., Комарова В.С. Формирование и исследование электроискровых покрытий на основе алюминидов титана // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2013. № 6. С. 16-24.
3. Burkov A. A., Pyachin S. A. Formation of WC-Co coating by a novel technique of electrospark granules deposition // Materials and Design. 2015. V. 80. P. 109-115.
4. Бурков А. А., Пячин С. А. Способ электроискрового нанесения покрытия свободными электродами-гранулами // Патент на изобретение № 2650665 // Официальный бюллетень: Изобретения. Полезные модели. 2018. № 11.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ НИОБАТА ЛИТИЯ

Н. В. Сидоров[1], М. Н. Палатников[1], Н. А. Теплякова[1], А. В. Сюй[2]

[1]ФГБУН «Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева» Кольского научного центра РАН, г. Апатиты
[2]ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщений», г. Хабаровск
e-mail: alsyuy271@gmail.com

По спектрам оптического поглощения определена ширина запрещенной зоны для серии образцов ниобата лития номинально чистых конгруэнтных и стехиометрических ($LiNbO_{3конг}$ и $LiNbO_{3стех}$), а также серии конгруэнтных кристаллов, легированных различными катионами Mg^{2+}(0.35 вес. %), Zn^{2+}(2.05), B^{3+}(0.12), Gd^{3+}(0.26, 0.44, 0.51), Y^{3+}(0.46), Gd^{3+}(0.23):Mg^{2+}(0.75), Mg^{2+}(0.86):Fe^{3+}(0.0036), Ta^{5+}(1.13):Mg^{2+}(0.01), Y^{3+}(0.24):Mg^{2+}(0.63), Er^{3+}(3.1).

В настоящее время активно развиваются устройства, работающие в оптическом диапазоне (оптические переключатели, модуляторы и т.д.), в которых используются нелинейно-оптические кристаллы. Сегнетоэлектрический кристалл ниобата лития ($LiNbO_3$), обладает высокими электрооптическими, пироэлектрическими, нелинейно-оптическими и пьезоэлектрическими коэффициентами [1]. Уникальные свойства кристалла $LiNbO_3$ определяются его составом и особенностями глубоко дефектной структуры, существенно зависящей от состава [2]. Кристалл $LiNbO_3$ – материал с широко развитой вторичной структурой [3]. Кроме того, ниобат лития является фазой переменного состава, что позволяет путем легирования и изменения стехиометрии как кардинально изменять свойства, так и тонко варьировать физическими характеристиками кристалла. При этом количество дефектов Nb_{Li} и мелких ловушек электронов зависит от состава кристалла [2]. В номинально чистых кристаллах с увеличением отношения R = Li/Nb количество глубоких электронных ловушек (дефектов Nb_{Li}) уменьшается, но одновременно увеличивается количество дефектов в виде мелких ловушек электронов [2]. В зависимости от состава величина эффекта фоторефракции, фото- и электропроводимость в кристалле $LiNbO_3$ изменяются в широких пределах [2, 4, 5]. При этом должно происходить изменение ширины запрещенной зоны, которая для номинально чистого конгруэнтного кристалла, составляет 3.72 эВ, что близко к значению, характерному для широкозонных полупроводников [6]. Уменьшая ширину запрещенной зоны, можно приблизить свойства кристалла $LiNbO_3$ к полупроводниковым, что позволяет в принципе разрабатывать материалы с кросс-эффектами.

Целью данной работы являются комплексные исследования поведения ширины запрещенной зоны, фоторефрактивных и электропроводящих свойств в зависимости от состава, структурных особенностей и состояния дефектности кристаллов $LiNbO_3$, полученных как по единой, так и по разным технологиям выращивания.

В табл. 1 приведены результаты расчета ширины запрещенной зоны по спектрам поглощения кристаллов $LiNbO_3$ разного состава, значения фотоэлектрических полей (фотовольтаического E_{PV} и диффузионного E_D). Характерным является то, что в ряду исследованных кристаллов фотоэлектрические поля и эффект фоторефракции (наведенное двулучепреломление) минимальны для кристаллов $LiNbO_3$:Er (3.1 вес.%), $LiNbO_3$:Gd (0.23 вес.%):Mg (0.75), $LiNbO_3$:Y (0.46 вес.%), $LiNbO_{3стех}$ и максимальны для кристаллов $LiNbO_3$:Mg (0.35 вес.%). Следует отметить, что фотоэлектрические поля и величина наведенного двулучепреломления определялись с учетом геометрических размеров кристаллов, их ориентации в оптической схеме и при одинаковом значении угла рассеянного излучения ~ 6° в виду того, что большинство исследуемых кристаллов обладают явно пониженным эффектом фоторефракции и наибольший угол фотоиндуцированного рассеяния света (ФИРС) едва ли достигает 15°. Только в кристалле $LiNbO_{3стех}$ угол ФИРС достигает 56°, при этом максимальное фотовольтаическое поле ~ 7,5 кВ/см.

Из полученных данных видно, что ширина запрещенной зоны для исследованных кристаллов находится в диапазоне 3.25÷3.84 эВ. Наименьшую ширину запрещенной зоны имеют кристаллы $LiNbO_3$:B(0.12 вес. %), $LiNbO_3$:Gd(0.26), а также кристаллы с двойным легированием

© Сидоров Н. В., Палатников М. Н., Теплякова Н. А., Сюй А. В., 2018

$LiNbO_3$:Fe(0.0036):Mg(0.86), $LiNbO_3$:Ta(1.13):Mg(0.011), табл. 1. Наибольшую ширину - кристаллы $LiNbO_3$:Gd(0.23 вес. %):Mg(0.75) и $LiNbO_3$:Zn(2.05), табл. 1. В конгруэнтном кристалле ширина запрещенной зоны близка к максимальной (3.72 эВ). При этом электрическая проводимость конгруэнтного кристалла составляет $\approx 10^{-16}$-10^{-15} $(Ом \cdot см)^{-1}$ [7], причем проводимость в направлениях вдоль полярной оси Z существенно ниже проводимости перпендикулярно оси [8]. Стехиометрический кристалл, согласно нашим данным, характеризуется средним значением ширины запрещенной зоны (3.48 эВ). Данных по электрической проводимости стехиометрического кристалла нами не обнаружено. Таким образом, состав кристалла ниобата лития, влияющий на особенности его вторичной структуры, существенно влияет на ширину запрещенной зоны, значения электропроводности и фотоэлектрических полей. Необходимо отметить, что для слабо окрашенных кристаллов $LiNbO_3$:Fe(0.0036 вес. %):Mg(0.86) и $LiNbO_3$:Er(3.1) на край поглощения способны влиять полосы поглощения легирующего элемента [9]. И чем ближе соответствующие полосы поглощения к краю фундаментального поглощения, тем сильнее это влияние.

Таким образом, для исследованных кристаллов наблюдается корреляция в значениях ширины запрещенной зоны, величины фотоэлектрических полей, величин и временной зависимости параметров ФИРС и спектров КРС, табл. 1. За эффект фоторефракции в кристалле $LiNbO_3$ ответственны дефекты с локализованными на них электронами. Основными такими дефектами в номинально чистом кристалле являются катионы Nb^{5+}, расположенные в позициях катионов Li^+ идеальной структуры (Nb_{Li}) и дефекты в виде мелких ловушек электронов [2, 3]. Причем, чем больше величина R = Li/Nb, тем меньше в кристалле дефектов Nb_{Li}, но тем больше дефектов в виде мелких ловушек электронов [2, 3]. Из полученных данных видно также, что чем большие фотоэлектрические поля создаются в кристалле, тем больше эффект фоторефракции, тем больше индикатриса ФИРС. При этом, соответственно, увеличивается наведенное двулучепреломление.

Таблица 1

Фотоэлектрические параметры ФИРС и ширина запрещенной зоны кристаллов ниобата лития при t = 25 °C

№ п/п	Кристалл	$\lambda_к$, нм	ΔE_g, эВ	λ = 532 нм, I ~ 6,29 Вт/см^2		
				E_{pv}, В/см	E_D, В/см	$\Delta n*10^{-5}$
1.	*$LiNbO_3$:Gd (0.23 вес.%):Mg (0.75)	323.8	3.84±0.012	3800	745	5,3
2.	*$LiNbO_3$:Zn (2.05 вес.%)	323.0	3.83±0.012	4770	75	5,6
3.	*$LiNbO_{3конг}$	334.2	3.72±0.011	5620	104	6,7
4.	*$LiNbO_3$:Er (3.1 вес.%)	335.2	3.71±0.011	4400	81	5,2
5.	*$LiNbO_3$:Mg (0.35 вес.%)	341.0	3.65±0.011	7405	295	9,0
6.	$LiNbO_3$:Y (0.24 вес.%):Mg (0.63)	342.2	3.63±0.011	5440	98	6,5
7.	$LiNbO_3$:Y (0.46 вес.%)	346.4	3.59±0.01	4340	237	5,3
8.	$LiNbO_{3стех}$	360.0	3.48±0.01	3178	1360	5,3
9.	$LiNbO_3$:B (0.12 вес.%)	380.0	3.27±0.009	5374	99	6,4
10.	*$LiNbO_3$:Gd (0.26 вес.%)	380.0	3.27±0.009	-	-	-
11.	*$LiNbO_3$:Fe(0.0036 вес.%):Mg(0.86)	382.4	3.25±0.009	4655	127	5,6
12.	$LiNbO_3$:Ta(1.13 вес.%):Mg(0.01)	380.0	3.27±0.009	6052	115	7,1

*Для указанных кристаллов индикатриса ФИРС не развивается при I ~ 6,29 Вт/см^2.

Для кристаллов $LiNbO_{3конгр}$, $LiNbO_3$:Gd(0.51 вес. %), $LiNbO_3$:Mg(0.35), $LiNbO_3$:Gd(0.23):Mg(0.75), $LiNbO_3$:Zn(2.05) даже при сравнительно высокой интенсивности возбуждающего излучения (I ~ 6.29 Вт/см^2) фоторефрактивный отклик отсутствует, индика-

триса ФИРС не раскрывается, а наблюдается только круговое рассеяние на статических структурных дефектах. Картина рассеяния не изменяется во времени и сохраняет форму близкую к кругу на протяжении всего эксперимента. В тоже время для кристаллов $LiNbO_{3стех}$, $LiNbO_3$:B(0.12 вес. %), $LiNbO_3$:Ta(1.13):Mg(0.011), $LiNbO_3$:Y(0.46), $LiNbO_3$:Y(0.24):Mg(0.63) характерен фоторефрактивный отклик, табл. 1, и наблюдается раскрытие индикатрисы ФИРС с появлением ярко выраженной трехслойной спекл-структуры, которая существенно видоизменялась с течением времени. При этом происходит перекачка энергии из центральной области картины ФИРС (область падения лазерного луча) в рассеянное излучение. Причем для кристаллов $LiNbO_{3стех}$, $LiNbO_3$:B(0.12 вес. %), $LiNbO_3$:Ta(1.13):Mg(0.011) картины ФИРС раскрываются в течение ~ 60 с, и они из округлой формы (первые секунды возбуждения) со временем трансформируется сначала в овальную («кометообразную») форму, а затем приобретают вид асимметричной «восьмерки», ориентированной вдоль полярной оси кристалла. В положительном направлении полярной оси, совпадающем с направлением вектора спонтанной поляризации, развивается больший «лепесток» восьмерки, а в отрицательном - меньший. Для этой группы кристаллов со временем характерно также постепенная перекачка энергии разных слоев картины ФИРС в направлении полярной оси кристалла. Для кристаллов $LiNbO_3$:Y(0.46 вес. %) и $LiNbO_3$:Y(0.24):Mg(0.63) раскрытие индикатрисы ФИРС происходит существенно быстрее по сравнению с остальными кристаллами - в течение первой секунды облучения кристалла лазерным излучением. Обращает на себя внимание то, что для кристаллов $LiNbO_{3стех}$, $LiNbO_3$:B(0.12 вес. %), $LiNbO_3$:Ta(1.13):Mg(0.011), $LiNbO_3$:Y(0.46), $LiNbO_3$:Y(0.24):Mg(0.63), отличающихся меньшей по сравнению с другими кристаллами шириной запрещенной зоны наблюдается наиболее сильный фоторефрактивный отклик и происходит наибольшее раскрытие индикатрисы ФИРС, табл. 1.

Согласно тензору КРС в спектре в геометрии рассеяния $Y(ZX)\overline{Y}$ должны присутствовать только линии, отвечающие колебаниям E(TO) типа симметрии [2]. Однако в спектрах КРС всех исследованных кристаллов, вследствие наличия эффекта фоторефракции, присутствует линия с частотой ~ 630 $см^{-1}$, соответствующая полносимметричным колебаниям кислородных октаэдров A_1-типа симметрии. Измеряя интенсивность «запрещенной» линии с частотой 630 $см^{-1}$ можно оценить величину фоторефрактивного эффекта [2]. В тоже время ширина этой линии, также как и ширина линии с частотой 576 см-1 (E(TO)), свидетельствует о степени искажения кислородных октаэдров O_6. Ширина линии с частотой ~ 630 $см^{-1}$ в спектре кристаллов $LiNbO_{3стех}$, $LiNbO_3$:B(0.12 вес. %), $LiNbO_3$:Y(0.46), $LiNbO_3$:Y(0.24):Mg(0.63), для которых наблюдалось раскрытие индикатрисы ФИРС, табл. 1, увеличивается, по сравнению шириной в спектре кристалла $LiNbO_{3конгр}$. Однако увеличение ширины происходит не пропорционально увеличению угла раскрытия индикатрисы ФИРС, табл. 1. Наибольший угол раскрытия индикатрисы ФИРС наблюдается для кристалла $LiNbO_{3стех}$, табл. 1, а наибольшая ширина линии с частотой ~ 630 $см^{-1}$ - для кристалла $LiNbO_3$:Y(0.46 вес. %). Кроме того, ширина этой линии в спектре КРС кристаллов $LiNbO_3$:Gd(0.44 вес. %) и $LiNbO_3$:Zn(2.05) больше, чем в спектре кристалла $LiNbO_{3стех}$. Такое происходит потому, что свои вклады в ширину линии с частотой ~ 630 $см^{-1}$ вносит не только эффект фоторефракции, но и зависящая от состава степень искажения кислородных октаэдров кристалла. На искажение кислородных октаэдров влияют, прежде всего, различия ионных радиусов легирующих катионов и ионов Li^+, Nb^{5+}, характер связей, образуемых катионами с ионами кислорода, а также особенности порядка в расположении основных и легирующих катионов и вакансий вдоль полярной оси.

Исследованы спектры поглощения, спектры КРС и картины ФИРС кристаллов $LiNbO_3$ конгруэнтного и стехиометрического составов, а также конгруэнтных кристаллов, легированных катионами: Mg^{2+}(0.35 вес. %), Zn^{2+}(2.05), B^{3+}(0.12), Gd^{3+}(0.26, 0.44, 0.51), Y^{3+}(0.46), Gd^{3+}(0.23):Mg^{2+}(0.75), Mg^{2+}(0.86):Fe^{3+}(0.0036), Ta^{5+}(1.13):Mg^{2+}(0.01), Y^{3+}(0.24):Mg^{2+}(0.63), Er^{3+}(3.1). Установлено, что положение и характер поведения края поглощения кристаллов ниобата лития зависит от вида легирующей примеси. По параметрам края поглощения рассчитана ширина запрещенной зоны кристаллов. Показано, что ширина запрещенной зоны зависит от состояния дефектной структуры кристаллов, определяющей величину эффекта фоторефракции. Меньшая ширина запрещенной зоны наблюдается у кристаллов $LiNbO_{3стех}$, $LiNbO_3$:B(0.12),

$LiNbO_3$:Ta(1.13):Mg(0.011), $LiNbO_3$:Y(0.46), $LiNbO_3$:Y(0.24):Mg(0.63). В этих кристаллах присутствует фоторефрактивный отклик и происходит раскрытие индикатрисы ФИРС при облучении лазерным излучением с частотой 476,5 нм и интенсивностью излучения $I \sim 8.49$ Вт/см^2. Причем в кристаллах $LiNbO_{3стех}$, $LiNbO_3$:Y(0.46 вес. %), $LiNbO_3$:Y(0.24):Mg(0.63) раскрытие индикатрисы ФИРС происходит очень быстро, в течение первой секунды облучения кристалла лазерным излучением. В спектрах КРС этих кристаллов обнаружено значительное уширение линий, соответствующих колебаниям катионов, расположенных в октаэдрических пустотах и колебаниям кислородных октаэдров A_1(TO) и E(TO) типа симметрии, свидетельствующее о повышенном разупорядочении структурных единиц кристалла.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Кузьминов Ю. С. Электрооптический и нелинейно-оптический кристалл ниобата лития. М.: Наука, 1987. 262 с.
2. Сидоров Н. В., Волк Т. Р., Маврин Б. Н., Калинников В. Т. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны, М.: Наука, 2003. 256 с.
3. Сидоров Н. В., Палатников М. Н., Калинников В. Т. Влияние вторичной структуры на оптические свойства сегнетоэлектрических кристаллов ниобата лития с низким эффектом фоторефракции // Труды Кольского научного центра РАН / Химия и материаловедение. 2015. С.464-468.
4. Yatsenko A. V., Yevdokimov S. V., Pritulenko A. S., Sugak D. Yu., Solskii I.M. Electrical properties of $LiNbO_3$ crystals reduced in a hydrogen atmosphere // Phys. Solid State. 2012. V. 54. P.2231-2235.
5. Weidenfelder A., Shi J., Fielitz P., Borchardt G., Becker K. D., Fritze H. Electrical and electromechanical properties of stoichiometric lithium niobate at high temperatures // Solid state ionics. 2012. V. 225. P.26-29.
6. Фридкин В. М. Сегнетоэлектрики-полупроводники. М.: Наука. 1976. 480с.
7. Ахмадуллин И.Ш., Голенищев-Кутузов В.А., Мигачев С.А., Миронов С.П. Низкотемпературная электропроводность кристаллов ниобата лития конгруэнтного состава // Физика твердого тела. 1998. Т.40. №7. С.1307-1309.
8. Канаев И. Ф., Малиновский В. К. Асимметрия проводимости вдоль оси поляризации в сегнетоэлектрических кристаллах // ДАН СССР. 1982. Т.266. №6. С.137-145.
9. Палатников М. Н., Бирюкова И. В., Щербина О. Б., Сидоров Н. В., Макарова О. В., Теплякова Н. А. Выращивание и концентрационные зависимости свойств кристаллов $LiNbO_3$:Er // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 6. С.999-1008.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ФОРМИРОВАНИЯ ПОЛЯРНЫХ НАНОДОМЕНОВ В ОДНООСНЫХ РЕЛАКСОРАХ $Sr_{1-x}Ba_xNb_2O_6$

А. В. Филимонов[1], С. Б. Вахрушев[1,2], Г. А. Политова[3], Ravi Kumar[4]

[1]ФГБУН «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», Санкт-Петербург
[2]ФГБУН «Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе» РАН, Санкт-Петербург
[3]ИФГБУН «Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова» РАН, Москва
[4]Indian Institute of Technology-Madras (IIT Madras), Chennai 600036, India
e-mail: filimonov@rphf.spbstu.ru

Работа посвящена установлению микроскопической основы физических процессов, протекающих в наноструктурированных функциональных материалах (на примере сегнетоэлектрика - релаксора $Sr_{1-x}Ba_xNb_2O_6$), путем изучения особенностей структуры на атомных и нанометровых масштабах с использованием новых экспериментальных подходов том числе дифракции когерентного рентгеновского излучения.

Введение. Нанонеоднородные материалы являются перспективными для широкого круга практических применений. В частности, сегодня почти все пьезо - и сегнетокерамики изготавливаются из смешанных перовскитоподобных материалов, в которых наблюдаются два типа мезоскопического ближнего порядка: композиционный, связанный с самоорганизованным

© Филимонов А. В., Вахрушев С. Б., Политова Г. А., Ravi Kumar, 2018

химическим упорядочением, и структурный, связанный с ионными смещениями и возникающий, в частности, при фазовых переходах в таких материалах. Последний может проявляться в формировании полярных нанообластей (ПНО) и нанодоменов. На сегодняшний день микроскопический механизм процессов, происходящих в таких системах, далеко не полностью изучен и понят. Так, хотя хорошо установлено, что формирование ПНО в сегнетоэлектриках сложного состава является основой их необычных физических свойств, четкого понимания того, с чем связано возникновение этих областей, и каким образом происходит их дальнейшая трансформация, не до конца выяснено.

Цель работы заключается в выявлении микроскопической природы физических процессов в наноструктурированных материалах, приводящих к формированию специфических свойств исследуемых объектов, и установлении связи наблюдаемых свойств с особенностями структуры на атомных и нанометровых масштабах. Объектом исследования является одноосный сегнетоэлектрик релаксор - $Sr_{1-x}Ba_xNb_2O_6$ (SBN).

Одноосные сегнетоэлектрики релаксоры - $Sr_{1-x}Ba_xNb_2O_6$ (SBN). Соединения *SBN* представляют интерес как модельный объект для реальных релаксоров, поскольку исследование любых одноосных систем значительно проще, чем систем кубических, в них есть выраженная анизотропия и могут быть построены более адекватные модели. С другой стороны, это весьма перспективный материал для создания фоторефрактивных кристаллов.

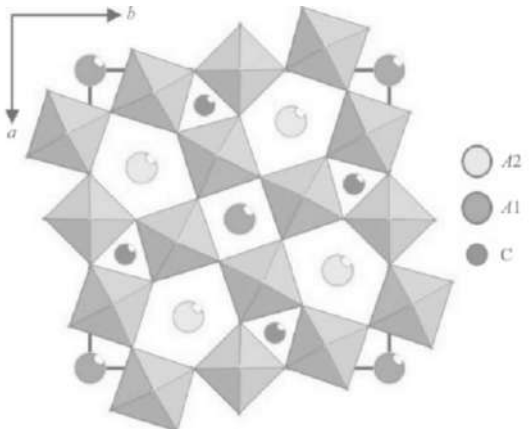


Рис. 1. Схематическое изображение структуры вольфрамовой бронзы. В SBN: A1=Sr; A2=Ba + Sr; C – не заполнены. Источник беспорядка - A2

SBN обладает тетрагональной структурой типа вольфрамовой бронзы, в которой имеются каналы двух типов - пентагональные и тетрагональные, и эти каналы могут заполнять различные ионы [1]. В тетрагональные каналы (A1) могут входить только ионы Sr, в пентагональные каналы (A2) - как ионы Sr, так и Ba. При этом если каналы A1 замещаются практически полностью, то в A2 замещение носит случайный характер (рис. 1). Таким образом, в кристалле возникает композиционный беспорядок. Каналы A2 заполняются не полностью и в них присутствуют вакансии, которые могут генерировать случайные электрические поля. Учитывая одноосную анизотропию кристалла, его можно рассматривать как физическую реализацию изинговой системы со случайными полями.

Эксперимент и анализ результатов. Наиболее яркой особенностью кристаллов SBN является дисперсия диэлектрической проницаемости, особенно отчетливо проявляющаяся при низких температурах (ниже 380 К) [2]. Это ставит вопрос о характере низкотемпературной фазы (дипольное стекло, нанодоменная структура, суперпараэлектрик и т.д.). Более того, сам переход оказывается размытым. Это видно не только из диэлектрических исследований, но и вида температурной зависимости параметра элементарной ячейки (рис. 2), при этом природа размытия остается неясной.

Прямой ответ может быть получен путем проведения исследований мезоскопической

структуры. Для решения этой задачи нами был выбран невозмущающий метод дифракции когерентного синхротронного излучения (СИ) [3].

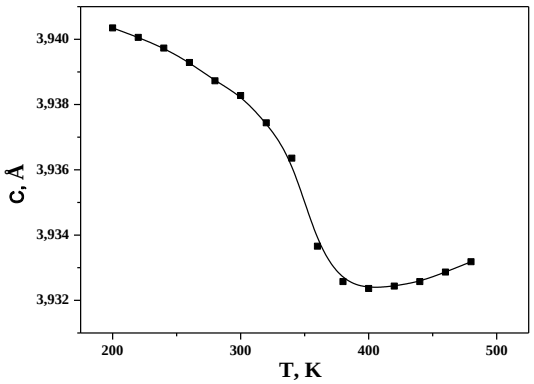


Рис. 2. Температурная зависимость параметра ячейки *c* в кристалле SBN-61

В работе исследовались кристаллы SBN двух разных составов с концентрацией Sr 61% и 75%. Первоначально был получен в идентичных условиях набор экспериментальных результатов - картин рассеяния когерентного СИ на образце SBN-61 в зеркальной (брэгговской) геометрии (рис. 3). В эксперименте уже при высокой температуре (в чистой парафазе) наблюдались микронные неоднородности на масштабах порядка 3-4 мкм (рис. 3а). Вероятно, эти неоднородности связаны с неидеально ровной поверхностью образца, поскольку метод крайне чувствителен к отклонению от плоскостности объекта в десятки нм. При приближении к температуре перехода (340 К), происходит гомогенизация мезоскопической структуры кристалла. При этом в области неоднородности на расстояниях порядка или больше длины когерентности излучения исчезают (рис. 3б).

В этой температурной области можно говорить о том, что в образце присутствует либо большая концентрация ПНО, либо развитые флуктуации поляризации. При последующем понижении температуры возникает макродоменная фаза, на что указывает исчезновение особенностей на субмикронных масштабах (рис. 3в). Таким образом, данные когерентной дифракции в брэгговской геометрии не дают однозначного ответа о процессах в релаксорной фазе.

Нами впервые был применен метод когерентной дифракции в режиме диффузного рассеяния (рис. 4). В параэлектрической фазе (рис. 4а) наблюдается очень узкий пик в центре, а это означает, что если и есть какой-то ближний порядок, то на очень малых расстояниях. При понижении температуры и переходе в релаксорную фазу (рис. 4б) виден явно выраженный субмикронный порядок в расположении ПНО с характерным размером 10 нм и с характерным расстоянием между этими областями - субмикронного масштаба. При переходе в низкотемпературную макродоменную фазу (рис. 4в) можно говорить о практически полном исчезновении ПНО.

Картина почти возвращается к той, которая была в высокотемпературной фазе (рис. 4а). Таким образом, именно здесь проявляется экспериментальный факт, что в промежуточной (релаксорной фазе) действительно существуют ПНО. Более того, они образуют регулярную структуру с ближним порядком, аналогичную возникающей в коллоидном растворе.

Аналогичные измерения выполнены для SBN-75. Очевидны различия между парафазой и низкотемпературной фазой. В парафазе имеются биения, но на размерах больше чем 2 мкм. В низкотемпературной фазе (275 К), проявляется очень четкая структура порядка 1 мкм, и можно однозначно соотнести ее с появлением микро и нанодоменной структуры.

Заключение. В результате исследований брэгговского и диффузного рассеяния когерентного СИ (SPECKL картин) на образцах SBN-61 и SBN-75 установлено наличие в обоих образцах уже при температуре, выше температуры перехода ПНО с расстоянием между центрами до единиц микрон.

Установлено, что формирование доменной структуры сопровождается частичным разупорядочением, обусловленным возрастанием флуктуаций поляризации («гомогенизация» картины рассеяния).

Обнаружено, что процесс перехода в низкотемпературную фазу отличается для образцов SBN-61 и SBN-75. SBN-61 демонстрирует более сильные пространственные корреляции на больших расстояниях, что приводит, в конечном итоге, к “окончательному” (в пределах разрешения метода) формированию доменной структуры. Поляризация же в объеме SBN-75 оказывается менее упорядоченной, а исследованная низкотемпературная фаза этого материала может быть охарактеризована как микродоменная фаза или кластерное дипольное стекло

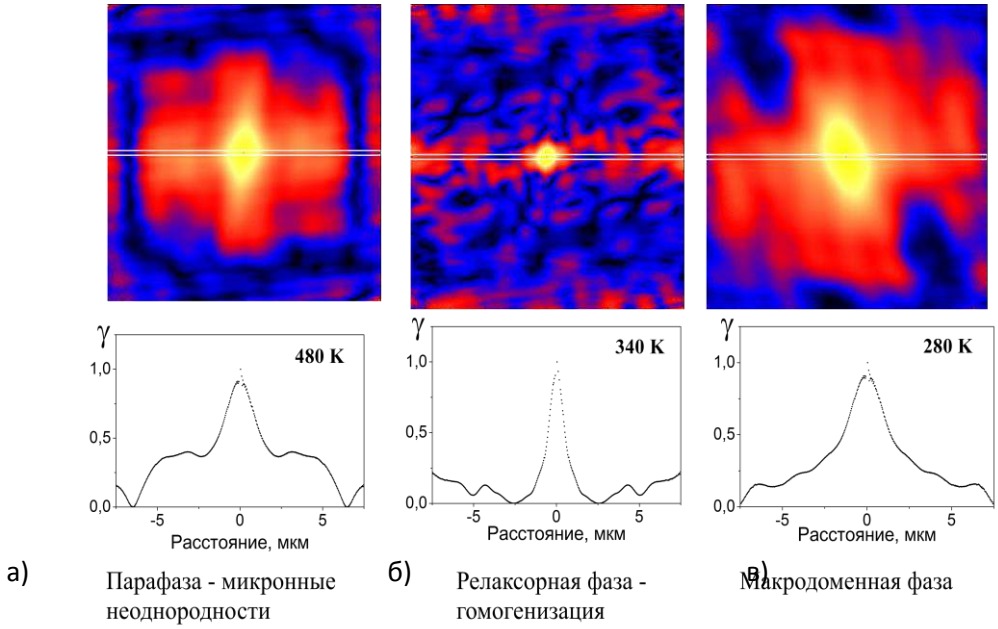


Рис. 3. Результаты обработки температурной эволюции экспериментальных картин рассеяния когерентного СИ на SBN-61 в зеркальной (брэгговской) геометрии. Фурье - образы картин рассеяния и соответствующие профили амплитуд в центральной области, полученные при различных температурах образца

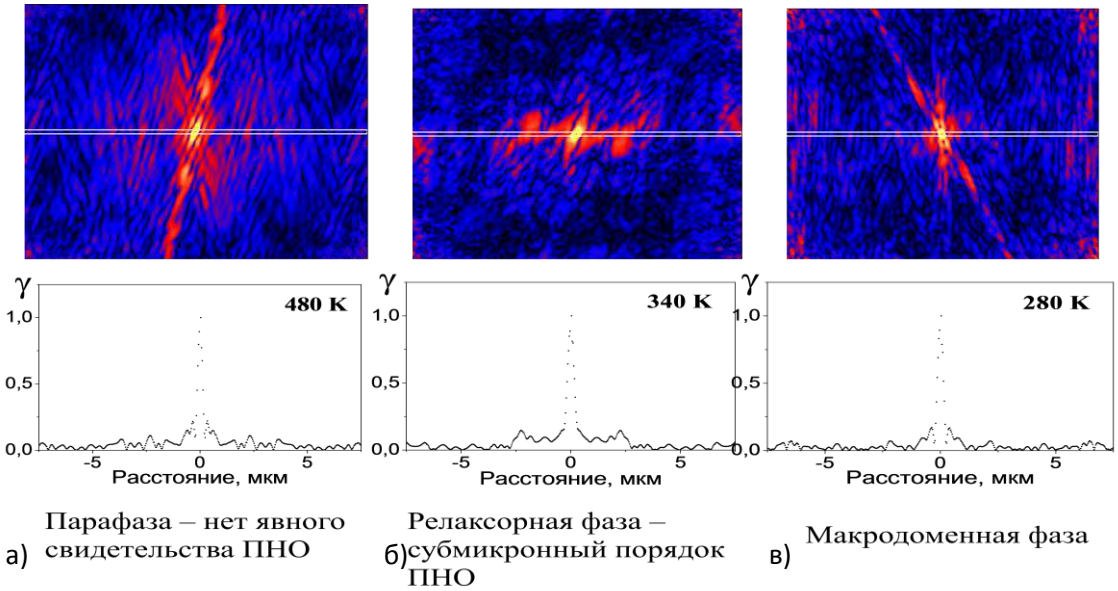


Рис. 4. Результаты обработки температурной эволюции экспериментальных картин рассеяния когерентного СИ на SBN-61 в незеркальной (диффузной) геометрии

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и образования РФ, проект № 11.5861.2017/БЧ.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Черная Т. С. Атомное строение монокристалла $Sr_{0.75}Ba_{0.25}Nb_2O_6$ и связь состав-структура-свойства в твердых растворах (Sr, Ba)Nb_2O_6 / Черная Т.С. [и др.] // ФТТ. 2000. Т. 42. № 9. С.1668.
2. Борисов С. А. Критическое рассеяние нейтронов в одноосном релаксоре $Sr_{0.6}Ba_{0.4}Nb_2O_6$ / С. А. Борисов [и др.] // ФТТ. 2013. Т. 55. №2. С. 295-302.
3. Burkovsky R. G. Structural heterogeneity and diffuse scattering in morphotropic lead zirconate-titanate single crystals. / R.G. Burkovsky, S.B. Vakhrushev, A.V. Filimonov et al. // Physical Review Letters. 2012. Vol. 109. p. 097603

НАНЕСЕННЫЙ НА БРИКЕТИРОВАННЫЙ ДИОКСИД ТИТАНА МОЛИБДАТ МЕДИ, КАК КАТАЛИЗАТОР ОКИСЛЕНИЯ САЖИСТОГО УГЛЕРОДА

П. Г. Чигрин, Е. А. Кириченко

ФГБУН «Институт материаловедения» ХНЦ ДВО РАН
г. Хабаровск, e-mail: pal_chig@mail.ru

Методом пиролиза полимерно солевых композиций получены нанесенные на брикетированный диоксид титана медно-молибдатные катализаторы окисления дизельной сажи. Показано что процесс каталитического горения сажистого углерода на полученных композициях протекает в 2 этапа: 1) горение в порах каталитической композиции, 2) горение на поверхности катализатора. Покрытия, показывающие максимальный каталитический эффект (температура максимальной скорости 413,5 С) получены при двукратном нанесении активного компонента на носитель.

Проблема снижения токсичности выбросов, образующихся при сгорании ископаемых топлив является одной из наиболее актуальных. Методом позволяющим достигнуть высоких результатов в этом направлении является глубокое каталитическое окисление продуктов сгорания, в частности сажистого углерода. Ранее нами было показано, что молибдат меди $CuMoO_4$ является эффективным катализатором глубокого окисления дизельной сажи [1]. В реальных системах очистки активные каталитические компоненты, как правило, наносят на инертный носитель. В настоящем исследовании для этих целей предложен брикетированный диоксид титана. Одним из существенных параметров, от которого зависит активность нанесенного катализатора, является оптимальное соотношение носителя к катализатору. Поэтому целью настоящей работы является синтез новых нанесенных на брикетированный диоксид титана медно-молибдатных катализаторов и поиск оптимального соотношения катализатор/носитель обеспечивающего максимальную эффективность в процессе каталитического горения сажистого углерода.

Оксид титана (IV) марки ОСЧ смешивался с водным 10%-м раствором поливинилового спирта (ПВС) марки 16/1 в массовом соотношении 4:1 и подвергался прессованию на испытательном гидравлическом прессе усилием в 1кН. Далее сформированная заготовка подвергалась сушке при 110°С для удаления растворителя и термообработке до 1550°С в течение 1 часа для окисления пиролитического углерода и спекания частиц TiO_2 в монолитный брикет.

Для приготовления азотнокислого полимерно-солевого геля использовались реактивы $Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$ и $(NH_4)_6Mo_7O_{24} \cdot 4H_2O$ в 5 % в азотной кислоте. К предварительно приготовленному и охлаждённому 10%-му раствору ПВС последовательно прибавляли парамолибдат аммония и соли меди. Атомное отношение металлов в приготовленном растворе составляло 1:1. Нанесение геля $CuMoO_4$ на оксидотитановые брикеты проводили при комнатной температуре под вакуумом в течение 30 минут с момента прекращения выделения пузырьков воздуха из внутренних пор носителя. Далее образцы извлекались и подвергались медленной сушке при 70 и 90°С в течение суток для предотвращения вспенивания полимерного связующего, сопровождающееся уносом катализатора, с последующим отжигом при 350 и 550 °С для формирования каталитического слоя из частиц $CuMoO_4$.

Морфологию и элементный состав образцов исследовали методом сканирующей

© Чигрин П. Г., Кириченко Е. А., 2018

электронной микроскопии (СЭМ) (микроскоп EVO 40, оснащенный энергодисперсионным спектрометром типа Rontec, с уточнением содержания элементов на спектрометре с волновой дисперсией типа 35-SDS JEOL). Фазовый состав определяли методом рентгенофазового анализа (РФА) на приборе ДРОН — 7 с использованием $Cu_{K\alpha}$ излучения.

Каталитическое горение сажи исследовали на приборе сканирующей термогравиметрии NETZSCH STA 449 F3 в потоке воздуха (50 мл/мин) при скорости нагрева 5 °/мин. Брикеты $CuMoO_4/TiO_2$ покрывали сажей в пламени горелки при сжигании дизельного топлива (ГОСТ 305-82). Температуру начала горения сажи (T_o) определяли по термогравиметрическим (ТГ) кривым, температуру максимальной скорости процесса горения (T max) – по точкам перегиба ТГ кривых, с точностью ±2 ^{o}C..

Используемый для получения носителя диоксид титана представлен частицами в форме расколотых пополам шаров со средний размером ~29 мкм (Рис 1.). После отжига пластификатора формировались пористые брикеты среднего размера 2,33×0,7×0,77 см. Как показано на рисунке 2а, после спекания в брикет полусферы диоксида титана формируют высокопористый носитель, размер пор составил от 10 мкм. Под вакуумом брикет впитывал до 26% по объему приготовленного полимерно-солевого геля. После первого нанесения доля активного компонента составила 2 масс. %. Согласно данным РФА, каталитическая композиция представлена диоксидом титана в модификации рутил и триоксидом молибдена в моноклинной модификации (Рис. 3а). Активный компонент представлен пластинами с округлыми краями. Данные РФА и СЭМ хорошо согласуются с нашими предыдущими результатами синтеза различных форм триоксида молибдена из органических прекурсоров [2]. ТГ и ДТГ кривые окисления сажистого углерода на однократно покрытом активным компонентом оксидотитановом брикете представлены на рисунке 3б. Горение проходит в 2 этапа в температурном диапазоне от 300 до 500 °C (Рис. 3б). Первый этап от 300 до 370 °C с перегибом при 328 °C, по видимому, соответствует горению сажи в порах катализатора.

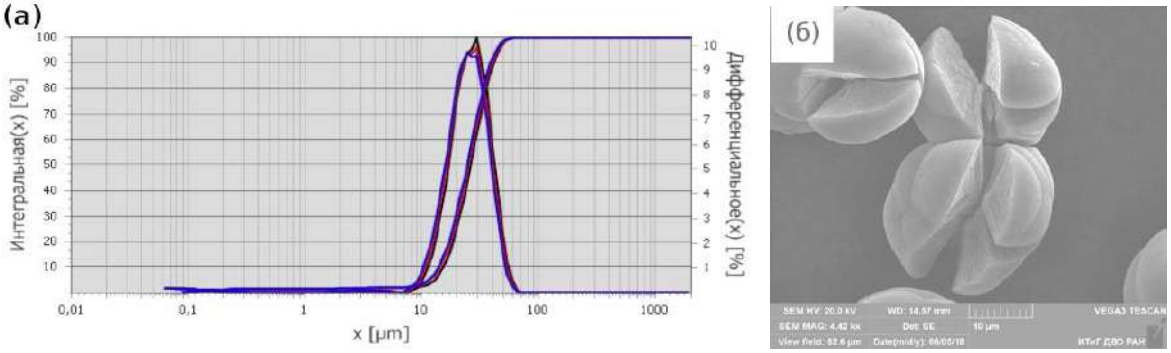


Рис. 1. а) Распределение по размеру, б) СЭМ изображения частиц оксида титана (IV)

При двукратном нанесении массовая доля активного компонента возросла до 3,2%. На ренгенограммах проявляются пики молибдата меди (рис. 3а). Молибдат меди на поверхности носителя представлен в виде округлых кристаллитов размером 2-4 мкм равномерно припеченных друг другу (рис. 2в). Горение углерода на двукратно покрытом нанесенном катализаторе происходит более интенсивно, о чем свидетельствует снижение температуры окончания процесса до 450 °C (рис. 3б). Также как на однократно нанесенном образце горение проходит в 2 этапа, однако максимальная скорость первого этапа смещается в более высокотемпературную область и составляет 348 °C. Вероятнее всего это смещение связано с частичным закрытием поверхностных пор вследствие заполнения их активным компонентом. Максимальная скорость второго этапа соответствует температуре 413,5 °C, что связано с более высокой активностью $CuMoO_4$ по сравнению с MoO_3 в реакции горения углерода.

После трехкратного нанесения доля активной фазы возросла до 4 масс. %. Интенсивность пиков $CuMoO_4$ относительно рефлексов рутила существенно выросла, по сравнению с предыдущим нанесением (Рис 3а). Кристаллиты молибдата меди на поверхности катализатора существенно укрупнились до 3-6 мкм в диаметре (рис. 2г). Горение углерода в присутствии каталитических композиций с трехкратно нанесенным активным слоем также проходит в 2 этапа : 300 — 360 ºC и

360 — 460 ºС (рис. 3б). Основной особенностью горения является то, что на первый этап приходится не более 5 % общей массы окисленного углерода. Вероятнее всего, это происходит из за полного закрытия пор носителя. Максимальная скорость горения углерода на втором этапе достигается при температуре 439 ºС, что более чем на 25 ºС выше, чем у предыдущего образца. Существенное снижение активности катализатора вызвано снижением эффективной площади контакта катализатора с сажей за счет укрупнения кристаллитов молибдата меди.

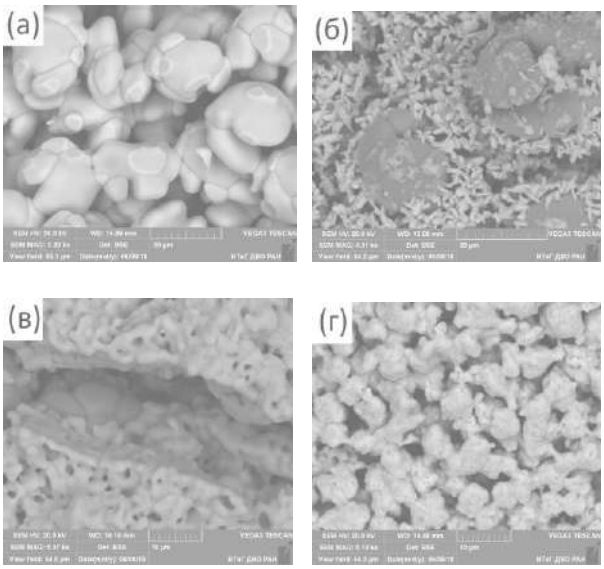


Рис. 2. СЭМ изображения поверхности а) носителя, б) однократно нанесенного на носитель катализатора, в) двукратно нанесенного на поверхность катализатора, г) трехкратно нанесенного на поверхность катализатора

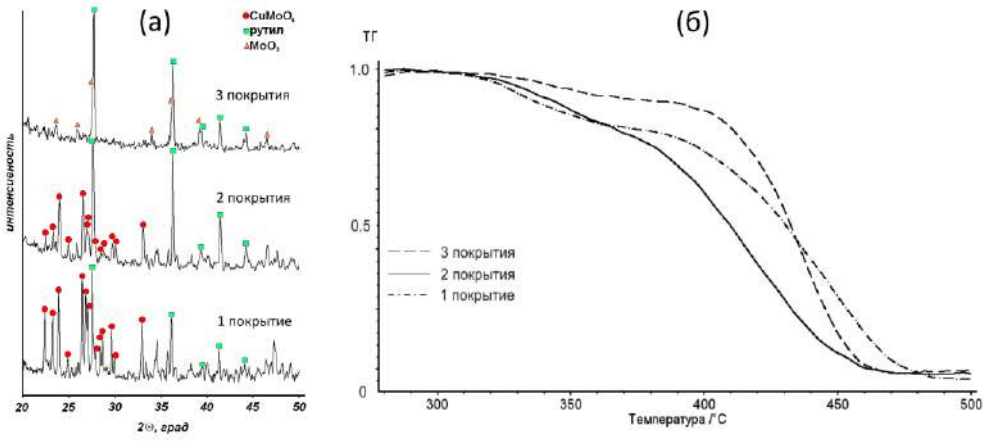


Рис. 3. а) РФА исследуемых катализаторов б) ТГ кривые горения сажистого углерода в присутствии нанесеных катализаторов на основе $CuMoO_4$

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Лебухова Н. В., Карпович Н. Ф., Макаревич К. С., Чигрин П. Г. Каталитическое горение сажи в присутствии медно-молибдатных систем, полученных разными методами // Катализ в промышленности. 2008. № 6. С. 35-40.
2. Лебухова Н. В., Макаревич К. С., Чигрин П. Г., Карпович Н.Ф. Морфология нанопластин MoO_3, полученных при пиролизе различных органических комплексов молибдена // Российские нанотехнологии. 2010. Т. 5, № 11-12. С. 44-47.

Секция «Физическое образование (школьное и вузовское)»

МЕТОДИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ СТРУКТУРНО-ЛОГИЧЕСКОГО ПОДХОДА К СИСТЕМАТИЗАЦИИ ЗНАНИЙ ПО ФИЗИКЕ

Л. В. Горбанева

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: largorbaneva@mail.ru

В статье излагаются некоторые этапы проведения обобщений знаний учащихся по физике на основе структурно-логического подхода. Рассматривается возможность единого подхода к системному изучению физики в школе на основе разъяснения структуры физических знаний и наглядного представления структурно-логических конспектов. Представлены основные составляющие элементы структурно-логических конспектов.

Формирование системы знаний – основная задача обучения физике в школе. В преподавании физики очень важно, чтобы процесс усвоения учащимися понятий, законов, теорий происходил в их логической связи. Это позволит формировать у школьников знания адекватные структуре современного физического знания и далее представление о естественнонаучной картине мира. Отсюда вытекают требования к обучению физике: по мере раскрытия содержания планомерно выделять структуру знаний, приводить их в систему, доводя до широких обобщений.

Практическое решение задачи формирования системы знаний по физике требует проведения этой работы на каждом уровне, после изучения логически завершенной части материала, в конце темы или раздела. Анализ содержания и структуры школьного курса физики, исследования по проблеме обобщения знаний позволяют рекомендовать некоторые этапы проведения такой работы на основе структурно-логического подхода.

На каждом уровне учителю надо четко выделять структурные элементы физических знаний (понятия, законы, научные факты, основные положения, теории и т.п.), которые изучают на данном уроке. Для раскрытия физического содержания каждого элемента знаний следует опираться на планы обобщенного характера, рекомендуемые примерной основной образовательной программой основного общего образования [1] как критерий оценки знаний.

В учебном процессе обобщение знаний осуществляется на разных уровнях: на уровне понятий, законов, теорий. А.В. Усова в своей работе [2] выделяет следующие основные элементы знаний по физике: научные факты, понятия, методы научного исследования, законы, гипотезы и теории. Выделив основные структурные элементы научных знаний, она определяет общие требования к усвоению каждого из них через планы обобщенного характера, пригодные для изучения любых явлений, законов и теорий.

Что надо знать о явлении?

1. Внешние признаки явления.
2. Условия, при которых протекает явление.
3. Как воспроизвести и пронаблюдать явление в лабораторных условиях.
4. Сущность явления, механизм его протекания (объяснение явления на основе современных научных теорий).
5. Связь данного явления с другими.
6. Количественная характеристика явлений (величины, характеризующие явление, связь между величинами, формулы, выражающие эту связь).
7. Учет и использование на практике.
8. Способы предупреждения вредного действия явления.

Что надо знать о законе?

1. Связь, между какими явлениями (процессами) или величинами выражает закон?
2. Кем и когда открыт?
3. Формулировка закона.

© Горбанева Л. В., 2018

4. Математическое выражение закона.
5. Опыты, подтверждающие справедливость закона.
6. Учет и использование закона на практике.
7. Границы применимости закона.

Что надо знать о теории?

1. Опытные факты, послужившие основанием для разработки теории.
2. Основные положения теории, система фундаментальных понятий и величин.
3. Идеальная модель изучаемого объекта.
4. Математический аппарат теории, ее основные уравнения (постулаты, законы, константы).
5. Следствия теории.
6. Опытные факты, подтверждающие основные положения теории.
7. Границы применимости теории.
8. Явления и свойства тел, предсказываемые теорией.

Одновременно нужно рассмотреть взаимосвязь между элементами знаний, связь ранее изученных вопросов с новыми. Выделение и понимание таких связей составляет основу знаний по физике, т.к. позволяет раскрыть законы, отражающие взаимосвязь явлений природы. Здесь важно выделить значение законов, границы и области их применения; показать соотношение всех знаний.

Такой подход дает возможность одновременно знакомить учащихся с языком науки и структурной физических знаний.

В основной школе учитель разъясняет лишь отдельные связи, в старшей школе рекомендуется рассмотреть структурную взаимосвязь физических знаний по предложенной схеме. Затем, от урока к уроку на конкретном материале показывать такие связи, предлагать учащимся самостоятельную работу в этом направлении.

В рамках одной темы материал также рекомендуется систематизировать, выделяя логическую структуру темы или раздела. Это направление систематизации должно основываться на разъяснении частных и общенаучных методов познания, которые находят отражение в школьном курсе физики через выбор методических подходов к изучению отдельных вопросов и определяют структурное построение темы или раздела. Это методы индукции и дедукции; методы моделирования и аналогии, их значение в изучении физики; теоретический и экспериментальный методы, их соотношение в познании природы; исторические пути физических открытий, классификации и т.п.

Важно, чтобы построение логических структур возможно ближе соответствовало структуре физической теории, которая должна быть основой обобщения большой группы знаний. Структура физической теории отражает также этапы диалектико-материалистического пути познания, цикл процесса познания (рис.)

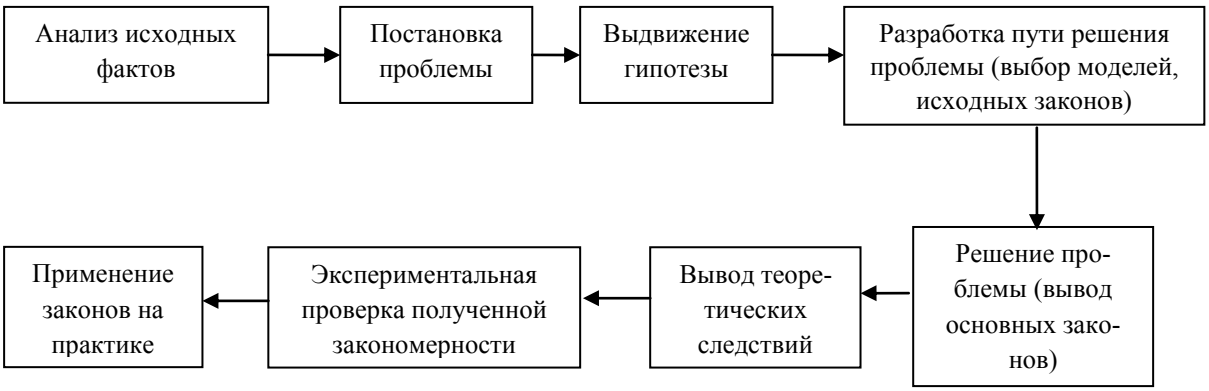


Рис. Структура физической теории

Названные приемы систематизации знаний позволят в конце изучения логически завершенной части материала, темы или раздела делать обобщение большой группы знаний, выделяя наиболее общие законы и теории, их частные проявления и следствия.

Рассмотренные направления дают возможность выделить более конкретно объекты си-

стематизации:

- Содержание структурных элементов знаний
- Взаимосвязь элементов знаний, соответствующая структуре физических знаний
- Причинно-следственные связи между элементами знаний
- Сравнительный анализ элементов знаний, выделение сходства и различия между понятиями и законами
- Логическая связь изучаемых вопросов
- Методы исследования физических явлений
- Исторические пути познания физики
- Области применения физических знаний

Высшей формой обобщения знаний является формирование представлений о единой физической картине мира, которая должна быть раскрыта с позиции диалектического материализма. Здесь можно предложить три направления для обобщения всех изученных вопросов:

- Виды материи, структурные формы материи;
- Виды взаимодействия материальных объектов, соответствующие им различные формы движения материи;
- Основные закономерности, разъясняющие разные взаимодействия, место их изучения в школьном курсе физики.

По всем направлениям можно проводить обобщение знаний, как по мере изучения программного материала, так и в конце изучения физики.

Очень важно в процессе обобщения знаний находить наглядные формы систематизации, усиливающие смысловое восприятие связей между изучаемыми вопросами [3]. В практике обучения физики в школе выработаны следующие формы систематизации:

- Таблицы (сравнительные, обобщающие)
- Схемы (структурные, логические структуры)
- Наглядные конспекты (опорные, следящие, структурные)
- Классификации
- Графы.

Каждый учитель-практик ищет свои пути передачи крупного объема знаний, использует различные формы для такого представления информации, чаще на уроках-лекциях, уроках обобщающего повторения.

Мы рассмотрим возможность единого подхода к системному изучению физики в школе на основе разъяснения структуры физических знаний и наглядного представления структурно-логических конспектов.

Можно выделить основные составляющие элементы структурно-логических конспектов следующие:

- Структурные элементы физических знаний, их особенности
- Связи между элементами знаний (структурные и логические)
- Постановка проблемных задач (логические цепочки задач), решение которых приводит к разъяснению понятий, законов, теорий
- Выделение способа, метода решение каждой задачи
- Таблицы, схемы, схематические рисунки, графики, формулы и другие наглядные формы описания физических знаний.

Каждая схема-конспект отражает основное содержание логически завершенной группы знаний или крупного блока.

Структурно-логические конспекты можно составлять на уроке по ходу объяснения материала или давать в готовом виде после объяснения. Закрепление основных вопросов также надо проводить с опорой на такой конспект. Во время домашней работы схема-конспект поможет учащимся сознательно читать учебник, где часто не разъясняется связь отдельных вопросов. Конспект можно составлять более полно или сжато по усмотрению учителя с учетом подготовки учащихся.

Важную роль играют такие конспекты при изложении материала крупными блоками, ко-

гда учащиеся должны осознать многие структурно-логические связи, привести в систему большую группу знаний. Особенно целесообразно составлять такие крупные блоки-конспекты для уроков повторения, систематизации и обобщения знаний. Для урока систематизации и обобщения знаний учащиеся могут самостоятельно составить крупный блок-конспект, если до этого на отдельных уроках составлялись логические схемы-конспекты по отдельным группам вопросов.

Можно провести эту работу на уроке под руководством учителя. По мере того, как учащиеся поймут, и научаться выделять структурно-логические связи изучаемого материала, можно будет давать им самостоятельные задания по составлению схемы-конспекта и объяснению материала на его основе. Еще одна форма проведения обобщающих уроков – бригадная, когда отдельные группы учащихся будут готовить объяснение по отдельным группам вопросов с составлением или применением готового наглядного конспект. К структурно-логическому конспекту можно предложить вопросы, которые помогут выделить главные знания, которые будут направлять логические рассуждения по воспроизведению изучаемого материала. По вопросам учащиеся могут повторять материал дома и в классе, готовиться к отчетам на обобщающих уроках или при подготовке к зачету.

Схемы-конспекты и вопросы к ним можно использовать для «опережающего» изучения материала, при самостоятельной проработке текста учебника. Затем, в ходе совместного обсуждения на уроке, разбирают структурно-логические связи и содержание материала темы.

Приступая к изучению новой темы, полезно сразу познакомить учащихся с последовательной группой задач, которые здесь будут решаться: общая задача – последовательность частных задач. Как осуществляется решение каждой задачи, учащиеся могут сначала могут самостоятельно познакомиться по учебнику (вариант идеи опережения). При этом можно дополнительно предложить систему направляющих вопросов. Затем проводиться обсуждение способа решения, выводы, их подтверждения. Эти основные положения фиксируют в конспекте.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Примерная основная образовательная программа основного общего образования (одобрена решением федерального учебно-методического объединения по общему образованию, протокол от 08.04.2015 № 1/15) (ред. от 28.10.2015)
2. Усова А. В., Вологодская З. А. Самостоятельная работа учащихся по физике в средней школе. М.: Просвещение, 1981. 158 с.
3. Давыдов В. В. Виды обобщения в обучении: Логико-психологические проблемы построения учебных предметов. М.: Педагогическое общество России, 2000. 480 с
4. Усова А. В. Систематизация и обобщение знаний учащихся в процессе обучения: Пособие к спецкурсу / М-во общ. и проф. образования Рос. Федерации. Челяб. гос. пед. ун-т. Челябинск: Факел, 1998. 43 с.

РЕШЕНИЕ ИЗБРАННЫХ ЗАДАЧ ПО ОБЩЕЙ ФИЗИКЕ В ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ

М. Б. Добромыслов

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: mdobr@bk.ru

Физика – одна из самых сложных дисциплин. В частности, решение физических задач представляет большую сложность для студентов. В настоящей статье рассматриваются условия успешного решения таких задач и приводятся достаточно сложные оригинальные задачи для выработки умения решать. Эти задачи можно предлагать студентам-физикам и продвинутым студентам других направлений бакалавриата.

Как известно, изучение физики представляет большую сложность для школьников и студентов высшей школы. В высшей школе теория физики сообщается на лекционных занятиях, а умение решать задачи студент отрабатывает на практических занятиях, после проработки соот-

© Добромыслов М. Б., 2018

ветствующего лекционного материала. Как, например, отмечает автор [1]. «Некоторые студенты признаются, что изучение теории не вызывает у них никаких трудностей, что они хорошо понимают и запоминают формулы законов, определения, и т.д., но как только дело доходит до решения задач, они становятся в тупик».

Процесс решения физических задач должен быть похож на небольшое научное исследование со всеми присущими ему атрибутами – обоснованным выбором идеализации изучаемого процесса (физической модели), исследованием простых частных и предельных случаев, поиском и разбором аналогий с другими задачами и явлениями, а также сравнением методов их анализа [2].

Главное условие успешного решения задач – знание студентами физических закономерностей, правильное понимание физических величин, а также способов и единиц их измерения. К обязательным условиям относятся и математическая подготовка учащихся [3].

Преподаватель должен знать различные способы обучения решению задач по физике. Теория и практика обучения умению решать физические задачи позволяют выделить три основных способа [4].

Первый способ традиционный, который включает, в частности, коллективное решение. Вызванный к доске студент пытается решить задачу; остальные студенты (за редким исключением) ждут, когда появится решение. Такой подход, видимо, себя исчерпал.

Второй способ менее традиционный. Включает полусамостоятельное и самостоятельное решение физических задач.

Третий способ называется алгоритмическим.

Решение задач – одно из важных средств повторения, закрепления и проверки знаний учащихся. Решение физических задач позволяет обучать учащихся решению проблем, развивает логическое мышление, способствует применению физических знаний на практике [5].

Необходимо, чтобы студенты хорошо знали основы высшей математики, а именно, производные, простые интегралы. Как показывает практика, в силу целого ряда обстоятельств (отдаленность от городов, где имеются хорошие, сильные кадры; слабая подготовка самих учителей, и др.) многие студенты младших курсов (да и старших тоже) слабо знают математику, поэтому не могут справиться с преобразованиями формул. А это необходимое условие решения задач по физике в общем виде. После того, как задача решена в общем виде, можно подставлять в найденную формулу заданные величины и получать численный ответ.

Всевозможных задач великое множество. Интересно здесь привести задачник-пособие по общему курсу физики Мелешиной А.М. [6]. В этом пособии автор как бы ведет студента по пути решения задачи. Например, задача 17. Условие: Точка движется по окружности с равнопеременной угловой скоростью. Найти зависимость угла поворота точки от времени, если задано постоянное угловое ускорение.

1. Не понимаю условия задачи (автор дает ссылку на решение задачи 126).

2. Не могу взять интеграл (следует ссылка на решение задачи 146).

Приведем здесь несколько задач по избранным разделам курса общей физики, которые предлагались продвинутым студентам инженерно-экономического факультета ТОГУ в начале 2000-х тысячных годов. Все задачи оригинальные и достаточно сложные. Некоторые можно решить без применения высшей математики. Другие требуют знания интегралов и производной. Некоторые из этих задач можно предлагать сильным студентам, например, при проведении коллоквиумов. Здесь приведена только маленькая часть оригинальных задач. На самом деле их значительно больше.

Кинематика. Задача. Две материальные точки расположены на окружности диаметрально противоположно. Одновременно они начинают двигаться с тангенциальным ускорением: одна с ускорением $a_t = At$, другая с ускорением $a_t = \alpha At$, $\alpha > 1$. Сколько оборотов сделает вторая точка к тому моменту, когда догонит первую? Приведем только ответ: $N = \frac{\alpha}{2(\alpha - 1)}$.

Электричество. Задача. Круглое кольцо находится в ортогональном однородном магнитном поле. Его сначала трансформируют в квадрат; при этом по кольцу протекал заряд q_1. В другой раз это же кольцо трансформируют в правильный треугольник – протекший при этом

заряд q_2. Найти отношение зарядов q_1/q_2. Ответ: $q_1/q_2 = \frac{9}{4}\frac{4-\pi}{9-\pi\sqrt{3}}$.

Задача. Из вершины равнобедренного прямоугольного треугольника по катетам одновременно начинают двигаться два равных по знаку и величине заряда q с одинаковой скоростью. Длина катета a. Найти зависимость напряженности электрического поля в середине гипотенузы как функции расстояния x, пройденного зарядом из вершины. Ответ:

$$E = \frac{q(a-x)}{\pi\varepsilon[(a-x)^2 + x^2]^{3_2}}$$

Задача. Основанием пирамиды является квадрат. Все боковые грани пирамиды – равносторонние треугольники. В углах квадрата находятся одинаковые положительные заряды q. Какой заряд надо поместить в вершину пирамиды, чтобы потенциал в центре квадрата был равен нулю? Ответ: отрицательный заряд, равный $-4q$.

Электричество и магнетизм. Задача. Положительный заряд влетает под углом $\alpha > \pi/2$ в одинаково направленные однородные электрическое и магнитное поля, соответственно, напряженностью E и магнитной индукцией B, со скоростью v. Сколько оборотов сделает заряд за время, за которое его скорость вдоль полей станет равной нулю? Ответ: $N = -\frac{v\cos\alpha}{2\pi}\frac{B}{E}$.

Задача. Электрон влетает в антипараллельные однородные электрическое и магнитное поля со скоростью v_0. Через какое число витков его энергия удвоится? Ответ:

$$N = \frac{v_0\left(\sqrt{(\cos\alpha)^2 + 1} - \cos\alpha\right)}{2\pi}\frac{B}{E}$$

Некоторые физические задачи можно решить проще, нежели прямо «в лоб», применяя методы высшей математики. Рассмотрим следующую задачу. В однородном магнитном поле ортогонально силовым линиям расположено проводящее кольцо. В некоторый момент его площадь начинает изменяться по закону $S = S_0 + A\sin\omega t$. По какому закону должна изменяться магнитная индукция поля, чтобы ток в кольце не возникал? Начальная магнитная индукция B_0.

Прямое решение «в лоб» приводит к необходимости решать дифференциальное уравнение с разделяющимися переменными, т.е. к интегрированию. Ответ получается такой:

$$B = B_0\frac{S_0}{S_0 + A\sin\omega t}$$

Как известно, ток не возникает в контуре тогда, когда магнитный поток не изменяется. Поэтому можно легко подобрать этот вид магнитной индукции, при котором магнитный поток постоянен.

Интересно, что если изменить условие предыдущей задачи так, чтобы ток возникал и был постоянным, можно также подобрать решение, исходя из того, что так как знаменатель в похожей формуле сократится с выражением площади кольца, данным выше $S = S_0 + A\sin\omega t, mo$ числитель в выражении магнитной индукции должен линейно зависеть от времени. Таким образом, мы получаем выражение для B в виде

$$B = \frac{B_0 S_0 + Ct}{S_0 + A\sin\omega t}$$

Здесь невозможно определить постоянную C , т. к. она определяется произведением тока, возникающего в кольце, на его сопротивление.

ЛИТЕРАТУРА

1. Беликов Б. С. Решение задач по физике. Общие методы. М.: Высшая школа. 1986. 256 с.
2. Кондратьев А. С. Ларченкова Л. А., Ляпцев А. В. Методы решения задач по физике. М.: Физматлит, 2012. 312 с
3. https://vuzlit.ru/442996/metodika_resheniya_fizicheskih_zadach
4. Абросимов Б. Ф. Физика. Способы и методы поиска решения задач. М.: Изд-во «Экзамен», 2006.
5. Маркова С. Н., Кондакова Е. В. Спажакин В. А. О роли задач в обучении физике. Физика в школе. Т.2. М.: Шк.-Пресс. с 14-16.
6. Мелешина А. М. Задачник-пособие по общему курсу физики. В 2 частях. Изд-во Воронежского ун-та. Воронеж. 1995. 431 с.

ПРОФОРИЕНТАЦИОННАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ КАК ФАКТОР РАЗВИТИЯ ИНЖЕНЕРНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

А. В. Казарбин[1], Ю. В. Лунина[2]

[1]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
[2]КГБ ПОУ «Хабаровский технический колледж»
г. Хабаровск, e-mail: 000283@pnu.edu.ru

В статье рассматривается профориентационная деятельность, осуществляемая на условиях социального партнерства, целью которой является формирование готовности абитуриента к обучению на инженерных направлениях подготовки.

В настоящее время качество инженерного образования, обеспечиваемое существующей образовательной системой, перестало удовлетворять ожидания общества, производственный комплекс, государство и каждого его гражданина. Проблемы несформированности у выпускников инженерного мышления имеют глубокие корни и вызваны не только несовершенством программ профессионального образования и методами преподавания в образовательных организациях среднего профессионального и высшего образования, но также определенными пробелами на дошкольном и школьном уровнях образования.

Причины выявленных проблем можно сформулировать следующим образом:

– низкий уровень сформированности компетенции выпускников инженерных специальностей, направленных на создание идеи и проектирование изобретения, на разработку технологий изобретения, обусловлены несформированностью конструктивного мышления, недостаточным вниманием к его развитию на всех уровнях образования;

– слабая степень развития опережающей креативности связана с низким уровнем развития воображения и творческого мышления, основы которых закладываются в период формирования базовой культуры личности;

– неразвитость стратегического мышления и несформированность системного подхода, а также слабая устойчивость к информационной перегрузке и непонимание потребностей потребителя вызваны несовершенством программ профессионального образования и технологий их реализации, отсутствием в программах курсов и модулей, направленных на формирование данных профессиональных компетенций;

– слабость таких социальных навыков, как умение работать в команде, боязнь брать на себя лидерство определяются недостатками позитивной социализации обучающихся на всех уровня образования.

Вышеперечисленные причины усугубляются слаборазвитой социокультурной средой (отсутствие уважения к интеллектуальному труду и интеллектуальной собственности, низкий престиж инженерных кадров низкая оплата труда и т.д), современным социально-экономическим состоянием страны и политическим давлением на Россию.

Сегодня в условиях санкций, связанных с запретом поставок в Россию высокотехнологичного оборудования, пришло понимание того, что экономическая независимость России тесно связана с необходимостью повышения уровня инженерного образования и технологических преобразований в России. В.В. Путин отметил, что сегодня лидерами глобального развития становятся те страны, которые способны создавать прорывные технологии и на их основе формировать собственную мощную производственную базу. Качество инженерных кадров становится одним из ключевых факторов конкурентоспособности государства и, что принципиально важно, основой для его технологической, экономической независимости [1].

Необходимость развития инженерного образования связано в первую очередь с обеспечением потребностей развивающейся экономики и инженерной инфраструктуры и развитием ТОСЭР в Хабаровском крае и их основными направлениями специализации, таких как: высокотехнологичные производства в сфере авиастроения, судостроения, металлургии, промышленного производства, производства пищевых продуктов и др.

© Казарбин А. В., Лунина Ю. В., 2018

Несмотря на то, что Хабаровский край является ведущим центром подготовки кадров на Дальнем Востоке: действуют 16 вузов и 31 профессиональная образовательная организация с общим контингентом более 80,5 тыс. студентов, среди факторов, затрудняющими успешное социально-экономическое развитие, отмечается дефицит рабочей силы и недостатки системы подготовки квалифицированных кадров. [2] На Дальнем Востоке до 2025 года планируется реализовать более 600 проектов, предусматривающих 100 тысяч новых рабочих мест. Уже сегодня созданы 18 территорий опережающего развития, резидентами которых стали 212 компаний. В Хабаровском крае действуют три ТОР – «Хабаровск», «Комсомольск» и «Николаевск», где будет создано около 9 тысяч рабочих мест. Интересных, современных и высокооплачиваемых. Большая часть из них – в сфере транспорта и логистики, машиностроения и лесопереработки, рыболовства и аквакультуры, в нефтехимии и нефтепереработки, добычи полезных ископаемых. Наиболее востребованные и перспективные профессии Хабаровского края – инженер-строитель, инженер-проектировщик в авиа– и судостроении, горный инженер, обогатитель полезных ископаемых и др. Так же в настоящее время рынку труда Дальнего Востока в большом количестве требуются квалифицированные рабочие кадры: сварщики, бетонщики, каменщики, токари-фрезеровщики. [3]

Одним из главных вызовов сегодняшнего дня является существующий дисбаланс на рынке труда Дальнего Востока, вызванный в том числе слабым взаимодействием учебных учреждений с работодателями. Учебные программы зачастую не соответствуют потребностям экономики, выпускники вузов не могут найти работу по специальности, при этом на одного безработного приходится до трех вакансий. Чтобы изменить ситуацию, нужно перестроить всю систему образования под существующий и формирующийся спрос. Но это, как и последующее обучение, потребует времени.

Сегодня система подготовки инженерных кадров требует создание условий для целенаправленного личностного развития детей и молодежи Хабаровского края, формирования у них положительного восприятия научно – технической, исследовательской и проектной деятельности, устойчивой мотивации к получению инженерного образования, формирования на всех уровнях образования инженерного мышления, подготовки компетентных инженерных кадров в соответствии с существующими потребностями предприятий Хабаровского края.

Вышеперечисленное требует поиска новых подходов к разработке целей, отбору содержания, методов, организационных форм подготовки будущего инженера, ориентированного на постоянное наращивание субъектного и профессионального потенциала.

Одной из важных составляющих в системе подготовки инженерных кадров должна стать профориентация выпускников образовательных учреждений, цель которой – формирование готовности абитуриента к обучению на инженерных направлениях подготовки.

Профориентационная деятельность (работа) понимается нами как управление процессом готовности к профессиональному самоопределению школьников.

Все этапы самоопределения школьника связаны с определенными методами, формами, задачами и целями деятельности по формированию личности современного профессионала. В современной научной литературе отмечено, что процесс профессионального самоопределения и развития личности осуществляется непрерывно, проходя через этапы:

– выбора своей будущей профессиональной деятельности;

– получения профессии и выхода на рынок труда;

– карьерного роста (вертикального и горизонтального), связанного с динамикой рынка труда;

– профессионального совершенствования (акме-этап).

Наиболее трудным является этап, когда человек принимает принципиальное решение о выборе профессионального пути, этот этап приходится на время учебы в школе. Поэтому создание системы профориентационной работы в школе является одним из главных направлений ее деятельности [4].

Работа в школе по профориентации осуществляется поэтапно, с учетом возрастных особенностей учащихся, преемственности в содержании, формах и методах работы. Профориентационная работа на всех этапах обучения и воспитания строится на следующих принципах:

– систематичность и преемственность;

– дифференцированный и индивидуальный подход;

– оптимальное сочетание массовых, групповых и индивидуальных форм профориентационной работы;

– взаимосвязь всех ступеней образования и профориентации;

– связь профориентации с жизнью.

Основные этапы деятельности: профессиональное просвещение, профессиональное воспитание, профессиональное консультирование.

Главные задачи деятельности по профориентации учащихся в школе:

– сформировать положительное отношение к труду;

– научить разбираться в содержании профессиональной деятельности;

– соотносить требования, предъявляемые профессией, с индивидуальными качествами;

– анализировать свои возможности и способности.

Для решения данных задач используются различные формы работы, которые определяются возрастными особенностями.

В государственной программе РФ «Развитие образования» на 2013–2020 гг. определена миссия образования – реализация каждым гражданином своего позитивного социального, культурного, экономического потенциала. В соответствии с этим провозглашена задача – формирование гибкой, подотчетной обществу системы непрерывного профессионального образования, развивающей человеческий потенциал, обеспечивающей текущие и перспективные потребности социально-экономического развития Российской Федерации. [5]

Необходимость профориентации определяется в федеральном государственном образовательном стандарте основного общего образования нового поколения, где отмечается, что школьники должны ориентироваться в мире профессий, понимать значение профессиональной деятельности в интересах устойчивого развития общества и природы.

К сожалению, многие исследования в данной области [6, 7, 8], указывают на то, что абитуриенты, поступающие в образовательные организации, руководствуются при выборе профессии не интересом к конкретной специальности, а совершенно случайными мотивами и за время обучения не овладевают в должной мере знаниями, умениями и навыками, необходимыми для успешной профессиональной деятельности. Отсутствие мотивации влияют на качества образовательного процесса, даже при высоком качестве кадрового педагогического состава. У студента не мотивированного на получение специальности, на которой он обучается, отсутствует стремление в полную силу участвовать в учебном процессе и заниматься научной деятельностью. Отсутствие интереса к получаемой профессии может привести к тому, что выпускник образовательной организации, скорее всего, не пойдет работать по квалификации, указанной в дипломе, и будет искать себя в других отраслях экономики, либо станет безработным, что будет характеризовать образовательный процесс, как неэффективный. Инвестиции в человеческий капитал, сделанные государством и родителями не принесут желаемых дивидендов. [9, с.35]

Переход к системе профильного обучения, которое ориентировано на индивидуализацию и персонализацию обучения, позволяет школе:

– ориентироваться на индивидуализацию и персонализацию обучения, а также социализацию обучающихся (в том числе с учетом реальных потребностей рынка труда);

– способствовать построению обучающимся индивидуальной образовательной траектории и предварительного самоопределения как в отношении профилирующего направления своей учебной деятельности, так и в отношении будущей профессии и статуса в обществе. [10]

В современных социально-экономических условиях отдельная городская школа, как правило, не имеет достаточных ресурсов для организации идеального формата профильного обучения [11, 12], поэтому, сегодня актуальным является необходимость организационно-структурных преобразований, которые возможно реализовать только при взаимодействии всех субъектов образовательной деятельности: семьи, школы, профессиональных образовательных организаций, работодателей, органов государственной власти и др. Данное взаимодействие, происходящее в формате социального диалога и социально–профессионального партнерства, обеспечит процесс профессиональной подготовки обучающихся и оказание помощи в организации производственного обучения и производственной практики, нивелирует разрыв между теорией и практикой, обеспечит преемственность уровней образования, изменит отношение школьников к выбору жизненного пути (создание мотивирующего пространства), создаст у школьника

представление об инженерии как сфере деятельности и будет способствовать:

− формированию навыков работы с источниками и инструментами (создание, выбор и применение соответствующих технологий, ресурсов и инженерных методик, включая прогнозирование и моделирование, для ведения комплексной инженерной деятельности в условиях определенных ограничений), актуальными для развития компетентностей, значимых для профессионального самоопределения;

− приобщению школьников к современным технологиям и производству (современная профессиональная деятельность отличается высокой сложностью, поэтому рынок труда нуждается в высококвалифицированных специалистах, хорошо разбирающихся в новейших технологиях);

− формированию навыков индивидуальной и командной работы, коммуникативных навыков;

− формированию профессиональной этики (приверженность профессиональной этике и ответственности, а также нормам инженерной практики).

Социальное партнерство в вопросах профориентационной деятельности должно стать естественной формой существования, именно оно поможет созданию условий для профессионального самоопределения и самореализации личности. Профориентационная работа должна быть системной, целенаправленной и охватывать все ступени обучения и подготовки специалиста – профессионала, конкурентоспособного на рынке труда, носителя профессиональной и общей культуры, обладающего современным экономическим сознанием. Взаимодействие всех субъектов образовательной деятельности в вопросах профориентации молодежи поможет достичь цели – формирование готовности абитуриента к обучению на инженерных направлениях подготовки и будет способствовать развитию инженерного образования в крае.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Пуанкаре А. О науке. А. Пуанкаре. М.: Наука,1990
2. Официальный сайт Правительства Хабаровского края/ Образование и наука [Электронный ресурс] // Режим доступа – URLhttps://www.khabkrai.ru/khabarovsk-krai/Razvitie-kraya/190 (дата обращения 1.03.2018).
3. Официальный сайт Агентства по развитию человеческого капитала на Дальнем Востоке //?[Электронный ресурс] // Режим доступа https://hcfe.ru/.
4. Лунина, Ю.В. Опыт проектно-исследовательской деятельности старшеклассников в системе профориентации / Лунина Ю.В., Саломатова С.Н.АНИ: педагогика и психология, 2017 том 6, №2(19), с.89
5. Сардушкина Ю. А. Повышение эффективности профориентационной работы среди учащихся старших классов в системе профилизации школы // Вестник Челябинского государственного педагогического университета. 2011. №6. С. 126-132.
6. Кузнецова В. Н. Совместная работа школы и вуза по профессиональному самоопределению учащихся : автореф. дис. . канд. пед. наук / В.Н. Кузнецова. Саратов, 2008. 22 с.
7. Поддубный А., Собко Е. Социальное партнёрство и социальная ответственность как факторы, обеспечивающие конкурентоспособность вуза // Проблемы теории и практики управления. 2009. № 9. С. 84-92.
8. Казарбин А. В., Лунина Ю. В., Ковалева Л. В., Профессиональная ориентация абитуриентов// Проблемы высшего образования: материалы междунар.науч.-метод.конф., Хабаровск, 8-10 апр.2015г./под ред. Т. В. Гомза. Хабаровск: Изд-во Тихоокеан.гос.ун-та, 2015. 297с.
9. Ковалева Л. В., Лунина Ю. В. Абитуриент как будущий субъект образовательной деятельности вуза // Проблемы высшего образования : материалы междунар. науч.-метод. конф., Хабаровск, 9-11 апр. 2014 г. / под ред. Т.В. Гомза. Хабаровск: Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, 2014. 303 с.
10. Юткина, Ю. Профильное обучение в школе. Это что такое? [Электронный ресурс] // Режим доступа – URL https://ubo.ru/articles/?cat=136&pub=1274 (дата обращения 10.05.2018)
11. Лапшина Т. Е. Проектирование и реализация профессионально-ориентированной системы обучения в профильной школе : автореф. дис. . канд. пед. наук .Воронеж, 2005. 24 с.
12. Лебедева С. Ю. Жизненное и профессиональное самоопределение школьников в условиях профильного образования: автореф. дис. . канд. пед. СПб., 2006. 23 с.

ПОДГОТОВКА СТУДЕНТОВ ПЕРВОГО КУРСА ПО ФИЗИКЕ

Г. Г. Капустина

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: g.kapustina@mail.ru

При изучении физики в высших учебных заведениях очень много времени выделяется на самостоятельную работу студентов, а для этого у них должна бать определенная база знаний. Диагностическое тестирование первокурсников, проводимое в сентябре в Тихоокеанском государственном университете показало, что 40-60 % первокурсников не владеют к началу обучения базовыми знаниями по физике. Поэтому возникает необходимость введения на первом курсе подготовительных курсов по физике и математике.

Освоение вузовского курса общей физики это необходимый этап совершенствования непрерывной подготовки, ориентированной на профессиональную компетентность будущих инженеров в области техники и технологий. Повышение качества выпускников вуза напрямую зависит от качества поступивших абитуриентов. Здесь следует отметить важность хорошей базовой подготовки по физике, полученной в школе. Занятия, проводимые со студентами, основаны на том, что они изначально должны владеть определенными навыками и умениями, позволяющими осваивать разделы физики, изучаемой в техническом вузе. Следует отметить, что такой объем знаний, который дол жен получить студент технического вуза за один или два первых курса университета значительно превышает объем знаний школьной физики, изучаемой в течение 5 лет. При изучении дисциплин следует учитывать тот факт, что минимум 50% времени обучения приходится на самостоятельную работу студентов. Однако, для того, чтобы студент мог самостоятельно изучать какие-либо темы требуется определенная база знаний.

С 2015 года в ТОГУ проводится диагностическое тестирование среднего общего образования студентов первого курса. Тестирование проводилось в первые три недели сентября. Студенты не были заранее предупреждены о готовившемся тестировании, тем самым проверялись реальные знания абитуриентов-первокурсников, с которыми им предстоит изучать физику в университете.

В 2017 году в диагностическом тестировании по физике приняли участие три факультета: ФКФН, ИСФ и ФАИТ.

Количественные показатели участия факультетов вуза в диагностическом тестировании по дисциплине «Физика» показаны на рис. 1.

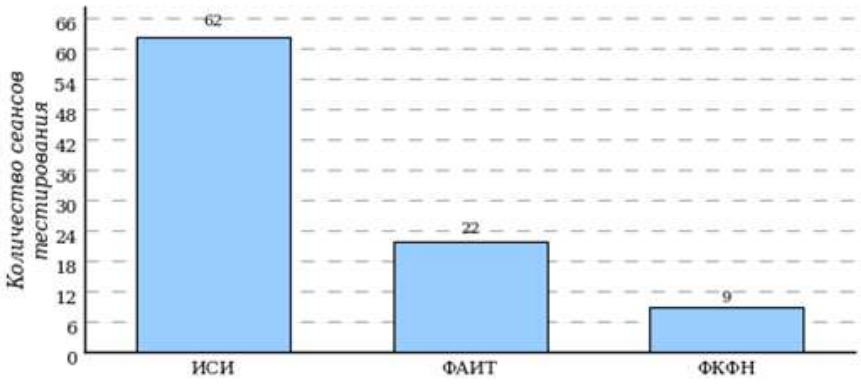


Рис. 1. Количественные показатели участия факультетов вуза

А результаты тестирования показаны на гистограмме плотности распределения результатов тестирования (рис. 2) и в таблице.

© Капустина Г. Г., 2018

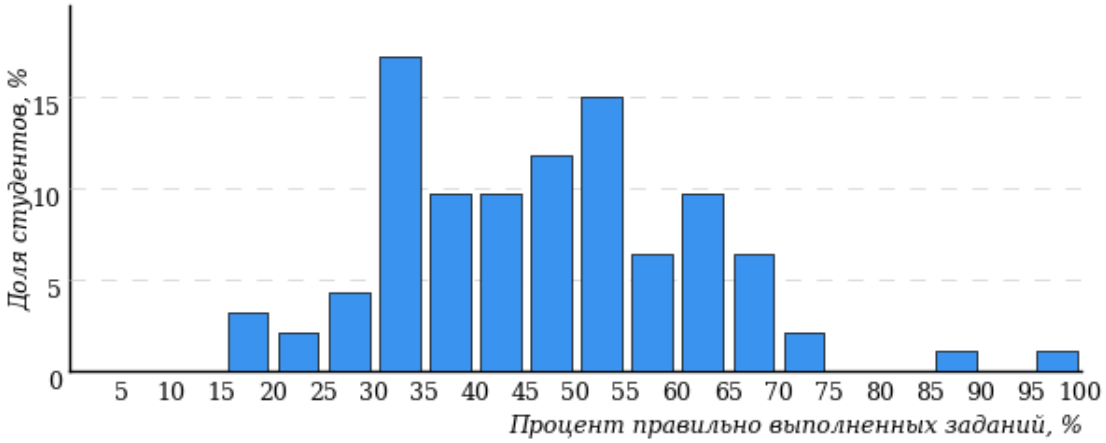


Рис. 2. Гистограмма плотности распределения результатов тестирования

Выполнение заданий

Процент правильно выполненных заданий	Доля студентов
[80%-100%]	2%
[60%-80%)	18%
[40%-60%)	43%
[0%-40%)	37%
Всего	100%

Наибольшие затруднения у студентов-первокурсников вызвали темы:

- Прямолинейное равномерное движение. Ускорение. Прямолинейное равноускоренное движение;
- Силы в механике. Гравитационная сила (закон всемирного тяготения);
- Момент силы. Условия равновесия твердого тела;
- Импульс тела. Закон сохранения импульса;
- Работа силы. Мощность. Кинетическая энергия. Потенциальная энергия. Закон сохранения механической энергии:
- Гармонические колебания (амплитуда, фаза, период, частота). Маятники (математический и пружинный). Энергия колебаний;
- Потенциальность электростатического поля. Разность потенциалов;
- Электрическая емкость. Конденсатор. Энергия электрического поля конденсатора;
- Электродвижущая сила. Внутреннее сопротивление источника тока. Закон Ома для полной электрической цепи;
- Явление электромагнитной индукции. Магнитный поток. Закон электромагнитной индукции Фарадея. Правило Ленца. Самоиндукция;
- Индуктивность;
- Интерференция света. Дифракция света. Дифракционная решетка;
- Гипотеза М. Планка о квантах. Фотоэффект. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта.

Учет результатов диагностического вводного тестирования как группы, так и отдельных студентов, позволяет преподавателю более эффективно осуществлять учебный процесс, уделяя большее внимание определенным темам, по которым показаны более слабые результаты.

Есть направления ТХОМ и ПИЭ, которые при поступлении не сдавали ЕГЭ. Знания этих студентов по физике очень низкие, первокурсники не владеют элементарными вычислительными умениями, не знают ни определений физических величин и единиц их измерений, ни формул основных законов физики (80 % в группе ТХОМ и 60 % в ПИЭ).

Введение в учебный процесс вузов образовательных стандартов нового поколения привело к повышению требований к студентам, к увеличению объема информации и интеллектуальной нагрузки. Современный студент должен быть готов к непрерывному самообразованию в изменяющихся условиях. Способность адаптироваться, найти свое место в изменившемся, новом жизненном пространстве является решающим фактором успешного развития каждого студента как человека, будущего специалиста. Этим определяется исследовательский и практический интерес к проблеме адаптации студентов – первокурсников к условиям обучения в высшей школе.

Существует много определений феномена адаптации. В обобщенном виде адаптация описывается как приспособление, необходимое для адекватного существования в изменяющихся условиях, а также, как процесс включения индивида в новую социальную среду, освоение им специфики новых условий [1].

Выделяют три формы адаптации студентов младших курсов к условиям вуза:

1. Адаптация формальная, касающаяся познавательного информационного приспособления студентов к новому окружению, к структуре высшей школы, к содержанию обучения в ней, ее требованиям, к своим обязанностям.

2. Общественная адаптация, т.е. процесс внутренней интеграции групп студентов-первокурсников и интеграции этих же групп со студенческим окружением в целом.

3. Дидактическая адаптация, касающаяся подготовки студентов к новым формам и методам учебной работы в высшей школе [2] .

Специфика процесса дидактической адаптации в высшем учебном заведении определяется различием в методах обучения и в его организации в средней школе и в вузе, что порождает своеобразный отрицательный эффект – дидактический барьер. Первокурсникам не хватает различных навыков и умений, которые необходимы для успешного овладения программой. Проходит немало времени, прежде чем студент приспособится к условиям обучения. Многими это достигается слишком большой ценой. Отсюда и низкая успеваемость на первом курсе и большой отсев по результатам сессии.

В 2012 году руководством ТОГУ было принято решение о проведении курсов выравнивания по физике и математике. Целью данного курса является ликвидация пробелов в школьных знаниях, повторение основных базовых законов, подключение к изучению нового материала, подготовка студентов к промежуточной, межсессионной аттестации. По плану курсы выравнивания делятся на два этапа: недельные курсы, которые проводятся в первую неделю семестра и представляют собой практические занятия (примерно 8 – 12 часов в неделю) и семестровые курсы выравнивания (1-2 часа в неделю). В программу курсов выравнивания включены основные разделы курса физики и математики средней школы. Большое внимание уделяется решению задач. Но, к сожалению, сегодня эти курсы не проводятся (сокращение часов).

Подводя итоги вышеизложенного, мы считаем, что курсы выравнивания являются эффективным средством адаптации студентов первокурсников, так как:

1. Способствуют ускорению и усовершенствованию процесса адаптации первокурсников к обучению в вузе в рамках дисциплины «Физика»..

2. Создают условия для познавательно-информационного приспособления студентов к новому окружению, структуре высшей школы, содержанию обучения в ней, её требованиям, своим обязанностям.

3. Способствуют процессам внутренней интеграции групп студентов – первокурсников, готовят студентов к новым формам и методам учебной работы в высшей школ [3].

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Андреева Д. А. О понятии адаптация. Исследование адаптации студентов к условиям учебы в вузе // Человек и общество: Уч. записки XIII. - Л.: ЛГУ, 973, с. 62-69
2. Мороз А. Г. К вопросу о дидактической адаптации первокурсников вуза // Психологические и социально-психологические особенности адаптации студентов. Ереван, 1993. С.104-109.
3. Швец Н. Л. Курсы выравнивания как эффективное средство адаптации первокурсника // Швец Н.Л., Капустина Г. Г., Казарбин А. В. В сборнике: Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование материалы XII Региональной научной конференции. 2013. С. 357-359.

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ КАК ИНСТРУМЕНТ ФОРМИРОВАНИЯ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ

О. В. Козачкова

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: kontes@list.ru

В статье рассматриваются способы организации самостоятельной работы студентов с применением виртуальной обучающей среды Moodle, способствующие формированию профессиональных компетенций.

Концептуальной основой современного высшего профессионального образования, закрепленной в его образовательных стандартах, является компетентностная модель будущего специалиста. В отличие от распространенной ранее квалификационной модели, где главной целью и результатом образования объявлялось овладение знаниями, умениями и навыками, компетентностная модель предполагает *трансформацию знаний, умений, навыков в определенные компетенции,* которые потребуются выпускнику вуза в его дальнейшей профессиональной деятельности [1-3].

Обладание профессиональными компетенциями проявляется в *готовности* использовать усвоенные знания, умения и навыки, а также способы и опыт деятельности для решения теоретических и практических (профессиональных) задач [2]. Другими словами, компетенция – есть понятие, не тождественное совокупности знаний, умений и навыков. Это то психологическое новообразование, которое формируется как в процессе обретения знаний, так и в опыте их использования в квазипрофессиональной деятельности (например, в ходе производственной практики, в проектной деятельности и др.).

Формирование компетенций – сложный педагогический процесс, предполагающий высокую степень активности обучаемых, осознание их личной ответственности за результаты обучения. Важнейшую роль в процессе преобразования знаний в компетенции играет самостоятельная учебная и исследовательская работа студентов [4].

Мы склонны считать, что готовность к применению полученных знаний в профессиональной деятельности в значительной мере детерминирована *степенью самостоятельности* студентов в ходе овладения этими знаниями на этапе обучения. Поэтому реализация компетентностного подхода к подготовке будущих специалистов диктует необходимость серьезных изменений, прежде всего, в организационной и процессуальной составляющих учебного процесса в вузе. Действительно, в новых образовательных стандартах наблюдается смещение акцентов в область предметно-практической деятельности, в которой, собственно, и формируются общие и профессиональные компетенции. Это нашло отражение в тенденции уменьшения традиционной аудиторной нагрузки (прежде всего, лекционных часов) и увеличения объема самостоятельной работы студентов. Данное обстоятельство поставило в повестку дня новую научно-педагогическую задачу: создание базы методического сопровождения и технического обеспечения самостоятельной работы студентов, как деятельности по самообразованию, нацеленной на получение опыта решения образовательных задач в отсутствии прямого руководства этой деятельностью.

Собственно, самостоятельная работа всегда была одной из традиционных форм учебной деятельности, она дает студентам ценный опыт действия в ситуации новизны и неопределенности. Однако в повседневной практике реализуемое содержание самостоятельной работы не связано напрямую с целями формирования конкретных компетенций [4]. Кроме того, при наличии положительной, в целом, мотивации к познанию, студенты не готовы к преодолению естественных трудностей, сопряженных с процессом самообразования. Они слабо владеют навыками работы с научной и учебной литературой, не эффективно используют разнообразные ресурсы, а главное – ограничиваются механической работой (например, написанием конспекта), видя свою задачу в воспроизведении знаний-фактов, а не постижении знаний-смыслов. В итоге зна-

© Козачкова О. В., 2018

чительный объем заданий, предлагаемых студентам, не выполняется вообще или выполняется формально, а иной раз просто списывается с различных доступных источников.

Таким образом, выявляется существенное противоречие между требованием «быть компетентным в использовании полученных знаний» и реальным положением эту «готовность» продемонстрировать, поскольку отсутствует опыт деятельности, формирующей такую готовность. Из сказанного следует, что самостоятельная работа студентов может стать действенным инструментом формирования профессиональных компетенций, если в основе ее организации лежит иное целеполагание: она должна быть построена таким образом, чтобы каждый студент мог получить позитивный личный опыт преодоления трудностей, связанных с процессом познания. Самостоятельная работа должна быть специальным образом организована, предлагая студенту определенные траектории движения в потоках информации и разнообразных ресурсов, используя которые он получит гарантированный результат за разумное время. Результатом следует считать освоение дидактической единицы (темы, раздела и т.п.) на уровне применения знаний в соответствующей предметной области.

В настоящее время появились и получают все большую популярность программные продукты, предназначенные для организации системы дистанционного обучения. К таким продуктам относится виртуальная обучающая среда Moodle. Она обладает широкими возможностями для построения образовательного курса и обеспечения контроля продвижения обучаемых на каждом его этапе, фиксируя промежуточные результаты обучения. Используя данное вебприложение, студенты могут осуществлять самообучение в любое удобное время и в любом месте, где есть точки доступа в интернет.

Образовательный курс удобно структурировать по разделам, каждый из которых отражает определенную ступень в продвижении к цели. Мы рассматриваем как оптимальный вариант 4 раздела (в зависимости от предмета, содержания и дидактической цели их может быть больше). Приведем пример.

Раздел 1. Функция: познакомить студентов с теоретическими основаниям изучаемой темы. Раздел содержит следующие опции: основной текст, гиперссылки на учебники и пособия с указанием параграфов, рекомендуемых для ознакомления или конспектирования, видео (видеодемонстрации, видеофильмы или видеолекции), анимации или интерактивные модели. Завершается раздел тестом, цель которого – проверить уровень осведомленности студентов в вопросах теории (знание формул, законов, концепций).

Раздел 2. Функция: научить применять знания по предлагаемым алгоритмам. Раздел содержит задания 1-го уровня, требующие выполнения репродуктивных действий, предполагающих работу с шаблоном или известным алгоритмом, который подробно описывается или раскрывается в приводимых примерах. В завершение раздела – тест, составленный из заданий такого уровня.

Раздел 3. Функция: научить применять знания, используя сочетания алгоритмов и элементы эвристики. Раздел содержит задания 2-го уровня, это комплексные задания, имеющие формализованный смысл. Для их выполнения необходимо понять внутренние связи и механизм действия законов, описывающих изучаемое явление. В завершение раздела – тест, составленный из заданий такого уровня.

Раздел 4. Функция: научить применять знания, создавая собственный алгоритм. Раздел содержит задания 3-го уровня, представляющие собой творческие задачи или мини-проекты, имеющие неформализованный смысл. В предлагаемых примерах приводятся *варианты* разработки алгоритма решения, поскольку в таких заданиях нет единственно верного решения. Результат всегда детерминирован целеполаганием или способом функционирования изучаемой системы. В завершение раздела – приводится перечень заданий данного уровня, студенту предлагается выполнить 1-2 по выбору.

Предложенное выше структурирование процесса самообучения позволяет дать более взвешенную оценку академической успеваемости студента. Например, выполнение только заданий репродуктивного уровня 1-2 соответствует оценке «удовлетворительно», выполнение 1-2-3 уровней – оценке «хорошо», выполнение 1-2-3-4 уровней – оценке «отлично».

Образовательная среда Moodle обладает интерактивными возможностями и позволяет студенту общаться с преподавателем и сокурсниками в режиме чата и форума, что способству-

ет формированию у студентов коммуникационных навыков, умению работать в команде.

В заключении отметим, что компетентность в конкретной предметной области предполагает не только осведомленность о существовании некоторого явления, но и *понимание механизма функционирования* тех законов, что лежат в его основании. Студенты *должны упражняться* не только в воспроизведении теоретических законов, но и в решении разнообразных практических задач, объяснении различных ситуаций, в том числе связанных с будущей профессиональной деятельностью, где эти законы работают.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Шадриков В. Д. Новая модель специалиста: инновационная подготовка и компетентностный подход // Высшее образование сегодня. 2004. № 8. С.26-31.
2. Атлягузова Е. И. Компетентностная модель специалиста технического профиля // Вектор науки ТГУ, Серия: Педагогика и психология. №1(8). 2012. С. 43-47.
3. Козачкова О. В. Модель высшего профессионального образования: на перекрестке эпох. Пленарный доклад // Сб. тезисов докладов региональной науч.-метод. конференции: «Образовательная среда ВУЗа: ресурсы, технологии» - Благовещенск: Изд-во АмГУ , 2006 . С.3-7.
4. Трущенко Е. Н. Организация самостоятельной работы студентов вуза на основе компетентностного подхода к профессиональной подготовке специалистов: диссертация канд. пед. наук: 13.00.08. Москва, 2009. 168 с.

ПРОБЛЕМЫ И ДОСТИЖЕНИЯ СОВРЕМЕННОЙ СИСТЕМЫ ЭЛЕКТРОННОГО ОБУЧЕНИЯ

И. Б. Копылова

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
г. Благовещенск, e-mail: kopylovaib@list.ru

Появление новых компьютерных технологий широко проникает во все сферы деятельности. Происходит это и в высшем образовании. Появилось много работ посвященных проблемам электронного образования. В данной статье сделана попытка обобщения положительных и отрицательных сторон электронного обучения.

Несомненно, появление глобальных информационных сетей значительно разнообразит нашу жизнь, позволяет найти информацию по любому вопросу, общаться с коллегами, студентами. Введение новых методик обучения, в том числе и электронного обучения значительно расширяет возможности преподавателя при разработке заданий для студентов в процессе освоения дисциплины, проверки заданий.

Создавая новые методики, часто забывают о том, что же такое ЗНАНИЕ. Умение находить достоверную информацию, пользоваться электронными ресурсами – это только один из элементов подготовки к получению знаний по тем или иным вопросам. Как показывает практика студент, порой, находит такой ответ на вопрос, который является неверным, это означает отсутствие у студента понятий о достоверности информации, отсутствии некоторой базы знаний, необходимых для успешного освоения дисциплины.

Знание подразумевает возможность решить любую практическую задачу даже при отсутствии источников информации, способность найти нужные источники информации в случае недостатка знаний для решения практической задачи, критически подойти ко всем аспектам проблемы, решить ее наиболее рациональным способом. В глобальной сети невозможно найти способ разрешения реальной ситуации, так как вероятность повторения описанных ситуаций очень мала. Одной из задач преподавателя остается научить студента учиться!

Возникает еще один аспект в получении знаний: может ли студент учиться и готов ли он к самообразованию? Ответ на этот вопрос можно и нужно искать на этапе школьного образова-

© Копылова И. Б., 2018

ния. Тестовая система оценки знаний, на мой взгляд, не способствует к формированию навыков получения знаний и желания к самообразованию. Если желание к самообразованию может возникнуть течение жизни, то навык получения знаний формируются с самых ранних этапов обучения. Знание – это не возможность угадать правильный ответ на тестовое задание, а прежде всего осмысление конкретной ситуации и решение проблемы на основе ранее полученных навыков использования законов, умения их применения, анализа подобных ситуаций. Знание остается с человеком навсегда и может использоваться им на протяжении всей жизни. Чем разнообразнее и полнее полученные знания, тем больше возможностей для освоения новых профессий, расширения кругозора и карьерного роста.

Получить навыки освоения знаний в высшей школе невозможно только самостоятельно, как это предполагается делать в процессе электронного обучения, но и в процессе вербального общения с преподавателем. Работа в студенческой группе при выполнении коллективных практических заданий, к которым относится выполнение лабораторных работ, кейс-заданий, проведении круглых столов, форумов и других видов коллективной и индивидуальной работы также способствует формированию навыков получения нового знания.

Исключение из образования психологического и эмоционального аспекта также приводит порой к очень негативным последствиям: неумению общаться с преподавателем, неумению общаться в коллективе, неумению самоутвердиться. Очень часто именно личность преподавателя, его знание предмета, отношения к предмету, умения ответить на вопрос студента так, чтобы студент разобрался в вопросе и смог воспроизвести полученную информацию, определяет отношение студента к изучаемой дисциплине. Именно преподаватель может объяснить, почему и зачем изучается данная дисциплина, где можно использовать полученные знания, как решаются типовые практические задачи.

Повсеместное внедрение в учебный процесс электронных методов обучения и создание на их основе электронно-информационной образовательной среды вуза (ЭИОС) [1] значительно расширяет возможности преподавателя в плане разработки проверочных заданий, контроля за выполнением, общения со студентом или студенческой группой online или ofline. Такая система является отличным организатором и помощником для самостоятельной работы студентов, так как позволяет свободно использовать электронные ресурсы информации [2]. Студент, таким образом, имеет возможность изучения любых дисциплин, пользуясь любыми электронными источниками информации, а ЭИОС обеспечивает оптимальность данного процесса.

Использование ЭИОС должно быть обеспечено наличием такой системы в вузе, соответствующим уровнем материально-технического обеспечения и подготовленным персоналом. Кроме того и преподаватель должен иметь соответствующие знания и возможность работы в данной среде. Таким образом, преподаватель должен совмещать несколько функций: разрабатывать рабочую программу дисциплины, готовить курс лекций, практических и лабораторных заданий, контрольных заданий и т.д., и при этом еще совмещать функции тьютера. Это практически невозможно при современной системе планирования работы преподавателя. Это значит, что в систему нужно включить значительное число дополнительного персонала, компетентного в широком диапазоне преподаваемых в вузе дисциплин.

Кроме того, поддержание работы ЭИОС в вузе нуждается и в законодательной поддержке [3]. Новые стандарты по многим направлениям подготовки включают в себя положения об электронном обучении, но это не обеспечивает всей полноты данного понятия, а главное, не дает полного представления об этом виде обучения. Организация ЭИОС в вузе требует полной перестройки работы преподавателя, выделения дополнительного времени и ресурсов для возможности использования в процессе обучения новых методик и возможностей информационно-коммуникативных технологий.

Отсутствие у студента способности воспроизводить свои знания – это тоже проблема современной системы образования. Студенты, в подавляющем большинстве, не могут воспроизводить информацию, полученную с электронного носителя! Это проявляется даже в невозможности пересказать сюжет художественного произведения, прочитанного с интересом. Что же можно сказать о более сложных вопросах? Несмотря на наличие электронных библиотек, огромного объема информации на различных сайтах в интернете, студенты не могут пользоваться этой информацией. Кроме того, в случае, если нужная информация найдена, студенты не умеют установить подлинность и

надежность электронно-информационной образовательной системы вуза.

Как преподаватель при чтении лекций используются презентации. Анализ результатов усвоения учебного материала позволяет сделать неутешительные выводы. Студент списывает со слайда, не слушая при этом, что говорит преподаватель. Пока не напомнишь о том, что же надо записать (не вся информацию на слайде) – не напишут. Теряется навык конспектирования, вывода соотношений, умение выделить главное. Поэтому не нужно сразу отказываться от изложения части учебного материала на доске, показу лекционных демонстраций и т.д. Смена способов представления материала позволяет не потерять интерес к лекции, а, следовательно, усвоить некоторый объем информации на занятии.

Опыт работы студентов в виртуальной лаборатории показывает, что студенты лучше усваивают теоретический материал, осваивают модельные представления, решают задачи при самостоятельном изменении параметров. Однако, в реальной ситуации они часто даже включить установку не могут, не могут пользоваться измерительными приборами, собирать электрические цепи, то есть у инженера отсутствуют инженерные навыки. Парадокс! Одна из основных целей обучения в высшей школе – получение практических навыков в будущей профессии. Без работы на реальных установках таких навыков не получить.

С другой стороны опыт работы высшей колы в нашей стране насчитывает не одно десятилетие. Разработанные методики преподавания оправдывают себя и до настоящего времени. Качество подготовки студентов всегда было высоким именно благодаря тому, что все методики и методология обучения были направлены на получение студентом прочных знаний и практических навыков. Кроме того, мировоззрение специалиста формировалось таким образом, чтобы у него не угасало желание учиться дальше, совершенствовать знания в выбранной области деятельности, осваивать смежные профессии. Нельзя отказываться от этого опыта.

Но и новые методики тоже должны развиваться и внедряться в процесс обучения. Однако, нельзя внедрять новые методики обучения, в том числе и электронное обучение, без тщательного анализа того, к чему приведет их использование, что реально усвоят студенты, как они будут применять свои знания на практике. Это не один и не два года, это значительно более долгий срок.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Сатунина А. Е.. Электронное обучение: плюсы и минусы // Современные проблемы науки и образования. 2006. № 1. С. 89-90
2. Исаева Е. С., Фех А. И., Коновалова Н. И., Чернышева Т. А.. Электронное обучение как способ организации самостоятельной работы студентов // Педагогические науки. №1 (67). 2017. С 197-199.
3. Можаева Г. В.. Электронное обучение в вузе: современные тенденции развития// Гуманитарная информатика. Вып. 7. 2013. С. 126-138

РАЗВИТИЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ СТУДЕНТОМ ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В МЕДИЦИНСКОМ ВУЗЕ

С. С. Костенко

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный медицинский университет»
г. Хабаровск, e-mail: svetlanakostenko@mail.ru

В статье рассматриваются возможности совместного, комплексного и системного развития студентом основных составляющих профессиональных компетенций, а именно, знаний, умений, навыков и опыта, на занятиях по физике в медицинском вузе. Основным видом самостоятельной учебно-познавательной деятельности студента, развивающим все компоненты профессиональных компетенций мы считаем выполнение будущими специалистами лабораторного физического практикума.

© Костенко С. С., 2018

В настоящее время модернизация высшего образования требует «не давать образование» будущим выпускникам вузов, а создавать возможности для «нарабатывания» ими образования, что должно повысить качество профессиональной деятельности специалиста, развить у них способности ориентироваться и находить решения в сложных зачастую непредсказуемых, рабочих ситуациях, уметь прогнозировать последствия своей деятельности, нести ответственность за принимаемые решения и действия.

Содержание высшего профессионального образования в современном мире сформулировано в логике компетентностного подхода. Так, компетентностная модель врача представлена в Федеральном государственном образовательном стандарте высшего профессионального образования. В ФГОС ВПО третьего поколения по направлению подготовки «Лечебное дело» и «Педиатрия» входит общая дисциплина «Физика, математика», при изучении которой ставится задача формирования не только общих компетенций, но и профессиональных, а именно, задача развития способности и готовности будущего специалиста к работе с медико-технической аппаратурой, используемой в работе с пациентами, владению компьютерной техникой, получению и изучению научно-медицинской информации из различных источников, участию в освоении современных теоретических и экспериментальных методов исследования, созданию новых перспективных средств в медицине.

Компетенции включают в себя такие основные составляющие как знания, умения, навыки и опыт. Целью нашего исследования стало выявление способа обучения студентов на занятиях физики и математики, когда создавались бы условия комплексного и системного развития всех компонентов компетенций.

Личностное развитие человека, происходит в активном взаимодействии с окружающим миром, в процессе которого идет развитие структур высших психических функций, интеллектуальных реакций, следовательно, для успешного развития компетенций необходима активность студента [1]. Активность индивида проявляется, прежде всего, в деятельности. Мы согласны с М.С. Коган, что деятельно-практическое взаимодействие индивида со средой определяет преимущества выбора личностью вектора развития своего внутреннего мира и внешних самоизменений [2]. Главной особенностью человеческой деятельности является постановка перед собой цели, и затем сознательное ее достижение [3]. Целенаправленная и осознанная деятельность обучающегося предполагает его самостоятельность. Подтверждение нашей точки зрения мы находим в трудах К.Д. Ушинского, указывающего, что «самостоятельность головы учащегося – единственное, прочное основание всякого плодотворного учения» [4].

Действительно, самостоятельность дает уверенность молодому человеку в своих силах, проявляется в его умении сознательно ставить перед собой определенные цели и добиваться их достижения, опираясь на собственные силы и проявляя волю. Принимая во внимание, что образованность человека есть системообразующее ядро любого вида его деятельности, что основным видом развития компетенций является учебная работа студента, что с помощью учебной деятельности можно охватить всех учащихся, мы пришли к выводу, что именно самостоятельная учебно-познавательная деятельность студента есть форма наиболее эффективного развития им как общих, так и профессиональных компетенций.

Так как физический эксперимент стимулирует целенаправленную активность личности, мы в качестве основного вида самостоятельной учебно-познавательной деятельности студента на первом курсе выбрали выполнение им лабораторных работ. Структура деятельности студента при выполнении лабораторной работы состоит из следующих этапов: мотивация, целеполагание, планирование, выполнение, рефлексия и коррекция, приводящие к получению результатов. Алгоритм выполнения лабораторной работы и алгоритм деятельности врача при диагностировании и лечении больного похожи, следовательно, реализуется контекстное обучение, в котором создаются возможности для развития студентом компетенций профессиональной деятельности.

Устраняя противоречие между «абстрактным характером учебной деятельности и предметом предстоящей профессиональной деятельности» будущего специалиста мы отобрали лабораторные работы, позволяющие развивать способность и готовность у студента к работе с медико-технической аппаратурой, используемой при работе с пациентом, а также применяемой для решения профессиональных задач.

При подготовке к занятиям студентам предлагаются темы для поисковой деятельности в интернете, научной литературе с целью повышения мотивации, углубления знаний и расширения кругозора. Такая самостоятельная работа развивает у будущих специалистов умения, навыки, опыт поисковой, исследовательской деятельности.

В начале каждого занятия преподаватель и студенты совместно обсуждают мотивационный аспект необходимости изучения данной темы для будущих работников здравоохранения, определяют цель занятия. Затем, до выполнения лабораторной работы идет подробный разбор теоретического материала по теме лабораторной работы, заслушиваются дополнительные сообщения. Рассмотрение теории заканчивается самоконтролем знаний студентом с помощью компьютерных программ. Такая деятельность студента создает возможности для более глубокого изучения физических явлений и закономерностей, лежащих в основе функционирования аппаратов, а также познание будущим специалистом характера влияния физических факторов, создаваемых с помощью медицинских аппаратов на состояние процессов, протекающих в организме человека. Кроме того, молодые люди получают опыт правильного, рационального и эффективного применения медицинской аппаратуры для диагностики и лечения заболеваний, что создает перспективы для поиска в будущем специалистом новых методов и методик, развития рационализаторства в своей профессиональной деятельности.

При выполнении лабораторной работы мы применяем групповую форму деятельности решения проблемы студентами, что дает им опыт совместной работы в коллективе.

В конце занятия обязательный анализ в совместном обсуждении полученных результатов и выводов, сделанных студентами. Обсуждаются также другие возможные методы выполнения данного эксперимента, их преимущества и недостатки. В завершении занятия преподаватель дает качественную оценку деятельности каждого студента.

Для подтверждения правильности наших воззрений мы выбрали контрольные группы, где проводили занятия по описанной выше методике. Результаты эксперимента показали, что у студентов повысилась мотивация к образованию в вузе, значительно улучшились мануальные навыки, опыт обработки результатов с использованием компьютерной техники. Анализ деятельности студентов в итоговой части лабораторных занятий показал, что в этих группах на 10% уменьшилось число студентов с низким уровнем экспериментальных умений (выполнение заданий при поддержке преподавателя, неверная последовательность действий); на 8% увеличилось число молодых людей со средним уровнем экспериментальных умений (верная последовательность выполнения всех действий и операций, сущность которых до конца не осмыслена) и выделилось 2% студентов с высоким уровнем, когда выполнение всех действий было в правильной последовательности, сущность которых осмыслена. Только в последнем случае умения являются обобщенными.

Таким образом, ориентация учебного процесса на самостоятельную учебно-познавательную деятельность студентов, отбор материала при изучении дисциплины «Физика, математика» на расширение и углубление профессионально-прикладных знаний, способствуют повышению эффективности развития как общетеоретических, так и профессиональных компетенций, что создает возможности для развития у студентов способности и готовности к практической и рационализаторской работе в будущей профессиональной деятельности.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Выгодский Л. С. Педагогическая психология. М.: Мысль. 1996.
2. Коган Н. Л. Цель и смысл жизни человека. М.: Мысль. 1984.
3. Леонтьев А. Н. Деятельность. Сознание. Личность. М.: Мысль. 1982.
4. Ушинский К. Д. Избранные педагогические сочинения. М.: Мысль. 1953.

ОСОБЕННОСТИ ПРОГРАММЫ МАГИСТРАТУРЫ «ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ» В ТИХООКЕАНСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

В. И. Римлянд, К. А. Драчев

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: 000292@pnu.edu.ru

Рассматривается структура и особенности программы магистратуры «Физика конденсированного состояния» по направлению «Физика» в Тихоокеанском государственном университете.

В настоящее время в Российской Федерации фактически завершен переход на двухуровневую систему высшего образования бакалавриат – магистратура. За 15 лет прошедших с присоединения России к Болонской системе образования, произошли существенные изменения в системе высшего образования РФ. 24 октября 2007 года Президент России подписал закон о введении в России двухуровневой системы высшего образования. Согласно статье 6 ФЗ «О высшем и послевузовском профессиональном образовании» в Российской Федерации устанавливаются следующие ступени высшего профессионального образования: высшее профессиональное образование, подтверждаемое присвоением лицу, успешно прошедшему итоговую аттестацию, квалификации (степени) «бакалавр»; высшее профессиональное образование, подтверждаемое присвоением лицу, успешно прошедшему итоговую аттестацию, квалификации «дипломированный специалист»; высшее профессиональное образование, подтверждаемое присвоением лицу, успешно прошедшему итоговую аттестацию, квалификации (степени) «магистр».

Суть бакалавриата – в самостоятельном формировании студентом своей образовательной траектории. Однако бакалавриат в России существенно отличается от западноевропейского. При поступлении в бакалавриат западного вуза студент не обязан выбирать себе специализацию – достаточно ведущей основной дисциплины (major). Его даже трудно отнести к конкретному факультету. Студент получает подготовку по общенаучным дисциплинам. И лишь на старших курсах соотношение профессиональных и выбираемых студентом дисциплин «по интересам» изменяется в пользу профессиональных [1]. У бакалавра на Западе, в отличие от магистра, гораздо больше предметов по выбору, чем обязательных профессиональных предметов. В большинстве вузов РФ, включая Тихоокеанский государственный университет (ТОГУ), при переходе от специалитета к бакалавриату произошло сжатие учебных планов с пяти лет к четырем. При этом в наибольшей степени «пострадали» дисциплины общенаучного и общеинженерного циклов (для технических направлений). При этом уже на первом и втором курсах в ряде направлений введены специальные дисциплины. В связи с этим и переход с одного факультета на другой в России затруднен, равно как и выбор дисциплин на другом факультете. Заканчивая бакалавриат в России по определенному профилю студент фактически получает узкую специализацию.

Выше сказанное в значительной степени относится и направлению бакалавриата «Физика» в ТОГУ. Однако, уже изначально при открытии специальности «Физика» в 2006 году в основу учебного плана был положен принцип подготовки специалистов достаточно широкого профиля в области физики и информационных технологий. Была выбрана специализация «Информационные системы в физике». По нашим данным это единственная подобная специализация на тот момент в вузах России. Данная концепция была сохранена при переходе к бакалавриату по направлению «Физика» в 2012 году. Был выбран аналогичный профиль «Информационные системы в физике». Студенты данного профиля направления «Физика» получают хорошую подготовку по всем разделам общей физики (шесть семестров), теоретической физике, высшей математике, а также по дисциплинам информационного блока, которые изучаются с первого по восьмой семестр. Соответственно, выпускники имеют возможность: работать организациях, связанных с физическими исследованиями или применением информационных технологий, или продолжить образование в магистратурах различных направлений. Анализ трудоустройства выпускников более чем за десять лет показывает правильность сделанного выбора

© Римлянд В. И., Драчев К. А., 2018

специализации и профиля в условиях Хабаровского края и Дальневосточного региона в целом.

Магистратура представляет собой вторую ступень высшего образования, позволяющая углубить специализацию по определенному профессиональному направлению. В РФ количество мест в магистратуре, финансируемых за счет бюджетов различных уровней в 2017 г., увеличилось по сравнению с 2014 г. почти в три раза (табл. 1) [2,3], при этом доля специалитета сокращается. То есть, не смотря на критические отношение многих ответственных за образование лиц к переходу на болонскую систему, можно говорить о целенаправленной политике государства на развитие бакалавриата и магистратуры.

Таблица 1

Количество мест в университетах, финансируемых за счет бюджетных средств в бакалавриате, специалитете и магистратуре 2014-2017 гг. [2,3]

Уровни высшего образования	Количество мест в университетах, финансируемых за счет бюджетных средств (тыс. чел.)			
	2014	2015	2016	2017
Бакалавриат	328,8	327	326,3	299
Специалитет	69,6	71,2	74,6	71
Магистратура	67,6	108,6	259,3	205,8
Итого:	466	506,8	660,2	575,8

Магистратура в РФ, как и бакалавриат, отличается от западной, которая дает более специальное, практическое образование. Как сказано выше, в нашей стране профессиональное образование студент получает уже в бакалавриате, а магистерские программы отличает в более широкая подготовка в выбранном направлении.

Магистратура по направлению «Физика» в ТОГУ на кафедре физики была открыта в 2016 году - программа «Физика конденсированного состояния» (ФКС). При ее открытии учитывался опыт подобных программ в других вузах России. Программа «ФКС» открыта в большинстве университетов РФ, в которых ведется подготовка по направлению «Физика». За рубежом также во многих университетах открыта подобная магистратура, например, в бухарестском университете (România University-of-Bucharest) - магистр в области физики материалов и наноструктур, в университете города Лионин (Liaoning-University-of-Technology) - магистр по физике и химии материалов. Проведенный авторами анализ показывает, большинство подобных программ магистратуры ориентированы на физику наносистем, материаловедение, физику полупроводников, кристаллофизику и явления переноса в твердых телах. При формировании учебного плана рассматриваемой программы магистратуры в ТОГУ учитывался ряд факторов:

1. Возможность организации практики и последующего трудоустройства в научных лабораториях Хабаровского научного центра ДВО РАН;

2. Потребность в кадрах высокой квалификации в области ФКС и смежных областях в организациях Хабаровского края и Дальневосточного региона в целом;

3. Возможности лабораторной базы и кадров ТОГУ;

4. Наличие специалистов соответствующего профиля в организациях г. Хабаровска;

5. Получение компетенций, позволяющих выпускникам быть востребованными в областях близким к ФКС. В качестве данного направления выбрано применение физических методов в неразрушающем контроле. Данное направление выбрано в связи с тем, что в Хабаровском крае специалисты данного профиля востребованы на предприятиях авиационной и судостроительной промышленности, а также наличием большого количества трубопроводных систем, требующих постоянного контроля за их техническим состоянием.

Подготовка в магистратуре также предусматривает возможность работать выпускникам в качестве преподавателей в вузе и поступление в аспирантуру по направлению «Физика и астрономия».

Исходя из данных требований учебный план можно условно разделить на несколько блоков.

1. Блок педагогики высшей школы, включающий дисциплины: Педагогика высшей школы, Современные проблемы физики, Практикум по методике преподавания физики в высшей

школе, История и методология физики, Олимпиадные задачи по физике и Педагогическая практика.

2. Блок дисциплин по углубленному изучению физики твердого тела: Квантовая теория твёрдого тела, Физика оптических явлений в кристаллах, Магнитные свойства конденсированных сред, Курсовая работа по НИР-1: Физика конденсированных сред и Курсовой проект по НИР-1: Физика конденсированного состояния вещества.

3. Дисциплины по изучению методов исследования структуры твердых тел: Методы исследования структуры твёрдых тел, Спец.физ.практикум: Исследование структуры твёрдых тел, Взаимодействие лазерного и ионизирующего излучения с веществом.

4. Дисциплины формирующие компетенции в области применения физических методов в неразрушающем контроле: Введение в физическую акустику (относится и ко второму блоку), Применение физических методов в неразрушающем контроле, Специальный физический практикум: Физические методы неразрушающего контроля.

5. Альтернативой четвертому блоку являются дисциплины, связанные с углубленным изучением методов компьютерного моделирования в конденсированных средах: Квантовая теория твёрдого тела, Дополнительные главы математики: Теория групп, Компьютерное моделирование в конденсированных средах, Квантовая теория многочастичных систем, Численное моделирование физических процессов в конденсированных средах, Специальный практикум: Численное моделирование физических процессов в конденсированных средах, Курсовая работа по НИР-2: Квантовая теория конденсированных сред, Курсовой проект по НИР-2: Квантовая теория конденсированных систем. Большинство дисциплин из пятого блока являются альтернативными по отношению к четвертому.

В соответствии со стандартом ФГОС3+ по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» (магистратура) от 28.08.2015 г. [4] объектами профессиональной деятельности выпускников являются:

- физические системы различного масштаба и уровней организации, процессы их функционирования
- физические, инженерно-физические, биофизические, химико-физические, медико-физические, природоохранительные технологии
- физическая экспертиза и мониторинг

Рассматриваемый учебный план вполне соответствует данным объектам профессиональной деятельности. Это также относится и к видам профессиональной деятельности выпускников. Выпускники, освоившие программу магистратуры по направлению подготовки 03.04.02 «Физика», готовятся к следующим видам профессиональной деятельности: 1. научно-исследовательская; 2. педагогическая; 3. научно-инновационная; 4. организационно-управленческая. Первые два являются основными для рассматриваемой программы. Выпускник, освоивший рассматриваемую программу магистратуры, должен обладать профессиональными компетенциями (ПК), соответствующими именно этим двум видам профессиональной деятельности. В соответствии со стандартом для научно-исследовательской деятельности это ПК-1: способностью самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта. Для педагогической деятельности это ПК-6: способностью методически грамотно строить планы лекционных и практических занятий по разделам учебных дисциплин и публично излагать теоретические и практические разделы учебных дисциплин в соответствии с утвержденными учебно-методическими пособиями при реализации программ бакалавриата в области физики; и ПК-7: способностью руководить научно-исследовательской деятельностью в области физики обучающихся по программам бакалавриата.

Фактически набор дисциплин учебного плана рассматриваемой программы формирует и компетенции, относящиеся к научно-инновационной деятельности ПК-2: способностью свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности; и ПК-3: способностью принимать участие в разработке новых методов и методических подходов в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности. В этой части

учебный план, по нашему мнению, полностью соответствует стандарту.

Как выше было сказано, при выборе программы и составлении учебного плана учитывалась возможность трудоустройства выпускников. Этот вопрос непосредственно связан с организацией практик в процессе учебы. В таком качестве можно рассматривать лаборатории институтов ДВО РАН в Хабаровске: Институт материаловедения – имеет в своем составе несколько лабораторий материаловедческой направленности и Центр прикладного материаловедения (совместно с ТОГУ); Институт тектоники и геофизики имеет в своем составе лабораторию физико-химических методов исследования и Хабаровский инновационно-аналитический центр, который специализируется на изучении химического состава, структуры горных пород и минералов методами ICP-MS, оптической микроскопии, растровой электронной микроскопии с рентгеновским микроанализом, рентгено-флюоресцентной спектроскопии и другие. Также базой для прохождения практики и трудоустройства может быть Хабаровский филиал ВНИИФТРИ (бывший Дальстандарт), специализирующийся в частности на акустических измерениях в твердых средах и неразрушающем контроле. Достаточно хорошей лабораторной базой располагает и ТОГУ.

Возвращаясь к теме сравнения магистратуры в РФ и за границей, можно сослаться на анализ в работе [5], где проводиться сравнительный анализ магистратуры в РФ и за рубежом, и делаются следующие основные выводы: 1. российские магистерские программы в большей части регламентированы ФГОС, чем зарубежные, что является одной из ключевых причин медленного внедрения нового учебного материала; 2. российские программы магистратуры более фундаментальные, чем практикоориентированные; 3. российские преподаватели имеют много дополнительных видов работ, не связанных с преподаванием программы, что отрицательно сказывается на их подготовке к занятиям и качестве разрабатываемого материала; 4. зарубежные студенты получают узкопрофильную подготовку, российские студенты более академическую.

Первый и третий вывод являются очевидными для всех, кто связан с работой в вузах России, и не обсуждается в данной статье. Второй и четвертый вывод не в полной мере относится к рассматриваемой программе магистратуры. Возможность узкой специализации и практическую подготовку магистранты могут в достаточной степени получить в рамках выполнения курсовых проектов и работ. При этом темы и руководителей студенты могут выбрать самостоятельно из предлагаемого достаточно широкого перечня. Это в полной мере относится и к практикам - 55 зачетных единиц (з.е.). В сумме практики, КР и КП составляют 60 з.е., что составляет половину учебного плана и значительно больше половины зачетных единиц, которые непосредственно относятся к физике.

Программы дисциплин четвертого блока составлены таким образом, что они в полной мере опираются на дисциплины, относящиеся к физике твердого тела и общей физике (изученной в бакалавриате). Например, программа дисциплины Применение физических методов в неразрушающем контроле в основном построена на основе знаний о магнитных и акустических свойствах твердых тел. Специальный физический практикум: Физические методы неразрушающего контроля построен на основе лабораторных работ, которые можно также в значительной степени отнести к изучению физических свойств твердых тел. Практикум включает работы: Физические основы ультразвуковой толщинометрии, Эхо-импульсивный метод ультразвуковой дефектоскопии, Изучение работы классического дефектоскопа, Изучение принципов работы ультразвуковых дефектоскопов с антенными решетками, Магнитные параметры контроля магнитомягких и магнитотвердых металлов и сплавов. Практикум укомплектован современными приборами, которые в большинстве случаев реально используются на производстве и для научных исследований. Это дает возможность студентам ознакомиться с устройством и принципами работы достаточно сложных приборов, а также получить практические навыки работы с ними.

Таким образом, магистерская программа «Физика конденсированного состояния», открытая в ТОГУ, отвечает требованием как государственного стандарта, так и современным требованиям подготовки высококвалифицированных кадров по направлению «Физика». Основные проблемы функционирования данной магистратуры, связаны с набором и его качеством. Выпуск бакалавров по направлению «Физика» в ТОГУ достаточно ограничен (5-7 человек в год), при этом значительная часть из них ориентирована на поступление в магистратуру централь-

ных вузов России. Привлечение выпускников бакалавров из других вузов региона ограничивается двумя основными факторами: низким престижем в настоящее время профессий, связанных с естественными науками, и наличием «конкурирующих» программ магистратуры в Хабаровске и Владивостоке.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Вахитов Р. Болонский процесс в России. // Электронный журнал Новые Знания Online, 2014, URL: http://novznania.ru/archives/5883.
2. Стукалова И. Б. Развитие магистратуры в России: предпосылки, проблемы и перспективы // Современное образование. 2018. № 3. С.1-8. DOI: 10.25136/2409-8736.2018.3.26892. URL: http://e-notabene.ru/pp/article_26892.html.
3. Svodnyi otchet po forme federal'nogo statisticheskogo nablyudeniya № VPO-1. [Elektronnyi resurs] / Rezhim dostupa: minobrnauki.rf/ministerstvo/statistika/informatsiya-2017/vo-2017.
4. Приказ Министерства образования и науки РФ от 28 августа 2015 г. № 913 “Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 03.04.02 Физика (уровень магистратуры)” URL: http://fgosvo.ru/uploadfiles/fgosvom/030402.pdf.
5. Баринова Н. В. Магистерские программы в России: теория и практика // Иннов: электронный научный журнал, 2017. №3 (32). URL: http://www.innov.ru/science/economy/magisterskie-programmy-v-rossii-teo/

РОЛЬ ФИЗИКИ ПРИ ОЧИСТКЕ СТОЧНЫХ ВОД

Ю. О. Сапожникова, Г. Г. Капустина

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
г. Хабаровск, e-mail: g.kapustina@mail.ru

Данная работа содержит материалы, связанные с очистными сооружениями поселка городского типа (пгт.) Кокуй. Рассмотрены приборы, используемые на предприятии, а также методы очистки сточных вод.

Очистка сточных вод – комплекс мероприятий по удалению загрязнений, содержащихся в бытовых и промышленных сточных водах. Очистные сооружения нужны нашему поселку для очистки сточных вод. После очищения их от вредных веществ вода попадает в реку, после чего идет в другие населенные пункты. Представьте себе, что бы могло быть, если бы вся неочищенная вода сразу поступала в реку. При таком раскладе мы бы не избежали экологической катастрофы.

Но для качественной очистки воды необходимы знания физики и умение работать с физическими приборами. Необходимо уметь делать необходимые вычисления и расчеты. На очистных сооружениях используют несколько этапов очистки сточных вод, что позволяет выбрасывать в реку Шилка максимально очищенную воду.

Очищение происходит в несколько этапов.

Первый этап механический. Производится предварительная очистка поступающих на очистные сооружения сточных вод с целью подготовки их к биологической очистке. На механическом этапе происходит задержание нерастворимых примесей.

Сооружения для механической очистки сточных вод состоят из решётки (или УФС — устройство, фильтрующее самоочищающееся) и сита, песколовки, первичных отстойников, мембранных элементов и септиков.

Для задержания крупных загрязнений органического и минерального происхождения применяются решётки и для более полного выделения грубодисперсных примесей — сита. Максимальная ширина прозоров решётки составляет 16 мм. Отбросы с решёток либо дробят и направляют для совместной переработки с осадками очистных сооружений, либо вывозят в места обработки твёрдых бытовых и промышленных отходов. Затем стоки проходят через песко-

© Сапожникова Ю. О., Капустина Г. Г., 2018

ловки, где происходит осаждение мелких частиц (песок, шлак, бой стекла т. п.) [3].

Стоки со всего поселка через насос попадают в песколовки с определенной скоростью. Песколовки имеют форму круга и стоки под давлением (р = 1,6 кг/см^2) и с определенной скоростью движения начинают двигаться под действием центростремительной силы, которую рассчитывают по формуле: $F = \frac{mv^2}{r}$. Все твердые вещества оседают на стенках песколовок, а потом с помощью насоса выбрасываются на иловые площадки. Песок из песколовок обычно складируется или используется в дорожных работах.

Очищенные таким образом сточные воды переходят на первичные отстойники для выделения взвешенных веществ. Отстойники – это железобетонные резервуары глубиной пять метров и диаметром 40 метров.

При осмотре отстойников произведён расчет максимальной массы воды, которую способны вместить отстойники.

$m = \rho \cdot V, \quad V = S_{\text{осн}} \cdot h, \quad S_{\text{осн}} = \pi R^2$

$S_{\text{осн}} = 3{,}14 \cdot 20 \text{ м}^2, V = 1256 \text{ м}^2 \cdot 5 \text{ м} = 6280 \text{ м}^3$

$\rho = 1000 \text{ кг/м}^3, m = 1000 \text{ кг} \cdot 6280 \text{ м}^3 = 6280 \text{ т}.$

Там с помощью аэротенок (воздух, подающийся по трубам диаметром 4 метра) происходит следующий этап очистки. С помощью турбин, которые рассчитаны на давление 1,6 кг/см^2 , из подвального помещения воздух под давление 0,5 кг/см^2 (5000Па) и t = 200 ℃ подается в первичные отстойники. Силу, с которой воздух выбрасывается в отстойники можно рассчитать по формуле:

$F = p \cdot S, \; S = \pi R^2$

$S = 3{,}14 \cdot 2 \text{ м}^2 = 12{,}56 \text{ м}^2, \quad F = 5000 \text{ Па} \cdot 12{,}56 \text{ м}^2 = 62{,}8 \text{ кН}.$

Под действие данной силы все твердые вещества поднимаются на поверхность и задерживаются металлическими решётками, которые стоят между отстойниками.

Затем вода переходит во вторичный отстойник, где специально размножают бактерии, которые очищают воду от загрязнений.

В результате механической очистки удаляется до 60-70 % минеральных загрязнений. Кроме того, механическая стадия очистки важна для создания равномерного движения сточных вод (усреднения) и позволяет избежать колебаний объёма стоков на биологическом этапе.

На данном этапе был произведен осмотр приборов и их физических параметров для механической очистки воды. Также произведен расчет массы воды, которую может принять отстойник. И рассчитана сила выброса воздуха из аэротенок.

Второй этап биологический. Биологическая очистка предполагает деградацию органической составляющей сточных вод микроорганизмами (бактериями и простейшими). На данном этапе происходит минерализация сточных вод, удаление органического азота и фосфора, главной целью является снижение БПК5 (биохимическая потребность в кислороде через 5 суток). Могут использоваться как аэробные, так и анаэробные микроорганизмы.

С технической точки зрения различают несколько вариантов биологической очистки. На данный момент основными являются активный ил (аэротенки), биофильтры и метантенки (анаэробное брожение).

В их центры снизу подаются стоки, осадок собирается в центральный приямок проходящими по всей плоскости дна скребками, а специальный поплавок сверху сгоняет все более легкие, чем вода, загрязнения, в бункер.

Также в биологической очистке, после первичных отстойников, существует вторая линия радиальных отстойников. Это илососы. Они предназначены для удаления активного ила со дна вторичных отстойников очистных сооружений промышленных и хозяйственных стоков.

Третий этап физико-химический. Для улучшения параметров очистки могут быть применены различные химические методы, как, например, дополнительная седиментация фосфора солями Fe и Al, хлорирование, озонирование, а также физико-химические методы, такие как электрофлотация или эвапорация.

Для анализа берется вода из отстойников и с помощью фотометра определяют длину волны, плотность от концентрацию. Далее после каждого этапа очистки сточных вод в лабораторию попадают пробы воды, с которой снимают результаты. Пройдя все этапы очистки, вода

берётся ещё раз на анализ и сравнивается с нормами наличия различных веществ.

Для анализа очищенной воды и сравнения её с нормами она отправляется в лабораторию. Для начала электронасосом (рис. 1, *а*) очищенную воду избавляют от твердых примесей. Примеси сушат в термостате (рис.1, *б*) и взвешивают. С помощью фотометра (рис.1, *в*) измеряют длину волны нитратов, аммиака, фосфатов и т. д.

а *б* *в*

Рис. 1. Электронасос (*а*), термостат (*б*), фотометр (*в*)

В кювету наливают очищенную и дистиллированную воду и запускают прибор. С помощью полученных результатов были построены графики (рис. 2, рис. 3) зависимости плотности (Д) от концентрации (С), находящихся в воде примесей на каждом этапе очистки. По графикам сравнили полученные результаты (самая низкая точка, находящаяся на графике) с нормами безопасно очищенной воды (табл.1). Все результаты соответствуют нормам измерений. И количество примесей в очищенной воде не превышает норму, что констатирует о безопасности воды для организмов при сбросе ее в реку Шилка.

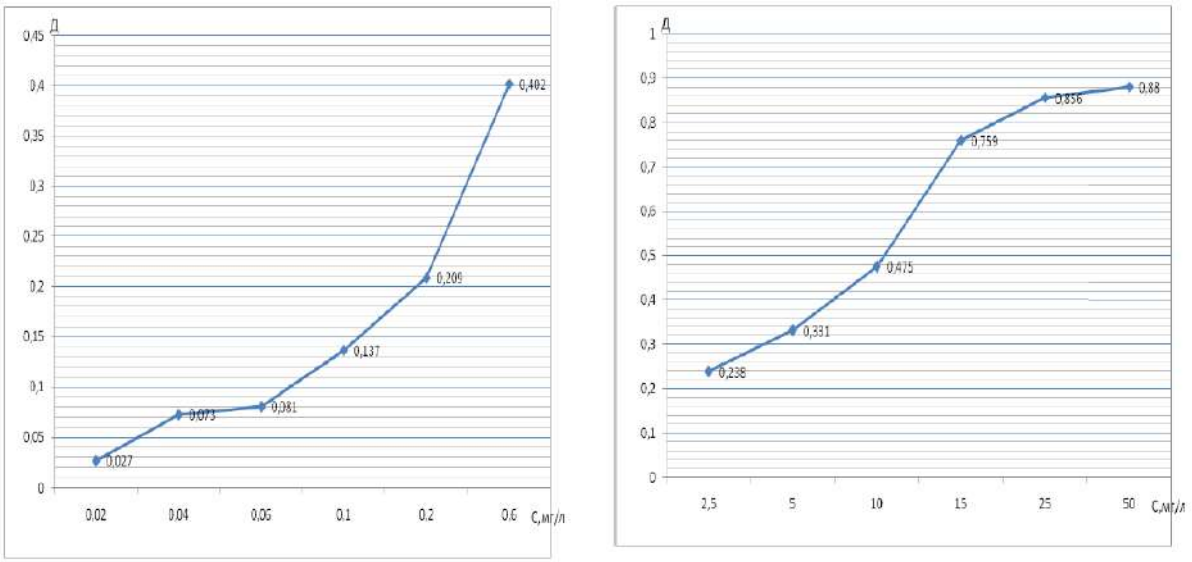


Рис. 2. Зависимость плотности от концентрации

Таблица 1

Зависимость плотности концентрации

Нитриты	сброс	0,08 мг/л
Нитраты	сброс	40 мг/л
Аммиак	сброс	0,4 мг/л

В данном исследовании произведены физические расчеты некоторых величин, необходимых для бесперебойной работы очистных сооружений. Также рассмотрены многие физические приборы. На основании выше изложенного можно сделать вывод о том, что даже очистка сточных вод не может производиться без знаний элементарных законов физики, без навыков работы с физическими приборами и, конечно же, необходимо знание многих физических явлений (тяготение, диффузия, трение), чтобы в реку Шилка выбрасывалась чистая вода, которая никогда не сможет привести к экологической катастрофе.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Инженерная защита поверхностных вод от промышленных стоков: Учеб. пособие/Д.А. Кривошеин, П. П. Кукин, В. Л. Лапин и др. М.: Высшая школа, 2003. 344 с.
2. Очистка производственных сточных вод: Учеб. пособие для вузов/С.В. Яковлев, Я.А. Карелин, Ю.М. Ласков, Ю. В. Воронов; Под ред. С. В. Яковлева. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Стройиздат, 1985. 335 с.
3. Очистка сточных вод [электронный ресурс] http://ru.pages.wikia.com/wiki/%D0%9E%D1%87%D0%B8%D1%81%D1%82%D0%BA%D0%B0_%D1%81%D1%82%D0%BE%D1%87%D0%BD%D1%8B%D1%85_%D0%B2%D0%BE%D0%B4
4. Туровский И. С. Обработка осадков сточных вод. – М.: Стройиздат, 1988. 256 с.

ЭТАПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ КОМПЕТЕНЦИИ БУДУЩЕГО ВРАЧА ПРИ ИЗУЧЕНИИ ФИЗИКИ

А. С. Стукалова

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный медицинский университет»
г. Хабаровск, e-mail: stukalovaanna@mail.ru

В настоящее время в образовательной среде широко применяется компетентностный подход. В работе описаны этапы формирования одной из общепрофессиональной компетенции при изучении физики студентами специальности 31.05.01 лечебное дело. Предложены примеры компетентностно-ориентированных заданий для отдельных уровней освоения компетенции.

Неотъемлемой частью нормативно-методического обеспечения системы оценки качества освоения студентами различных специальностей и направлений своей основной профессиональной образовательной программы является фонд оценочных средств. Фонд оценочных средств включает в себя перечень компетенций, которыми должны овладеть обучающиеся в результате освоения образовательной программы. Система общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций, которые формируются в течение обучения в вузе и развиваются на протяжении всей профессиональной деятельности, должна сочетаться с описанием показателей и критериев оценивания компетенций, а также шкал оценивания.

Полная оценка компетенций выпускника осуществляется на государственной итоговой аттестации. В процессе же текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации, как правило, проводится оценивание более локальных результатов обучения – компонентов компетенций (знаний, умений, навыков).

© Стукалова А. С., 2018

В медицинском вузе дисциплина «Физика, математика» изучается студентами специальности 31.05.01 лечебное дело на первом курсе, при этом полное становление ОПК-7 (готовность к использованию основных физико-химических, математических и иных естественнонаучных понятий, и методов при решении профессиональных задач) происходит на старших курсах. В связи с этим представляется возможным объективно проследить только начальные этапы формирования данной компетенции у обучающегося. При этом преподаватель способен оценить результаты выполнения студентами компетентностно-ориентированных заданий физико-математического профиля через систему накопления пороговых баллов.

Особенность компетенции, как результата образования, состоит в том, что она является интегрированным результатом обучения, проявляется и существует в форме деятельности [1]. Фактически в процессе взаимодействия преподавателя и обучающегося происходит оценивание уровня компетентности данного студента, который можно измерить при помощи конкретного критерия.

Оптимальным путем формирования системы оценки качества подготовки обучающихся при реализации компетентностного подхода является сочетание традиционных методов и средств проверки знаний, умений, навыков и инновационных подходов, ориентированных на комплексную оценку формирующихся компетенций.

Авторами работы [2] после анализа компетенций как комплексных многокомпонентных образовательных сущностей было предложено следующие качественные уровни освоения студентами компетенций: воспроизведение, восприятие, применение, творчество. На уровне воспроизведения студент запоминает и пробует воспроизвести учебный материал дисциплины, уровень восприятия предполагает осмысление изучаемого материала. Умение применять изученный материал в стандартных ситуациях – признак следующего уровня освоения компетенций. И, наконец, уровень творчества, в основе которого – стремление студента к выполнению поисковой и исследовательской деятельности. Диагностика результатов обучения, задаваемых с помощью компетенций, сопровождается балльно-рейтинговой системой оценивания, порядок перевода которой в традиционную шкалу оценивания подробно обсуждается в [3].

Предлагаемые уровни освоения компетенции ОПК-7 через модуль «Механические колебания и волны»:

1. Воспроизведение

Планируемый результат обучения (показатели освоения компетенции): обучающийся может узнавать основные понятия при повторном восприятии информации, находить в них различия, знает источники получения информации, выполняет задания по образцу.

Процедура оценивания: тестирование, собеседование, письменные ответы на вопросы.

Формулировка задания:

А) Тест:

1. К физическим характеристикам звуковых волн относят:
- громкость
- частоту
- высоту тона
- тембр
- интенсивность

2. К физиологическим характеристикам звуковых волн относят:
- громкость
- частоту
- длину волны
- тембр
- интенсивность

…

Б) Тематические базовые вопросы:
- Вспомните и напишите определение ультразвуковых колебаний, способы их генерации.
- Какую величину составляет интенсивность волн при УЗ хирургии?

…

Балльно-рейтинговая система оценивания: максимальное количество баллов за 10 тестовых

заданий – 10 баллов. Максимальное количество баллов за 5 базовых вопросов – 10 баллов. Итого при демонстрации уровня воспроизведения обучающийся получает максимально 20 баллов.

Формы и методы обучения: лекции, практические занятия.

2. Восприятие

Планируемый результат обучения (показатели освоения компетенции): обучающийся понимает, может объяснить цель и интерпретировать результаты заданий, умеет самостоятельно выполнять действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации.

Процедура оценивания: выполнение базового практического задания, собеседование в форме коллоквиумов.

Формулировка задания:

А) Практические задания:

- Вычислите период и частоту колебаний по заданному графику.
- Определите логарифмический декремент затухания по указанным амплитудам колебаний.

…

Б) Собеседование:

- Поясните первичный и вторичный механизм действия УЗ волн на вещество.
- В чем заключается метод УЗ сварки тканей?

…

Балльно-рейтинговая система оценивания: максимальное количество баллов за 5 практических заданий – 10 баллов. Максимальное количество баллов за 10 устных вопросов – 20 баллов. Итого при демонстрации уровня восприятия обучающийся получает максимально 30 баллов.

Формы и методы обучения: лекции, практические занятия, лабораторные работы, самостоятельная подготовка.

3. Применение

Планируемый результат обучения (показатели освоения компетенции): может проводить аналогии, видеть взаимосвязи понятий, сравнивать, систематизировать, устанавливать границы применения имеющихся знаний. Умеет самостоятельно выполнять действия по решению нестандартных задач.

Процедура оценивания: выполнение заданий лабораторного практикума, собеседование по работе с устной защитой теоретических вопросов.

Формулировка задания:

А) Лабораторные задания:

- Вычислите экспериментально скорость УЗ волны в воде.
- Постройте кривую порога слышимости.

…

Б) Индивидуальное собеседование:

- Поясните физические основы тональной и речевой аудиометрии.
- Выявите принципы, лежащие в основе применения УЗ в диагностике и хирургии.

…

Балльно-рейтинговая система оценивания: максимальное количество баллов за выполнение лабораторной работы – 15 баллов (подготовка к работе, выполнение эксперимента, оформление результатов). Максимальное количество баллов за собеседование – 15 баллов (анализирует, раскрывает особенности, сравнивает и обосновывает явления). Итого при демонстрации уровня применения обучающийся получает максимально 30 баллов.

Формы и методы обучения: лекции, практические занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа с учебным материалом.

4. Творчество

Планируемый результат обучения (показатели освоения компетенции): Может анализировать, синтезировать, критически оценивать информацию. Выполняет исследовательские задания, в ходе которых строятся новые суждения, используются инновационные технологии.

Процедура оценивания: индивидуальные задания, рефераты, эссе, доклады на научно-студенческую конференцию.

Формулировка задания:

А) Предложение студенту выдвинуть новые варианты измерения параметров механических волн в различных средах.

Б) Подготовка эссе на темы:

- Ультразвуковая аутогемотерапия;
- Особенности ультрафонофореза.

…

Балльно-рейтинговая система оценивания: максимальное количество баллов за творческое задание – 20 баллов (разрабатывает план, раскрывает особенности, предлагает новые способы решения задач, оценивает значимость полученных результатов).

Формы и методы обучения: традиционные формы обучения с самостоятельной проработкой дополнительного учебного материала, активные и интерактивные методы обучения.

Для каждого результата обучения преподавателем готовятся контрольные вопросы, задачи, задания, правильные ответы на которые должны объективно свидетельствовать о достижении заданного уровня результата обучения. При реализации учебных заданий могут применяться электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

Можно отметить, что в процедуре оценивания задания расположены в порядке возрастания сложности исполнения, менее мотивированные студенты с низкой теоретической базой могут не набрать максимальное количество баллов, но все равно достаточно хорошо освоят данную тему.

К ожидаемым результатам можно отнести формирование у студентов способности применять знания и умения, приобретенные при изучении дисциплины, при решении научно-исследовательских, творческих, профессиональных задач. К достигаемым уровням знаний – понимание основных понятий и характеристик механических колебаний и волн, способов их описания. Достигаемые уровни умений: могут пояснять принцип работы аппаратов для УЗ-терапии и диагностики, объяснять причины и взаимосвязи физических явлений. Достигаемые уровни личностных качеств: ответственность, трудолюбие, творческий подход к выполнению задания, активность и готовность студента самостоятельно проводить научно-исследовательскую работу.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Фишман И. С. Подходы к оценке уровня сформированности ключевых компетентностей учащихся // Научно-методический журнал «Методист». 2007. №2. С.13-16.
2. Шехонин А. А., Тарлыков В. А., Клещева И. В. Компетентностно-ориентированные задания в системе высшего образования. СПб: НИУ ИТМ. 2014. С.99.
3. Татур Ю. Г. Как повысить объективность измерения и оценки результатов образования // Высшее образование в России. 2010. № 5. С. 22-31.

СОДЕРЖАНИЕ

Секция «Общая и техническая физика. Оптика»

Авербух Б. Б., Новикова Е. Е., Пономарева М. С.
Магнитное зеркало в модели молекулярной оптики …….. 3

Авербух Б. Б., Пономарева М. С.
Выход области существования обратных волн за пределы метаматериала как одна из причин невозможности реализации идеальной суперлинзы …….. 6

Аникеев Г. А., Гончарова П. С., Сюй А. В.
Приемник импульсов ультракороткой длительности …….. 8

Бондарева Т. В., Егоршин И. Н., Круглов М. С.
Сравнительный анализ интегральной светимости ЕВЧР в неоне в различных условиях ……... 10

Вегера Д. В., Шиманчук К. А., Писаренко В. П., Евтушенко А. А.
Физические аспекты применения измерительных преобразований для экологического мониторинга прибрежного угольного терминала ……. 12

Драчёв К. А., Савченко В. В.
Устройство для профилактики профессиональных заболеваний специалистов IT-сферы в бытовых условиях ……... 16

Жвикова А. А., Овчарук В. Н.
Организация периодического мониторинга на устройствах автоматики и телемеханики с помощью тепловизионного контроля ……. 20

Зайцев А. В., Макаревич К. С., Каминский О. И., Кириченко Е. А.
Автоматизация измерения и методика исследования каталитической активности порошковых фотокатализаторов с разной степенью дисперсности …….. 24

Захаров И. С., Жиба Г. В., Сай С. В.
Анализ влияния водной среды на структуру принимаемого сигнала в гидроакустическом канале связи ……..... 28

Калинов Д. Г., Римлянд В. И.
Особенности аппаратно-программного комплекса калибровки фазового интерполятора прецизионного измерителя временных интервалов на основе FPGA с учетом температуры …….. 32

Красников И. В., Сетейкин А. Ю.
Анализ процессов рассеяния излучения в клеточных суспензиях ……. 35

Криштоп В. В., Попова А. В., Гончарова П. С., Сюй А. В., Палатников М. Н., Максименко В. А., Ливашвили А. И.
Определение толщины кристаллических пластинок по интерференционной картине в белом свете ……. 39

Ливашвили А. И., Криштоп В. В., Костина Г. В., Брюханова Т. Н., Ящук О. И.
Светоиндуцированная динамика наночастиц в жидкофазной среде ……. 42

Михеенко А. В., Андреев А. И.
Взрывное пульсационное вскипание воды под действием микрочастиц, нагретых лазерным излучением ……. 46

Нащочин Е. О., Штарев Д. С., Штарева А. В., Сюй А. В.
Висмутаты стронция $Sr_2Bi_2O_5$ и $Sr_6Bi_2O_{11}$: зависимость энергии Урбаха и «Урбаховских фокусов» от температуры …….. 49

Нестеров В. И.
Сравнение результатов приема сигналов СДВ-диапазона на различных трассах … 53

Овчарук В. Н., Марченко О. А.
Моделирование процесса генерации сигналов акустической эмиссии в многоканальных системах ……... 56

Павлов В. А., Овчарук В. Н.
Исследование быстродействия элементов аппаратно-программного комплекса многоканальной регистрации в акустико-эмиссионных системах серии «EMIS» ... 60

Павлов В. А., Овчарук В. Н.
Опыт применения среды графического программирования LABVIEW в многоканальных акустико-эмиссионных системах …….. 64

Рябинкин К. С., Пупатенко В. В.
Анизотропия и резонансные эффекты в спектре сейсмических волн (район Бурейской ГЭС) …….. 68

Хе В. К., Иванов В. И., Сырников Д. А.
Формирование тонкопленочной структуры при светоиндуцированном осаждении наночастиц в жидкости ……... 72

Шведов С. А.
Светоиндуцированное движение микрочастицы ……. 74

Штарева А. В., Нащочин Е. О., Штарев Д. С.
Фотокаталитическая активность гетероструктур $Sr_6Bi_2O_{11}/SrCO_3$ ……. 76

Секция «Теоретическая физика и вычислительная математика»

Аврашенко А. В., Верхотурова И. В.
Моделирование воздействия ионов космической плазмы на полимерные пленки .. 81

Алёшин М. С., Прохоренко А. В.
Моделирование процессов рассеяния с использованием библиотеки OPEN SOURCE PHYSICS …….. 85

Аллилуев А. Д., Белоконь В. И., Лапенков Р. В.
Магнитное упорядочение в двухподрешеточных системах: метод случайных полей взаимодействия ……. 88

Бурков С. М., Зайцев А. С.
Соотношение подходов к описанию резонансных явлений в процессах ионизации атомных систем …… 92

Гниденко А. А.
Моделирование сдвигового разрушения в сплаве TiAl при легировании вольфрамом и хромом ……. 97

Дудин А. Н., Нещименко В. В.
Моделирование воздействия протонов на оксид цинка в программном комплексе GEANT4 ……... 102

Зайцев А. С., Андреев А. И., Крамарь Е. И., Зайцев С. А.
Потенциальное рассеяние в представлении параболических квазиштурмовских функций …… 105

Капитан В. Ю., Пержу А. В., Садаев Ф. А., Васильев Е. В., Нефедев К. В.
Изучение многослойных магнитных пленок суперкомпьютерными вычислительными методами 110

Колпаков А. И., Зыков В. П.
Проектирование и моделирование термоэлектрического генератора 112

Кузьменко А. П., Лин Ко Ко , Хохлов Н. А.
Квантово-механический расчёт параметров малых кластеров металлов меди и никеля 115

Куценко М. И., Овчарук В. Н.
Использование метода сингулярного анализа при обработке акустико-эмиссионных данных 119

Мазур А. И., Алипченко А. С.
Исследование резонансного рассеяния $\eta\alpha$ в модельной задаче методом АССС ... 123

Мазур А. И. , Белозеров А. О.
Моделирование рассеяния квантовых частиц в полюсном разложении S-матрицы .. 126

Мазур А. И., Мазур Е. А.
Метод поиска полюсов S-матрицы на основе теоремы Коши 131

Макаров А. Г., Шаповалова К. В., Нефедев К. В.
Монте-Карло моделирование перемагничивания массива ферромагнитных нанопроволок 134

Молоканов Б. М., Драчёв К. А., Римлянд В. И.
Конечно-элементное моделирование распространения ультразвука в COMSOL MULTIPHYSICS 137

Падалко М. А., Нефедев К. В.
Быстрый метод точного расчета конечных решеток магнитных моментов в модели Изинга 140

Петров А. С., Кузьменко А. П., Хохлов Н. А.
Расчет в рамках теории функционала плотности геометрии кластеров алюминия .. 144

Ульянычева В. Ф., Ульянычев Н. В.
Построение и исследование моделей тепловлагообмена в воздушном потоке на сложной поверхности 147

Чибисов А. Н., Чибисова М. А.
Примесные центры фосфора в силицене как квантовые кубиты для будущих квантовых компьютеров 150

Шевченко Ю. А., Нефедев К. В.
Остаточная энтропия спинов Изинга на разбавленной решетке пирохлора во внешнем магнитном поле 153

Секция «Физика конденсированных сред»

Адамова М. Е., Жуков Е. А., Каминский А. В.
Обратный магнитоэлектрический эффект в композитах на основе бората железа .. 155

Андроникова Д. А., Вахрушев С. Б.
Межмодовое взаимодействие и фазовые переходы в антисегнетоэлектриках и в твердых растворах антисегнетоэлектрик-сегнетоэлектрик 159

Антонов А. А., Барышников С. В., Егорова И. В.
Линейные и нелинейные диэлектрические свойства композита $(C_6H_{16}IN)_{0.9}/(BaTiO_3)_{0.1}$ …… 165

Барышников С. В., Стукова Е. В.
Исследование сегнетоэлектрического фазового перехода DTGS в пористых матрицах Al_2O_3 …… 169

Дубов В. Л., Герман А., Фомин Д. В.
Формирование тонкой пленки $BaSi_2$ на Si(111) методами реактивной и твердофазной эпитаксий …….. 173

Жуков Е. А., Жукова В. И., Каминский А. В.
Комплексный резонанс в акустике …… 175

Жуков Е. А., Жукова В. И.
Взаимодействие доменной границы при движении в ортоферрите иттрия с магнитными и продольными акустическими волнами ……. 177

Копылова И. Б., Бадяй Д. В.
Определение параметров облученного электронами кристалла ТГС в модели Джилла-Атертона …… 181

Кузьменко А. П., Чжо Аунг Хеин, Хохлов Н. А.
Электрохимический синтез композита CuO и многостенных углеродных нанотрубок ……..……. 185

Ланкин С. В.
Влияние механической обработки на термическую дегидратацию природного клиноптилолита ……... 188

Меределина Т. А., Барышников С. В.
Адсорбция 3,4-бензпирена порошками сегнетоэлектриков …….. 191

Милинский А. Ю., Барышников С. В., Егорова И. В.
Размерные эффекты в сегнетоэлектрике DIISOPROPYLAMMONIUM IODIDE, внедренном в опаловые матрицы …….……. 196

Стукова Е. В., Ефимова О. В., Голубева И. А., Зотова О. В.
Влияние параметров силикатных матриц на диэлектрические свойства внедренного в них нитрита натрия …… 200

Секция «Физическое материаловедение»

Астапов И. А., Ершова Т. Б., Власова Н. М., Кириченко Е. А., Кулик М. А.
Исследование структуры и свойств сплавов системы Ti-Al-SiC, полученных методом порошковой металлургии ……... 205

Бурков А. А., Пячин С. А., Власова Н. М., Кулик М. А.
Влияние концентрации карбида кремния на износ TI-AL электроискровых покрытий на титановом сплаве Ti_6Al_4V ……. 208

Дворник М. И., Михайленко Е. А.
Влияние содержания углерода на образование градиента в твердом сплаве ……... 212

Каминский О. И., Макаревич К. С. , Зайцев А. В., Пячин С. А., Кириченко Е. А., Астапов И. А.
Формирование и исследование композиции $SrBi_{4-y}O_{7-z}$ / ½y$(BiO)_2CO_3$ в процессе фотокаталитической деструкции метилен синего ……... 214

Кириченко Е. А., Каминский О. И., Зайцев А. В., Пячин С. А., Макаревич К. С., Крутикова В. О.
Исследование оптических и морфологических характеристик изоморфных форм оксида висмута, полученных методом пиролиза его органо-минеральных комплексов ……... 218

Коваленко С. В., Козырь А. В., Коневцов Л. А., Николенко С. В.
Исследование формирования легированного слоя и его свойств при механизированном электроискровом легировании стали Х12Ф1 модельными материалами ……..… 221

Колпаков А. И., Кузьменко А. П., Абакумов П. В., Тант Син Вин
Наноструктурированные особенности и свойства магнетронной пленочной термопары Ni + NiCr ……... 226

Маленко Д. С.
Исследование светоиндуцированного рельефа на поверхности жидкости ……... 229

Одинокова О. А., Доко А. А.
Экспериментальное исследование древесины как материала, разносопротивляющегося растяжению-сжатию …….. 232

Пикуль О. Ю., Сидоров Н. В., Теплякова Н. А., Палатников М. Н.
Анализ оптической однородности кристаллов $LiNBO_3$:Zn (4.5 МОЛЬ. %) с использованием лазерного коноскопического метода ……. 235

Пячин С. А., Ершова Т. Б., Бурков А. А., Власова Н. М., Астапов И. А., Кириченко Е. А., Кулик М. А.
Формирование покрытий новым методом электроискрового осаждения из гранул алюминида титана с модифицирующими добавками …….. 237

Сидоров Н. В., Палатников М. Н., Теплякова Н. А., Сюй А. В.
Оптические свойства кристаллов ниобата лития ……. 241

Филимонов А. В., Вахрушев С. Б., Политова Г. А., Ravi Kumar
Экспериментальное исследование механизма формирования полярных нанодоменов в одноосных релаксорах $Sr_{1-x}Ba_xNb_2O_6$ …….. 244

Чигрин П. Г., Кириченко Е. А.
Нанесенный на брикетированный диоксид титана молибдат меди как катализатор окисления сажистого углерода ……... 248

Секция «Физическое образование (школьное и вузовское)»

Горбанева Л. В.
Методические принципы структурно-логического подхода к систематизации знаний по физике ……. 251

Добромыслов М. Б.
Решение избранных задач по общей физике в высшей школе ……... 254

Казарбин А. В., Лунина Ю. В.
Профориентационная деятельность как фактор развития инженерного образования ……. 257

Капустина Г. Г.
Подготовка студентов первого курса по физике …….. 261

Козачкова О. В.
Самостоятельная работа студентов как инструмент формирования профессиональных компетенций ……... 264

Копылова И. Б.
Проблемы и достижения современной системы электронного обучения ……. 266

Костенко С. С.
Развитие профессиональных компетенций при получении студентом физического образования в медицинском вузе …… 268

Римлянд В. И., Драчёв К. А.
Особенности программы магистратуры «Физика конденсированного состояния» в Тихоокеанском государственном университете ……... 271

Сапожникова Ю. О., Капустина Г. Г.
Роль физики при очистке сточных вод ……. 275

Стукалова А. С.
Этапы формирования общепрофессиональной компетенции будущего врача при изучении физики …….. 278

Научное издание

ФИЗИКА: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, ОБРАЗОВАНИЕ

Материалы XVI региональной научной конференции

Хабаровск
1–4 сентября 2018 г.

Отпечатано с авторских оригиналов
Компьютерная верстка *Е. А. Кулагиной*

Подписано в печать 20.09.18. Формат 60x84 $^{1}/_{16}$. Усл. печ. л. 16,86 Тираж 100 экз. Заказ 333.

Издательство Тихоокеанского государственного университета.
680035, Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136.