ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»

ФИЗИКА: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, ОБРАЗОВАНИЕ

XIX региональная научная конференция.

27 – 30 сентября 2021 г.

Благовещенск
2021

УДК 53:37
Ф48

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Плутенко А.Д., ректор АмГУ, профессор, доктор техн. наук

Иванченко С.Н., ректор ТОГУ, профессор, доктор техн. наук

Щёкина В.В., ректор БГПУ, доцент, канд. биол. наук

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Барбарич А.А., проректор БГПУ по научной работе, доцент, канд. биол. наук

Стукова Е.В., зав. кафедрой физики АмГУ, профессор, доктор физ.-мат. наук

Фомин Д.В., директор НОЦ АмГУ, доцент, канд. физ.-мат. наук

Барышников С.В., профессор кафедры физического и математического образования БГПУ, профессор, доктор физ.-мат. наук

Римлянд В.И., зав. кафедрой физики ТОГУ, профессор, доктор техн. наук

Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: Материалы XIX региональной научной конференции. – Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2021.

В сборнике представлены материалы XIX региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование», обобщающие результаты работы преподавателей и аспирантов вузов, сотрудников академических институтов по фундаментальным проблемам физики и физического образования. Материалы сборника предназначены для инженеров, научных сотрудников, докторантов, аспирантов и студентов старших курсов, занимающихся научной работой.

ISBN 978-5-93493-376-1

DOI: 10.2250/PFARE.2021

Секция 1

Теоретическая физика и моделирование

УДК 538.911

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ (105) ГЕРМАНИЯ

М.С. Алёшин[1], А.Н. Чибисов[2]
[1] Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
[2] Вычислительный центр Дальневосточного отделения РАН (г. Хабаровск)
max@pnu.edu.ru

В работе представлены результаты компьютерного моделирования поверхности кристаллического германия в кристаллографической плоскости (105), выполненного в программном комплексе Quantum Espresso. Проанализировано изменение параметров кристаллической решетки в процессе релаксации поверхности (105) германия в зависимости от количества слоев, также определены удельные энергии связи.

QUANTUM MECHANICAL MODELING OF THE GERMANIUM (105) SURFACE

M.S. Aleshin[1], A.N. Chibisov[2]
[1]Pacific National University (Khabarovsk)
[2]Computing Center of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)
max@pnu.edu.ru

This paper presents the results of computer modeling of the surface of crystalline germanium in the crystallographic (105) plane, performed in the Quantum Espresso software package. We analyze changes in the crystal lattice parameters during the relaxation of the (105) germanium surface depending on the number of layers, as well as determine the specific bonding energies.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.3-5

В настоящее время квантовым вычислениям уделяется все больше внимания как альтернативе классическому способу вычислений. Для реализации квантового компьютера исследуются различные системы, которые потенциально могут быть применены для построения квантовых битов. Особого внимания для использования в этих целях заслуживают структуры на основе германия Ge, поскольку он обладает самой высокой подвижностью дырок при комнатной температуре среди всех полупроводников. В недавних исследованиях было показано, что дырки в полупроводниках обладают необходимым спинорбитальным взаимодействием, а также, что не только заполненные состояния зоны проводимости, но и вакантные состояния валентной зоны перспективны для реализации спиновых кубитов [1]. В то же время преимуществами Ge как материальной системы являются низкое сверхтонкое взаимодействие и сильная спин-орбитальная связь [2], а также совместимость со стандартами технологий КМОП (комплементарная структура металл-оксид-полупроводник) [3].

На данный момент получено три основных типа германиевых структур. К ним относятся плоскостные гетеростуктуры Ge/SiGe [4], которые представляют собой квазидвухмерную структуру, состоящую из сжатого слоя германия толщиной от 10 до 30 нм, заключенного между двумя слоями кремний-германиевого соединения, германиевые нанопроволоки HW (hut wires) [5], получаемые на поверхности кремния методом молекулярно пучковой эпитаксии и имеющие треугольное поперечное сечение высотой около 2 нм сверху ограниченное слоем кремния, и германиевые нанопроволоки NW (core-shell nanowires) [6], имеющие цилиндрическую форму диаметром порядка 20 нм, где внутри кремниевой оболочки заключен германиевый провод. Если для геретеростурктур Ge/SiGe в реализации квантовых битов сложность представляет управление спином дырок, которые могут перемещаться в направлениях слоя Ge, то у потенциально применимых для этого NW присутствует другой существенный недостаток – технологически трудоемкий процесс их получения, в котором помимо прочего используются металлические катализаторные наночастицы, примеси которых могут оставаться в проволоке. По описанным выше причинам наибольший интерес представляют германиевые нанопроволоки типа HW, выращенные на поверхности кремния. В экспериментах [7] в процессе анизотропного роста Ge на подложке Si(001) кластеры квантовых точек вытягивались вдоль направлений [001] или [010] Si, а также было показано, что формирование граней Ge {105} играет ключевую роль в определении стабильности и однородности нанопроволок.

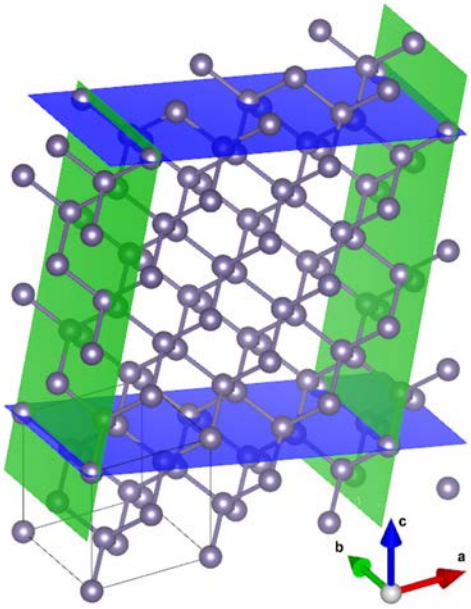


Рис. 1. Примитивная ячейка (ограничена синими и зелеными плоскостями сечения) с гранью (105) (синяя плоскость) в кристаллическом германии.

Настоящая работа является частью исследования, посвященного моделированию квантовых битов на основе германиевых структур. В частности, поскольку наибольший потенциал имеют структуры типа HW, нами были проведено моделирование для нескольких поверхностей германия (105). Результатом моделирования стали расчеты энергетически выгодных состояний для периодических плоских структур, состоящих из нескольких слоев атомов, «вырезанных» из ячейки германия, которая была получена извлечением примитивной тетрагональной ячейки с одной из граней, задаваемых плоскостью (105), из периодически несколько раз повторенной структуры кристаллического германия (рис. 1). Для получившейся структуры размер одной из граней совпадает с размером грани кубической решетки германия и равен b = 5.65782 Å, для двух других $a = c$ = 14.42467 Å.

На основе полученной ячейки были построены периодические по направлениям плоскости (105) структуры, для которых выполнены *ab initio* расчеты в рамках теории функционала плотности в пакете квантовомеханических расчетов Quantum Espresso [8]. Самосогласованные вычисления проводились с целью релаксации полученных поверхностей германия, состоящего из разного количества слоев, и анализа получающихся структур. Всего было рассмотрено четыре структуры, состоящие из 12, 14, 16 и 18 атомов, лежащих в нижних слоях ячейки. Пространство над атомной поверхностью в нашей модели было заполнено вакуумом толщиной в 15 Å.

В результате релаксационных расчетов параметры всех рассмотренных структур изменились разным образом. На рис. 2 приведен вид примитивных ячеек для случая поверхности из 12, 14, 16, 18 атомов в сечении плоскости (105). Можно заметить, что во всех случаях размеры ячеек изменились по-разному, не наблюдается какой-либо закономерности. Примечательно также то, что для периодической поверхности из 14 атомов геометрия изменилась из тетрагональной на моноклинную.

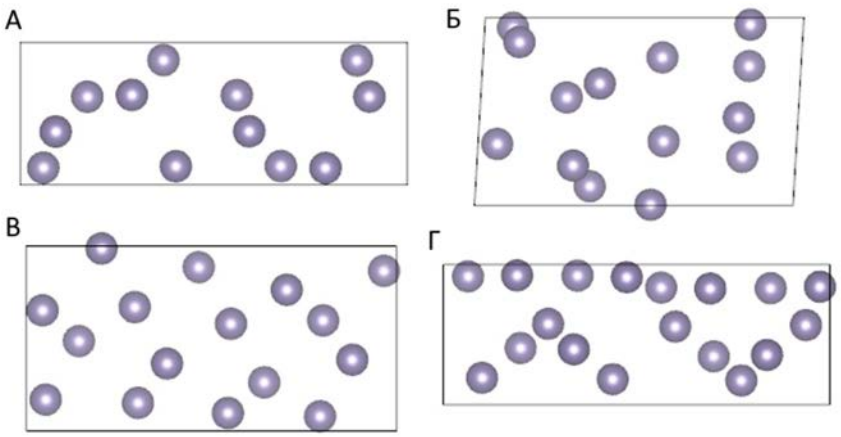


Рис. 2. Сечение плоскости примитивных ячеек для 12 (А), 14 (Б), 16 (В) и 18 (Г) атомов после релаксации.

В таблице приведены результаты расчетов параметров ячеек *a* и *b,* по которым строится периодическая поверхность, угол γ для всех случаев. Моделирование показало, что углы α и β не изменяются. Отметим, что наименьшее значение удельной энергии связи в расчете на один атом соответствует структуре с наибольшим количеством атомов, что вполне ожидаемо, поскольку она является наиболее энергетически выгодной.

Результаты численного моделирования в Quantum Espresso

Количество атомов	12	14	16	18
a, Å	11.48332	9.53943	11.05424	11.58930
b, Å	4.21824	5.63557	5.50802	4.21152
γ, град	90.009	86.679	89.998	90.002
$E_{св}$, эВ/ат	-3.875897	-3.879217	-3.897194	-3.922691

Таким образом в рамках теории функционала плотности были определены параметры наиболее энергетически выгодных поверхностей германия (105) для разного количества слоев в них. Данные результаты будут использованы в дальнейшей работе при моделировании кубитов на основе германиевых структур HW.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005) с использованием ресурсов ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

1. Kloeffel, C., Loss, D. Prospects for spin-based quantum computing in quantum dots // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. Annual Reviews. – 2013. – Vol. 4, № 1. – P. 51-81.
2. Marcellina, E. et al. Spin-orbit interactions in inversion-asymmetric two-dimensional hole systems: A variational analysis // Phys. Rev. B. – 2017. – Vol. 95, № 7. – P. 1-14.
3. Watzinger, H. Ge hut wires – from growth to hole spin resonance // PhD Thesis. – 2018.
4. Aggarwal, K. et al. Enhancement of proximity-induced superconductivity in a planar Ge hole gas // Phys. Rev. Res. – 2021. – Vol. 3, № 2.
5. Gao, F. et al. Site-Controlled Uniform Ge/Si Hut Wires with Electrically Tunable Spin–Orbit Coupling // Adv. Mater. – 2020. – Vol. 32, № 16.
6. Lauhon, L.J. et al. Epitaxial core-shell and core-multishell nanowire heterostructures // Nature. – 2002. Vol. 420, № 6911. – P. 57-61.
7. Zhang, J.J. et al. Monolithic growth of ultrathin Ge nanowires on Si(001) // Phys. Rev. Lett. – 2012. – Vol. 109, № 8. – P. 1-5.
8. Giannozzi, P., et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // J. Phys.: Condens. Matter. – 2017. – Vol. 29. – P. 465901.

УДК 51–73

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРИЗАЦИИ ПОЛИМЕРНОЙ ПЛЕНКИ С ПРОВОДЯЩИМ СЛОЕМ НА ОБЛУЧАЕМОЙ ПОВЕРХНОСТИ

И.В. Верхотурова, Е.А. Игнатова
Амурский государственный университет (г.Благовещенск)
rusia@mail.ru

В данной работе представлены результаты моделирования в программе Comsol MultuPhysics характеристик внутреннего электрического поля в полимерной пленке Kapton при ее электризации потоком моноэнергетических электронов. Показано, что при электризации пленки Kapton внутреннее электрическое поле в ней распределено однородно. Наличие проводящего слоя на облучаемой электронами поверхности полимерной пленки снижает значение напряженности внутреннего электрического поля.

SIMULATION OF THE ELECTRIZATION PROCESS OF A POLYMER FILM WITH A CONDUCTIVE LAYER ON AN IRRADIATED SURFACE

I.V. Verkhoturova, E.A. Ignatova
Amur State University (Blagoveshchensk)
rusia@mail.ru

This paper presents the results of modeling in the Comsol MultuPhysics program the characteristics of the internal electric field in a Kapton polymer film electrified by a flow of monoenergetic electrons. It is shown that when the Kapton film is electrified, the internal electric field in it is uniformly distributed. The presence of a conducting layer on the surface of the polymer film irradiated with electrons reduces the value of the strength of the internal electric field.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.6-9

Полимерные пленки представляют особый интерес для современных технологий. Они отличаются от других материалов тем, что их неоднородной и необычной структурой можно управлять. Широкое применение такого вида материала основано на том, что несмотря на его невысокую стоимость, он может быть использован в различных сферах: биоинженерии, легкой промышленности, строительстве, а также в авиационной и космической технике. Тонкая металлизированная полимерная пленка Kapton-H применяется в конструкции космических аппаратов, но под действием потока электронов космического пространства она подвергается электризации, что может привести к пробою и разрушению полимерных пленок. Поэтому исследование процесса электризации полимерных материалов и способов его уменьшения является актуальным [1 – 4].

В настоящей работе представлены результаты по оценке методом компьютерного моделирования изменения напряженности внутреннего электрического поля в пленке Kapton при ее электризации. Моделирование характеристик внутреннего электрического поля в пленке Kapton при ее электризации проводилось в программе Comsol MultiPhysics при двух случаях: когда на облучаемой поверхности потоком моноэнергетических электронов присутствовало проводящее покрытие и без него. В результате моделирования предполагалось получить распределение линий характеристик внутреннего электрического поля по толщине, облученной электронами полимерной пленки.

В основу численного моделирования характеристик внутреннего электрического поля полимерной пленки при ее электризации положены модели, предложенные А.Е. Абрамешиным и В.Н. Пашенцевым в работах [5 – 7]. Стандартная толщина полимерной пленки Kapton, используемой на космических аппарата колеблется от 127 до 254 мкм. При моделировании считали, что бомбардирующие электроны с энергий 80 кэВ, проникающие в пленку распространяясь в ней максимально накапливались на некоторой глубине, которая в несколько раз меньше толщины пленки, образуя слой с равномерно распределенным отрицательным электрическим зарядом. Основываясь на положениях моделей процесса электризации диэлектрических материалов, представленных в работах данных авторов при моделировании, считали, что полимерная пленка располагается между двумя поверхностями: нижняя – проводящая заземленная; верхняя – без проводящего покрытия поверхность, в которой располагался внедренный в нее электрический заряд или имеющая на облучаемой поверхности проводящее покрытие. Исходя из этого в программе Comsol MultiPhysics с помощью инструмента построителя моделей Geometry задавалась геометрии расчетной области, которую представили в виде трех зон. Первая зона – это пространство, в котором происходят все физические процессы. Вторая зона – параллелепипед, входящий в первую зону, но меньший по размерам. В данном параллелепипеде выделяли третью зону, являющуюся частью второй зоны и представляющую собой два слоя. Нижний – заземленный. Верхний может быть представлен в двух случаях. Первый – слой, в котором располагается распределенный электрический заряд, в случае если пленка не имеет на облучаемой поверхности проводящего покрытия. Второй – это слой проводящего покрытия In_2O_3 с примыкающими к нему дополнительными заземленными поверхностями, а слой с распределенным электрическим заряд располагался ниже. Таким образом, получается, что между двумя поверхностями третьей зоны, находится диэлектрический материал – полимерная пленка Kapton с низкой проводимостью, препятствующий стеканию заряда от облученной области к металлизированной поверхности пленки и заземленному электроду. Материал зон модели с необходимыми характеристиками, выбирали с помощью инструмента Materials из материалов, содержащиеся в библиотеке программы Comsol MultiPhysics.

Состояние, при котором ток зарядки полимерной пленки при облучении и ток стекания избыточного заряда на металлизированную заземленную поверхность равны, называется стационарным. Данное условие позволяет определить величину максимального электрического заряда, накапливаемого в приповерхностном слое пленки при ее облучении электронами. Это значение заряда задавалось в качестве граничного условия для верхней поверхности. Кроме максимального электрического заряда входными параметрами при моделировании были: емкость и сопротивление полимерной пленки Kapton; коэффициент электропроводности и диэлектрическая проницаемость пленки; средняя плотность тока, падающих моноэнергетических электронов.

Результаты моделирования в программе Comsol MultiPhysics процесса электризации полимерной пленки Kapton при стационарном состоянии показали, что эквипотенциальные линии внутреннего электрического поля внутри пленки параллельны друг другу, линии напряженности распределены нормально к ним. Это свидетельствует о том, что внутренне электрическое поле в пленке при ее электризации однородно. Значение напряженности внутреннего электрического поля, полученное при моделировании в программе Comsol MultiPhysics, порядка 10^8 В/м и по порядку величины совпадает со значением напряженности поля в пленке Kapton при ее электризации, представленным в работах [5 – 7]. Столь высокое значение напряженности поля в пленке и быстрое достижение пробойного значения при электризации пленки авторами работ [5 – 7] объясняется низкой радиационной электропроводностью полимерной пленки, которая не успевает обеспечивать сток зарядов на заземленные электроды.

В работе [5] говорится об одном из способов снижения значения внутреннего электрического поля в полимерных материалах, заключающийся в нанесении на облучаемую поверхность полимер-

ной пленки проводящего покрытия. В данной работе говорится о том, что при наличии проводящего покрытия на облучаемой поверхности пленки ток разрежения диэлектрика протекает по короткому пути к проводящей поверхности пленки навстречу падающим электронам. Дальше ток по проводящей пленке течет к заземленным верхним электродам, не позволяя избыточным зарядам двигаться к нижнему электроду.

В программе Comsol MultiPhysics также проведено моделирование процесса электризации полимерных пленок Kapton при наличии у нее на облучаемой поверхности проводящего слоя. Моделирование основывалось на тех же принципах, что представлены выше. Результат моделирования – распределение линий напряженности внутреннего электрического поля, при двух положениях слоя с отрицательным накопленным зарядом (рис. 1).

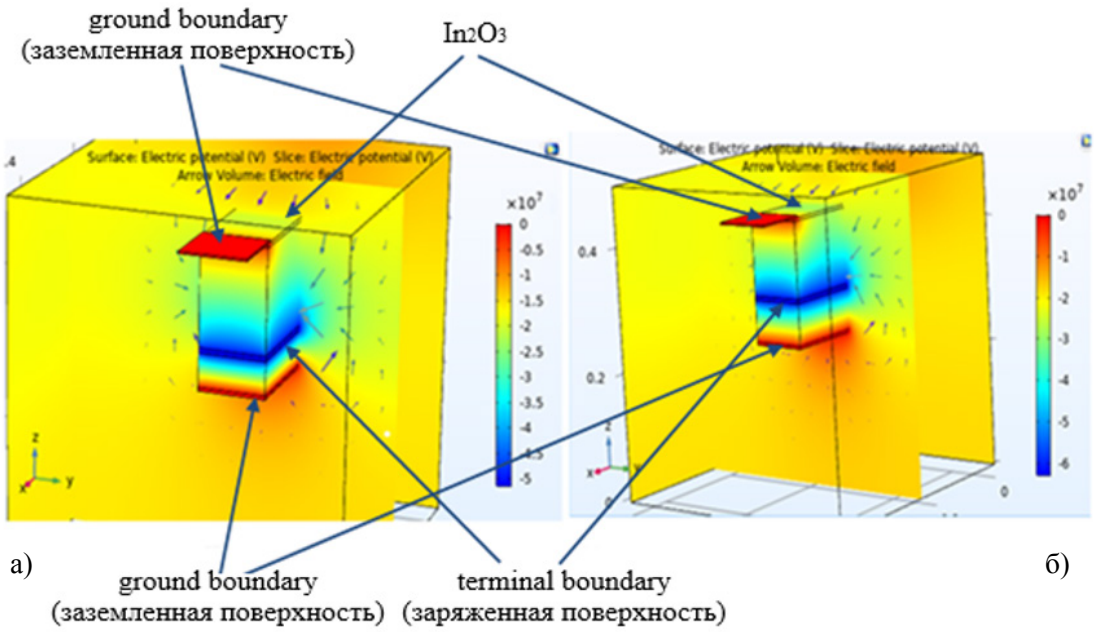


Рис. 1. Распределение линий напряженности внутреннего электрического поля в пленке Kapton с проводящим покрытием и с разным положением уровня накапливаемого отрицательного заряда:

а) положение слоя с накопленным отрицательным зарядом на расстоянии 0,1 мм от проводящего слоя;

б) положение слоя с накопленным отрицательным зарядом на расстоянии 0,05 мм от проводящего слоя.

Из результатов моделирования видно, что наличие проводящего слоя на облучаемой электронами поверхности пленки приводит к уменьшению значения напряженности внутреннего электрического поля до значения порядка 10^7 В/м, что меньше пробойного значения напряженности равного10^8 В/м. Также картина распределения напряженности внутреннего электрического поля в пленке и ее величина не меняются при изменении положения слоя накапливаемого отрицательного заряда.

Результаты моделирования в программе Comsol MultuPhysics характеристик внутреннего электрического поля в полимерной пленке Kapton показали, что при электризации пленки Kapton потоком моноэнергетических электронов поле в ней распределено однородно величина напряженности поля порядка 10^8 В/м. Наличие проводящего слоя на облучаемой электронами поверхности полимерной пленки снижает значение напряженности внутреннего электрического поля.

1. Акишин, А.И. Взаимодействие ионосферной плазмы с материалами и оборудованием космических аппаратов / А.И. Акишин, С.К. Гужова // Физ. и хим. обработки материалов. – 1993. – № 3. – С. 40-47.

2. Пожидаев, Е.Д. Повышение стойкости космических аппаратов к воздействию поражающих факторов электризации / Е.Д. Пожидаев и др. // Космонавтика и ракетостроение. – 2003. – № 1 (30). – С. 32-35.

3. Стародубцев, В.А. Радиационная электризация диэлектрических материалов // Известия Томского политехн. ун-та. – 2000. – № 303 (3). – С. 22-31.

4. Тютнев, А.П. Электрические явления при облучении полимеров / А.П. Тютнев, А.В. Ванников, Г.С. Мингалеев, В.С. Саенко. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 176 с.
5. Пашенцев, В.Н. Модель заряда тонких полимерных пленок пучком электронов с энергией 80 кэВ // Труды МАИ. – 2012. – № 53. – 14 с.
6. Абрамешин, А.Е. Моделирование процессов радиационной электризации нанопроводящих диэлектриков / А.Е. Абрамешин, М.Д. Азаров, А.Е. Пожидаев и др. // Технологии электромагнитной совместимости. – 2015. – № 3 (42). – С. 325-333.
7. Абрамешин, А.Е. Методология проектирования бортовой радиоэлектронной аппаратуры космических аппаратов с учетом воздействия поражающих факторов электризации: Дис. …д-ра техн. наук. – М., 2017.

УДК 51-72:548.4

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГИЙ ОБРАЗОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ В ОКСИДЕ ЦИНКА

А.Н. Дудин, В.В. Нещименко
Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
andrew.n.dudin@gmail.com

Представлены результаты моделирования структурных дефектов типа вакансии, бивакансии, межузельного атома, тройного и «антистуктурного» дефекта в ГПУ решетке оксида цинка, с использованием пакета молекулярной динамики LAMMPS. Рассчитаны энергии образования рассматриваемых точечных дефектов.

MOLECULAR DYNAMIC CALCULATION OF THE ENERGIES OF FORMATION OF STRUCTURAL DEFECTS IN ZINC OXIDE

A.N. Dudin, V.V. Neshchimenko
Amur State University (Blagoveshchensk)
andrew.n.dudin@gmail.com

The paper presents the results of modeling structural defects such as vacancies, double-vacancy, interstitial atoms, triple and «antistructural» defects in the HCP lattice of zinc oxide, using the LAMMPS molecular dynamics package. The energies of formation of the considered point defects are calculated.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.9-12

Реальные кристаллы, в отличие от идеальных, имеют различные нарушения строгой периодичности расположения атомов. Данные отклонения от периодичности структуры кристалла называют дефектом. Дефекты оказывают существенное влияния на электрические, магнитные и механические свойства металлов. Методы изучения дефектов разнообразны и варьируются от размерности рассматриваемых дефектных структур до качественных и количественных особенностей видоизмененных структур. Одним из подходов в изучении молекулярных структур является метод молекулярной динамики. Данный метод позволяет отслеживать временную эволюцию системы взаимодействующих атомов или частиц путем интегрирования их уравнений движения.

Выбранный метод исследования реализован в свободно распространяемом программном пакете LAMMPS [1]. Объект исследования – оксид цинка (ZnO) является крайне интересным материалом обладающим большой шириной запрещенной зоны и стабильной структурой, обеспечивающей

относительно высокую фото- и радиационную стойкость. В связи с чем находит свое применение в качестве пигментов терморегулирующих покрытий космических аппаратов [2].

Целью представленной работы являлось моделирования структурных дефектов вакансии, бивакансии, межузельного атома, тройного и «антистуктурного» дефекта в ГПУ решетке ZnO, с дальнейшим расчетом энергий образования.

ГПУ решетка ZnO построенная пакете молекулярной динамики LAMMPS представляла собой куб размерами 8×8×8 Å и ориентацией xyz ([100], [010] и [001], соответственно). Общее количество созданных атомов в объеме моделируемой области равнялось 6144. Границы клеточной структуры являлись периодичными во всех направлениях.

Установления значений межатомного взаимодействия в рассматриваемой структуре, проводилось с использованием аналитического потенциала Терсоффа [3], разработанного авторами [4] для атомистического моделирования ZnO. Аналитический потенциал Терсоффа имеет следующий вид:

$$E = \sum_{i>j} f_{ij}^{c}(r_{ij})\left[V_{ij}^{R}(r_{ij}) - \frac{b_{ij}+b_{ji}}{2}V_{ij}^{A}(r_{ij})\right], \tag{1}$$

где в качестве парных членов притяжения и отталкивания приняты парные потенциалы типа Морзе:

$$\begin{aligned} V^{R}(r) &= \frac{D_0}{S-1}\exp(-\beta\sqrt{2S}(r-r_0), \\ V^{A}(r) &= \frac{SD_0}{S-1}\exp(-\beta\sqrt{2/S}(r-r_0). \end{aligned} \tag{2}$$

Параметрами в этих уравнениях являются энергия связи димера D_0, расстояние связи димера r_0 и параметр S, определяющий наклон графика Полинга [5]. Параметр β может быть получен из частоты колебаний основного состояния димера. Функция отсечки $f^{c}(r)$ ограничивает диапазон взаимодействия с первыми или вторыми ближайшими соседями

$$f^{c}(r) = \begin{cases} 1 & r \le R_c - D_c \\ 1/2 - 1/2\sin[\pi/2(r - R_c)/D_c] & |r - R_c| \le D_c, \\ 0 & r \ge R_c + D_c \end{cases} \tag{3}$$

где R_c и D_c – настраиваемые параметры. Явные трехчастичные взаимодействия включены через параметр порядка связи

$$b_{ij} = (1+\chi_{ij})^{-1/2}, \tag{4}$$

$$\chi_{ij} = \sum_{k(\neq i,j)} f_{ik}^{c}(r_{ik})g_{ik}(\theta_{ijk})\exp[2\mu_{ik}(r_{ij}-r_{ik})]. \tag{5}$$

Индексы отслеживают зависимость параметров от типа частицы, что важно для описания соединений. Угловая зависимость описывается выражением:

$$g(\theta) = \gamma\left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h+\cos\theta)^2}\right). \tag{6}$$

Построенная структура, после предварительной релаксации представлена на рис. 1. В представленном изображении, светлые атомы являются атомами Zn, темные атомами O.

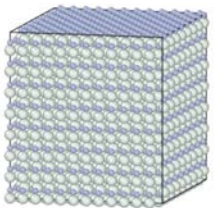


Рис. 1. Структура ZnO размером 8×8×8 Å, построенная в пакете молекулярной динамике LAMMPS.

Основные сценарий внедрение дефектов в структуру на рис. 1, заключаются в удалении одного атома из ячейки моделирования, с последующим вычислением энергии образования вакансии в единицах эВ после релаксации, а также в имитации введения одного атома в межузельный промежуток. Данные сценарии характерны для унарных систем, но в нашем, бинарном случае, помимо этого возможны

дополнительные варианты: образование бивакансии (одновременное удаление атомов цинка и кислорода); образование «антиструктурного» дефекта (перестановка местами атомов цинка с кислородом); образование тройного дефекта (удаление атомов обоих сортов и помещение цинка в позицию удаленного кислорода).

В случае образования вакансий по Zn и O, рассчитывается количество атомов в ячейке и определяется начальная энергия E_0 системы. После чего удалялся атом, структура релаксирует с использованием минимизации энергии (метод сопряженных градиентов). Вычисляется конечная энергия E_f отрелаксированной системы, содержащей вакансию. На основе полученных значений, расчет энергии образования вакансии сводиться к следующей формуле:

$$E_v^f = E_f - \left[\frac{(N_0 - 1)}{N_0}\right] \times E_0, \tag{7}$$

где N_0 – общее количество атомов в ячейке.

В случае образования межузельных атомов по Zn и O, аналогично рассчитывается количество атомов в ячейке и начальная энергия E_0. После чего встраивается атом, структура релаксирует и вычисляется конечная энергия E_f. Расчет энергии образования межузельного атома сводится к формуле (7) с заменой в скобка минуса на плюс.:

Для определения энергии бивакансии из суммы энергии системы с вакансиями E_f и когезионной энергии ε_0 без вакансии, вычитается начальная энергия системы без дефектов E_0:

$$E_{2v} = E_f + \varepsilon_0 - E_0 . \tag{8}$$

Для определения «антиструктурного» дефекта из энергии системы с дефектом вычитается начальная энергия системы без дефектов:

$$E_{Zn \leftrightarrow O} = E_f - E_0 \tag{9}$$

Расчет энергии образования тройного дефекта сводится к формуле (8).

Моделируемые структурные дефекты помещались в центральную область структуры ZnO. Изображения рассматриваемых дефектов представлены в срезе модели кристалла на рис. 2.

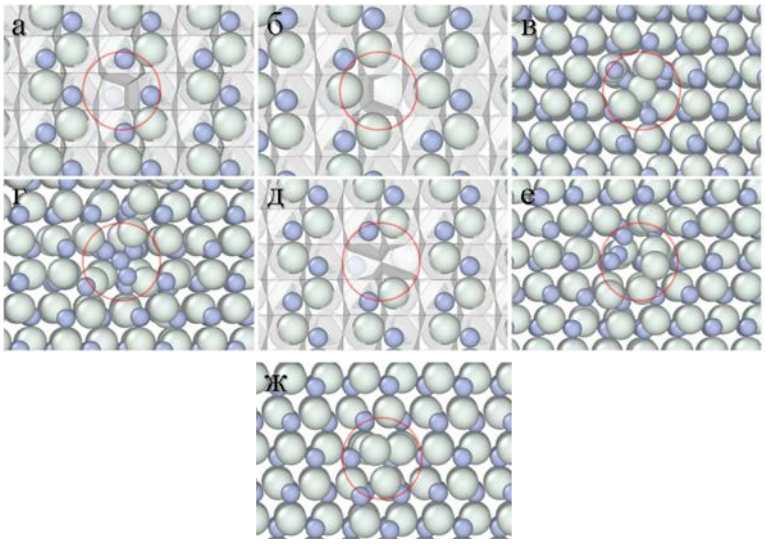


Рис. 2. Структурные дефекты в ZnO: а – вакансия по Zn; б – вакансия по O; в – межузельный Zn; г – межузельный O; д – бивакансия; е – «антиструктурный» дефект; ж – тройной дефект.

Для наглядности, в случаи с вакансиями был применен анализ Вороного с построением полиэдров.

Результаты численного моделирования энергий структурных дефектов ZnO, представлены в соответствующей таблице. Для сравнения расчетных данных в таблицу добавлена колонка экспериментальных результатов, представленные значения в которой имеют разностный характер в зависимости от заряда соответствующего дефекта.

Результаты численного моделирования энергий структурных дефектов оксида цинка

Тип дефекта	**Расчетные, эВ**	**Экспериментальные, эВ** [6]
Вакансия по цинку	2.86	2.20, 2.95, 3.05
Вакансия по кислороду	2.34	1.05, 2.45, 2.67
Межузельный цинк	3.27	2.80, 3.15, 3.20
Межузельный кислород	2.41	0.73, 1.88, 2.32
Бивакансия	5.63	~ 3.0-6.0
«Антиструктурный» дефект	23.76	-
Тройной дефект	11.48	-0.31, 1.57, 2.59, 6.49, 10.47 [7]

Полученные результаты имеют близкие значения с экспериментальными данными, что в свою очередь демонстрирует хорошее приближение аналитического потенциала Терсоффа для ZnO. Дальнейшая работа в молекулярной динамики, с учетом заряда для рассматриваемых дефектов, а также вариаций тетраэдрических и октаэдрических расположений, в перспективе позволит получить более точные результаты энергии образования дефектов в оксиде цинка.

1. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // Journal of Computational Physics. – 1995. – № 117. – С. 1-19. Software available at http://lammps.sandia.gov/

2. 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.

3. Tersoff, J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties // Phys. Rev. B. – 1988. – V.38. – P.9902-9905.

4. Erhart, P., Justin, N., Goy, O., Nordlung, K., Muller, R., Albe, K. Analytic bond-order potential for atomistic simulations of zinc oxide // J.Phys.: Condens. Matter. – 2006. – V.18. – P.6585-6605.

5. Albe, K., Nordlund, K., Averback, R.S. Modeling the metal-semiconductor interaction: Analytical bond-order potential for platinum-carbon // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 65. – P. 195124-195134.

6. Dudin, A.N., Neshchimenko, V.V., Yurina, V.Y. Radiation defects induced by proton exposure in hollow zinc-oxide particles // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. – 2020. – V.14, № 4. – P. 823-829.

7. Janotti, A., Van de Walle, C.G. Native point defects in ZnO // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 76. – P. 165202-165224.

УДК 539.14

СРАВНЕНИЕ ТОЧНОСТИ МЕТОДОВ HORSE И SS-HORSE

М.К. Ефименко, И.А. Мазур

Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

mazuri@pnu.edu.ru

На примере двухчастичной задачи, моделирующей рассеяние нейтрона на альфа-частице, проводится сравнение точности методов HORSE и SS-HORSE. Показано, что при оптимальных значениях параметров точность методов сравнима.

ACCURACY OF HORSE AND SS-HORSE METHODS

M. K. Efimenko, I. A. Mazur

Pacific National University (Khabarovsk)

mazuri@pnu.edu.ru

Using the example of a two-particle problem that simulates the scattering of a neutron by an alpha particle, the accuracy of the HORSE and SS-HORSE methods is compared. It is shown that for optimal values of the parameters, the accuracy of the methods is comparable.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.12-16

Изучение рассеяния частиц на атомных ядрах является актуальной задачей и необходимо для понимания структуры ядер и действующих в них сил. В предлагаемой статье рассмотрены два метода исследования подобных процессов: HORSE и SS-HORSE, в которых исходное взаимодействие аппроксимируется сепарабельными потенциалами конечного ранга, что позволяет рассчитать собственные энергии и фазы рассеяния.

Целью работы является сравнение погрешностей расчетов методами HORSE и SS-HORSE фаз рассеяния нейтронов на альфа-частице.

Метод HORSE

HORSE (Harmonic Oscillator Representation of Scattering Equations) [1, 2] — это один из методов расчета фаз рассеяния для короткодействующих потенциалов. Идея метода в том, чтобы искать решения стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом $\widehat{H}$

$$\widehat{H}u_l = Eu_l$$

(здесь $u_l(E,r)$ – радиальная часть волновой функции в парциальной волне с орбитальным моментом l, E – энергия относительного движения рассеивающихся частиц) в виде разложения по собственным функциям гармонического осциллятора R_{nl}:

$$u_l(E,r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{nl}(E)R_{nl}(r)\,;\; R_{nl}(r) = (-1)^n\sqrt{\frac{2n!}{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})}}\, r^l e^{-\frac{r^2}{2}}\, L_n^{l+\frac{1}{2}}(r^2),$$

где a_{nl} — константы, $\Gamma(z)$ – гамма-функция; L_n^{α} — полином Лагерра.

В результате уравнение Шредингера сводится к системе уравнений:

$$\sum_{n'=0}^{\infty}\left(H_{nn'} - \delta_{nn'}E\right)a_{n'l} = 0, n = 0, 1, 2 \ldots, \tag{1}$$

где $H_{nn'}$– матричные элементы $\widehat{H}$; $\delta_{nn'}$– символ Кронекера. Формально она бесконечная, однако, если потенциал убывает достаточно быстро, его можно аппроксимировать матрицей конечного ранга $\mathcal{N}$. Система уравнений (1) распадается на внутреннюю область $n \leq \mathcal{N}$ и внешнюю $n > \mathcal{N}$, решение для которой известно и является линейной комбинацией синусоподобных $\mathcal{S}_{nl}(E)$ и косинусоподобных $\mathcal{C}_{nl}(E)$, аналитический вид которых известен [2].

Параметрами метода являются граница обрезания матрицы потенциала $\mathcal{N}$ (или число квантов возбуждения $N_{\max} = 2\mathcal{N}$) и осцилляторная энергия $\hbar\omega$, характеризующая базис R_{nl}. Задача рассеяния в такой постановке имеет точное решение. В частности, для фаз рассеяния справедлива формула:

$$\operatorname{tg}\delta_l = -\frac{\mathcal{S}_{\mathcal{N}l} - G_{\mathcal{N}\mathcal{N}}T^l_{\mathcal{N},\mathcal{N}+1}\mathcal{S}_{\mathcal{N}+1,l}}{\mathcal{C}_{\mathcal{N}l} - G_{\mathcal{N}\mathcal{N}}T^l_{\mathcal{N},\mathcal{N}+1}\mathcal{C}_{\mathcal{N}+1,l}}. \tag{2}$$

Здесь $T^l_{\mathcal{N},\mathcal{N}+1}$ — недиагональный элемент оператора кинетической энергии; элементы матрицы $G_{nn'}(E)$ строятся из собственных значений E_λ и собственных векторов $\langle\lambda|nl\rangle$ матрицы обрезанного до размера $\mathcal{N}$ гамильтониана:$G_{nn'}(E) = -\sum_{\lambda=0}^{N}\frac{\langle\lambda|nl\rangle\langle n'l|\lambda\rangle}{E_\lambda - E}$.

Метод SS- HORSE

В случае, когда кинетическая энергия относительного движения частиц совпадает с собственной энергией низшего состояния системы уравнений $E_{\lambda=0}$, выражение для фаз рассеяния значительно упрощается:

$\operatorname{tg}\delta_l = -\frac{S_{\mathcal{N}+1,l}(E_0)}{C_{\mathcal{N}+1,l}(E_0)}$.

Как и HORSE, метод SS-HORSE имеет два параметра $\mathcal{N}$ (или $N_{\max}$) и $\hbar\omega$. Варьируя эти параметры, в результате расчетов можно получать разные собственные значения E_0 и таким образом получить достаточно точек зависимости $\delta_l(E)$. Преимущество метода SS-HORSE по сравнению с HORSE заключается в том, что его проще обобщить на случай многочастичных систем [3].

Сравнение точности расчетов сдвигов фаз в двух методах мы проводим в рамках модельной задачи рассеяния на потенциале Вудса – Саксона с поверхностным спин-орбитальном взаимодействием [5].

Результаты и оценка погрешностей расчетов

В качестве эталона используются результаты, полученные непосредственным интегрированием уравнения Шредингера методом Нумерова [4].

На рис. 1 представлены результаты, полученные в HORSE при $N_{\max}$ = 10 . Как видно, в этом случае уже достигнута приемлемая точность. Заметно существенное влияние значения $\hbar\omega$: при слишком низких или слишком высоких его значениях погрешность очень велика.

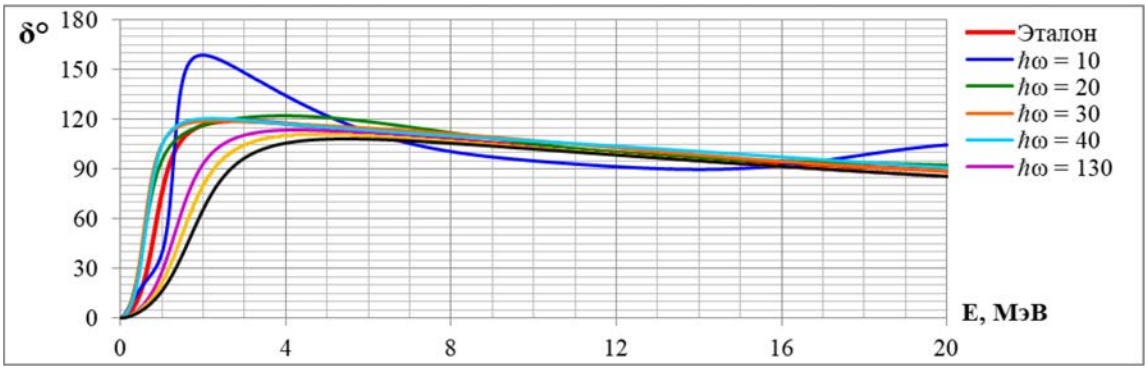


Рис. 1. Сдвиги фаз метода HORSE.

Если в случае метода HORSE при каждой из комбинаций параметров $N_{\max}$ и $\hbar\omega$ можно получить четкую зависимость $\delta(E)$, то метод SS-HORSE подразумевает, во-первых, ограничение на выбор аргументов зависимости $\delta(E_0)$, а во-вторых, – использование данных, полученных при различных $N_{\max}$ и $\hbar\omega$. С учетом влияния этих параметров на точность результатов, для SS-HORSE нельзя с уверенностью ожидать точности, сравнимой с методом HORSE. Однако на рис. 2 видно, что точки, полученные методом SS-HORSE, также неплохо ложатся на эталонную кривую.

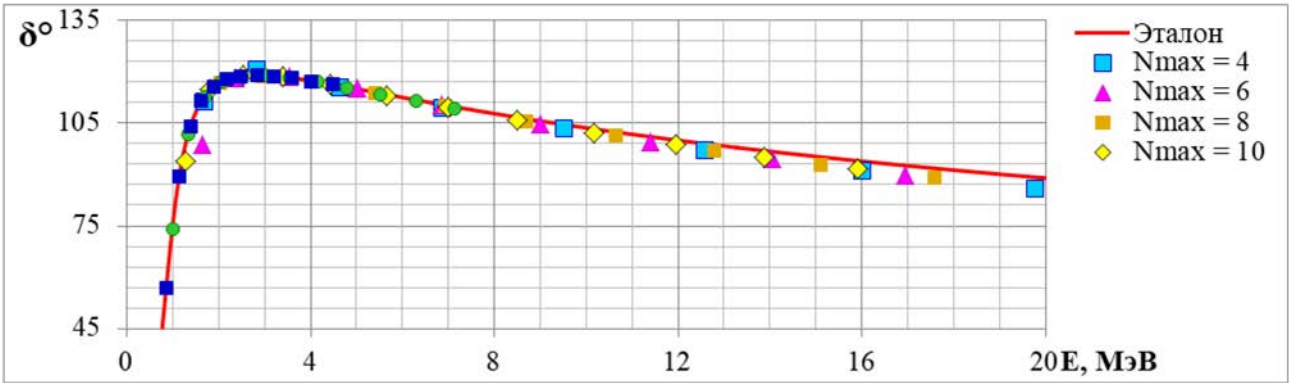


Рис. 2. Сдвиги фаз рассеяния в SS-HORSE.

Оценка точности расчетов в HORSE $\Delta\delta_H$ и SS-HORSE $\Delta\delta_S$ проводилась по формулам

$$\Delta\delta_H = \sum_{\hbar\omega}\sqrt{\frac{1}{E_m}\int_0^{E_m}\left(\delta_э - \delta_р\right)^2 dE}\,,\ \Delta\delta_S = \sum_{\hbar\omega}\sqrt{\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{2\varepsilon}\int_{E_0-\varepsilon}^{E_0+\varepsilon}\left(\delta_э - \delta_р\right)^2 dE}. \quad (3)$$

Здесь $E_{\max} = 20$ МэВ; $\delta_э$ и δ_p – эталонные и расчетные фазы рассеяния. Интегрирование производилось численно, суммирование – по результатам с $\hbar\omega = 10, 20, \ldots, 120$ *МэВ*.

Сначала была проведена оценка погрешности каждого из слагаемых отдельно (рис. 3).

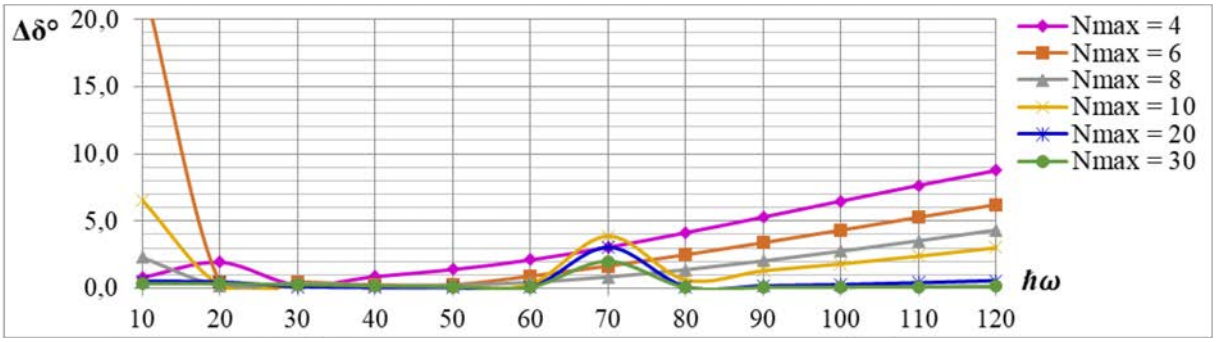


Рис. 3. Зависимость точности оценки метода HORSE от $\hbar\boldsymbol{\omega}$.

Как и следовало ожидать, при увеличении $N_{\max}$ средняя величина отклонения уменьшается, а также существует некоторый оптимальный параметр $\hbar\omega$. Отметим, что для небольших значений N_{max} наблюдаются некоторые локальные минимумы, однако эти колебания точности практически исчезают при достаточно больших N_{max} или оптимальных значениях.

Таким образом, как и было сказано выше, при вариации значений N_{max} и $\hbar\omega$, необходимых для применения метода SS-HORSE, нельзя с уверенностью ожидать точности, сравнимой с методом HORSE. Однако дальнейшие расчеты в приемлемом для всех N_{max} диапазоне $\hbar\omega = 10, 20, \ldots, 120$ *МэВ*, показали, что SS HORSE не уступает в точности методу HORSE даже при небольших N_{max} (см. таблицу и рис. 4).

Сравнение точности методов HORSE и SS HORSE

N_{max}	$\Delta\delta_H$, [°]	$\Delta\delta_S$, [°]	N_{max}	$\Delta\delta_H$, [°]	$\Delta\delta_S$, [°]	N_{max}	$\Delta\delta_H$, [°]	$\Delta\delta_S$, [°]
4	154,89	42,71	8	92,60	18,65	20	31,37	5,92
6	108,23	48,82	10	67,86	20,60	30	23,93	3,83

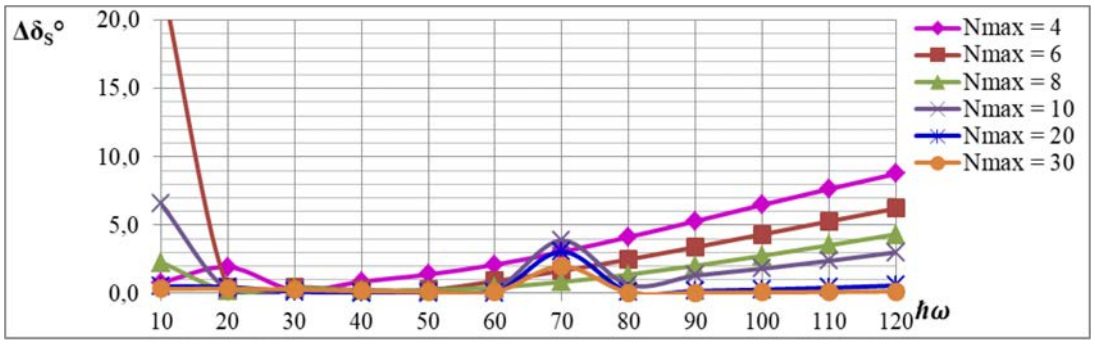


Рис. 4. Зависимость точности оценки метода SS-HORSE от ω.

Таким образом, исследования сходимости метода HORSE подтвердили предварительные соображения об уменьшении численных погрешностей при увеличении N_{max} и существования некоторого оптимального значения $\hbar\omega$.

Предварительные оценки погрешности метода SS-HORSE показали, что для N_{max} = 10, 20 и 30 он не уступает в точности методу HORSE.

1. Нечаев, Ю.И., Смирнов, Ю. Ф. О решении задачи рассеяния в осцилляторном представлении // Ядерная физика. – 1982. – Т. 35. – С. 1385-1391.

2. Bang, J.M., Mazur, A.I., Shirokov, A.M., Smirnov, Yu.F., Zaytsev, S.A. P-Matrix and J-Matrix Approaches: Coulomb Asymptotics in the Harmonic Oscillator Representation of Scattering Theory // Ann. Phys. – 2000. – Vol. 280. – P. 299-335.

3. Shirokov, A.M. et al. Nucleon-α scattering and resonances in ^{5}He and ^{5}Li with JISP16 and Daejeon16 NN interactions // Phys. Rev. C. – 2018. – Vol. 98. – P. 044624 (1-13).
4. Numerov, B.V. A Method of Extrapolation of Perturbations // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 1924. – Vol. 84. – P. 592-602.
5. Bang, J., Gignoux, C. A realistic three-body model of ^{6}Li with local interactions. // Nucl. Phys. A. – 1979. – Vol. 313. – P. 119-140.

УДК 534.21

ТЕПЛОВАЯ МОДУЛЯЦИЯ ФАЗЫ ПРИ ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е.А. Жуков[1], В.И. Жукова[2]
[1] Хабаровский государственный технический университет (г. Хабаровск)
[2] Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
e_a_zhukov@mail.ru

Изучается тепловая модуляция фазы при четырехволновом взаимодействии импульсного излучения, показано, что в импульсном режиме, при оптимальном соотношении интенсивностей волн накачек крупномасштабная модуляция фазы из-за энергообмена взаимодействующих волн будет мала

THERMAL PHASE MODULATION IN THE FOUR-WAVE INTERACTION OF PULSE RADIATION

E.A. Zhukov[1], V.I. Zhukova [2]
[1]Khabarovsk State Technical University, Khabarovsk
[2]Far Eastern State Transport University, Khabarovsk

The thermal phase modulation is studied in the case of four-wave interaction of pulsed radiation; it is shown that in the pulsed mode, with the optimal ratio of pump wave intensities, the large-scale phase modulation due to the energy exchange of the interacting waves will be small

DOI: 10.2250/PFARE.2021.16-17

Для выделения эффектов, связанных с нагревом, достаточно пренебречь влиянием сигнала на волны накачки и отраженной волны на все остальные. Рассмотрим сначала импульсный режим четырехволнового взаимодействия (ЧВ), когда тепловая линза не успевает проявиться, волны накачки в испытывают только линейное ослабление $E_1 = E_{10}e^{\frac{-\alpha z}{2}}$; $E_2 = E_{2l}e^{\frac{-\alpha(l_0-z)}{2}}$, где E_{10}, E_{2l} – амплитуды волн на входе в среду; α – коэффициент поглощения; l_0 – толщина среды. Уравнения для электромагнитных волн при небольших углах θ << π сводятся к уравнениям

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\alpha}{2}\right)E_3 = \frac{ik}{n_0}\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_p E_{10}(\delta T_{13}^* + \delta T_{24})\, e^{-\frac{\alpha z}{2}} \quad ;$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}-\frac{\alpha}{2}\right)E_4 = -\frac{ik}{n_0}\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_p E_{2l}(\delta T_{13} + \delta T_{24}^*)\, e^{-\frac{\alpha(l_0-z)}{2}} \quad ;$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{1}{\tau}\right)\delta T_{13} = \frac{\alpha}{\rho C_p}\left(\frac{cn_0}{4\pi}\right)E_1E_3^*;$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{1}{\tau}\right)\delta T_{24} = \frac{\alpha}{\rho C_p}\left(\frac{cn_0}{4\pi}\right)E_2E_4^*,$$

с граничными условиями $E_3(0) = E_{30}$; $E_4(0) = 0$. Здесь $\delta T_{13}, \delta T_{24}^*$ – амплитуды температурных решеток, записанных соответствующими волнами; τ – время затухания температурных решеток из-за диффузии.

Амплитуду отраженной волны будем искать методом теории возмущений, полагая в нулевом приближении $E_3^{(0)}(z,t) = E_{30}(t)$; $E_4^{(0)}(z,t) = 0$.

В первом приближении амплитуду отраженной волны $E_4^{(1)}$ и первую поправку к сигнальной волне $E_3^{(1)}$:

$$E_{3l}^{(1)} = -iG\left(\frac{cn_0}{4\pi}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\alpha l_0}{2}}\left(1-\mathrm{e}^{-\alpha l_0}\right)E_{10}(t)\int_0^t E_{10}^*(t')E_{30}(t')\mathrm{e}^{\frac{(t'-t)}{\tau}}dt';$$

$$E_{40}^{(1)} = iG\left(\frac{cn_0}{4\pi}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\alpha l_0}{2}}\left(1-\mathrm{e}^{-\alpha l_0}\right)E_{2l}(t)\int_0^t E_{10}(t')E_{30}^*(t')\mathrm{e}^{\frac{(t'-t)}{\tau}}dt',$$

здесь $G = \frac{k}{n_0\rho c_p}\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_p$ – константа тепловой нелинейности.

Вторая поправка $E_{40}^{(2)}$:

$$E_{40}^{(2)} = -G^2\left(\frac{cn_0}{8\pi}\right)e^{-\alpha l_0}E_{2l}(t)\times\int_0^t\left[-\left(1-\mathrm{e}^{-\alpha l_0}\right)^2 I_{10}(t') + 2\left(\alpha l_0 + e^{-\alpha l_0} - 1\right)I_{2l}(t')\right]\times$$

$$\times\int_0^{t'}\mathrm{e}^{\frac{(t''-t)}{\tau}}E_{10}(t'')E_{30}^*(t'')dt''dt'$$

Во втором приближении поправка к отраженной волне $E_4^{(2)}$смещена относительно $E_4^{(1)}$ по фазе на π/2, так что отраженная волна $E_4 \approx E_4^{(1)} + E_4^{(2)}$ приобретает фазовый сдвиг на величину, зависящую от соотношения интенсивностей накачек. При этом фазовый сдвиг может отсутствовать, если интенсивности накачек удовлетворяют условию:

$$\frac{I_{2l}}{I_{10}} = \frac{\left(1-\mathrm{e}^{-\alpha l_0}\right)^2}{2\left(\alpha l_0 + \mathrm{e}^{-\alpha l_0} - 1\right)}.$$

Для пучков накачек с гауссовым распределением интенсивности I и радиусом r_0оптическая сила эквивалентной тепловой линзы, вносящей такие же фазовые искажения, пропорциональна

$$\frac{1}{f_T} = \frac{2G}{kr_0^2}\left(1-\mathrm{e}^{-\alpha l_0}\right)\int_0^t\left[I_{10}(t') + I_{2l}(t')\right]dt'$$

Здесь f_T – фокальное расстояние.

При $\alpha l_0 << 1$ переходит в условие $I_{2l} = I_{10}$, полученное в [**Ошибка! Закладка не определена.**], где авторами было показано, что в слабопоглощающих средах с безынерционной кубичной нелинейностью избежать искажений отраженной при ЧВ волны можно при выравнивании интенсивностей накачек. На больших

При равных интенсивностях накачек и небольшом поглощении среды фазовая модуляция и расходимость отраженной волны определяется тепловой линзой.

Таким образом, показано, что в импульсном режиме, при оптимальном соотношении интенсивностей волн накачек крупномасштабная модуляция фазы из-за энергообмена взаимодействующих волн будет мала.

УДК 534.21

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В ОРТОФЕРРИТЕ ИТТРИЯ ОДНОВРЕМЕННО С МАГНИТНЫМИ И ПРОДОЛЬНЫМИ АКУСТИЧЕСКИМИ ВОЛНАМИ

В.И. Жукова[1], Е.А. Жуков[2]

[1] *Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)*

[2] *Хабаровский государственный технический университет (г. Хабаровск)*

v-i-zhukova@yandex.ru

Изучается взаимодействие доменных границ в ортоферрите иттрия одновременно с магнитными и продольными акустическими волнами, представленные расчеты показывают возможность создания регулируемого усилителя гиперзвуковых волн в диапазоне сотен гигагерц.

STUDY OF INTERACTION OF DOMAIN BOUNDARIES IN YTTRIUM ORTHOFERRITE SIMULTANEOUSLY WITH MAGNETIC AND LONGITUDINAL ACOUSTIC WAVES

V.I. Zhukova[1], E.A. Zhukov[2]

[1] *Far Eastern State Transport University, Khabarovsk*

[2] *Khabarovsk State Technical University, Khabarovsk*

The interaction of domain walls in yttrium orthoferrite is studied simultaneously with magnetic and longitudinal acoustic waves. The presented calculations show the possibility of creating an adjustable amplifier for hypersonic waves in the range of hundreds of gigahertz.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.18-21

Движение доменных границ (ДГ) в ортоферрите иттрия ($YFeO_3$) сопровождается торможением ДГ и генерацией акустических волн [1]. Если скорости движения ДГ отличны от скоростей распространения акустических и спиновых волн, то торможение связывается с возбуждением поверхностных волн [2-4]. На основе этого эффекта показана возможность создания генератора гиперзвуковых поперечных акустических волн [5, 6]. Но это взаимодействие еще не достаточно полно и последовательно изучено и объяснено.

В настоящей работе изучается взаимодействие ДГ в ортоферрите иттрия одновременно с магнитными и продольными акустическими волнами. Магнитостатическая энергия не учитываются из-за ее ослабления на фоне обменного усиления магнитоупругой [7].

Полная система динамических уравнений для акустических u_l, u_t и магнитной υ переменных (волн) в бездиссипативном приближении имеет вид:

$$\begin{gathered}
\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\upsilon+\frac{b_3}{2A}\sin(2\upsilon)=\frac{mH}{A}\sin\upsilon-\frac{\delta_l}{A}\frac{\partial u_l}{\partial x}\sin(2\upsilon)+\frac{\delta_t}{A}\frac{\partial u_t}{\partial x}\cos(2\upsilon);\\
\left(\frac{1}{s_l^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_l=-\frac{\delta_l}{\rho s_l^2}\frac{\partial\upsilon}{\partial x}\sin(2\upsilon);\\
\left(\frac{1}{s_l^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_l=-\frac{\delta_l}{\rho s_l^2}\frac{\partial\upsilon}{\partial x}\sin(2\upsilon),
\end{gathered}\tag{1}$$

где u_l – компоненты вектора деформации вдоль оси **x** (продольная волна); u_t – поперечная волна; A – постоянная обменной энергии; b_3 – константа анизотропии; ρ – плотность; δ_l – магнитоакустические константы; s_l – скорость объемных продольных звуковых волн.

Пусть структура ДГ имеет вид [5]: $\upsilon = \upsilon_0 + \upsilon_1$ (υ_0 – магнитная переменная без учета магнитоакустического взаимодействия, является нулевым приближением; υ_1 – поправка, вызванная этим взаимодействием, является первым приближением) и как показано в [1]:

$$\cos\upsilon_0 = \mathrm{th}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right); \sin\upsilon_0 = \frac{1}{\mathrm{ch}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right)}; \frac{\partial\upsilon_0}{\partial x} = -\frac{1}{D_3\,\mathrm{ch}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right)};$$

$$\cos(2\upsilon_0) = 1 - \frac{2}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{x-vt}{D_3}\right)}; \sin(2\upsilon_0) = 2\frac{\mathrm{sh}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right)}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{x-vt}{D_3}\right)}; D_3 = \sqrt{\frac{A}{b_3}\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)}.$$

Тогда первое уравнение в (1) в нулевом приближении имеет вид:

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\upsilon_0 + \frac{b_3}{2A}\sin(2\upsilon_0) = \frac{mH}{A}\sin\upsilon_0 + \frac{\alpha M}{gA}\frac{\partial\upsilon_0}{\partial t}.$$

Далее пренебрегаем диссипацией (α=0, η=0), полагая $H = 0$.

Считаем, что $[\sin(2\upsilon_1) \approx 2\upsilon_1,\ \cos(2\upsilon_1) \approx 1]$ эквивалентны первым слагаемым в разложении в степенной ряд. Следовательно, это уравнение в первом приближении будет иметь взаимодействия ДГ только с продольными акустическими и магнитными волнами (отсутствует взаимодействие с поперечными волнами). Поэтому для расчета взаимодействия ДГ с продольными акустическими и магнитными волнами нужно рассматривать только два первых уравнения системы (1).

Аналогично решение системы двух уравнений 1 и 3 из системы (1) при взаимодействии с поперечными волнами было получено в работе [5].

В данной работе расчеты проводятся при малых возмущениях $\upsilon_1 << \upsilon_0$; $u_l << 1$ и в предположении, что вклад в деформацию u_l ДГ отсутствует.

Таким образом, решение поставленной задачи, с учетом предположений и в квадратичном приближении сводится к решению системы уравнений:

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{b_3}{A}\cos(2\upsilon_0)\right)\upsilon_1 = -\frac{\delta_l}{A}\frac{\partial u_l}{\partial x}\sin(2\upsilon_0); \\ &\left(\frac{1}{s_l^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_l = -\frac{\delta_1}{\rho s_1^2}\left[\frac{\partial\upsilon_1}{\partial x}\sin(2\upsilon_0)\right]. \end{aligned} \tag{2}$$

Согласно методике [8] и [5] считаем, что с магнитными и акустическими волнами взаимодействует спектральная составляющая магнитоакустического напряжения доменной границы, пропорциональная $\sim e^{i\omega t - ikx}$.

Решаем задачу (2) методом теории возмущений, полагая

$$\upsilon_1 = \upsilon_1^{(0)} + \upsilon_1^{(1)}; \qquad u_l = u_l^0 + u_l^{(1)}. \tag{3}$$

Здесь нулевое приближение имеет вид:

$$\upsilon_1^{(0)} = A_1\left[\mathrm{th}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right) - iD_3E\right]e^{i\omega_s t - ik_s x};\ u_l^{(0)} = A_2 e^{i\omega_a t - ik_a x},\quad E = \frac{\omega_s v - k_s c^2}{c^2 - v^2}, \tag{4}$$

где A_1, A_2 – константы.

Формулы (4) являются решением для левой части системы уравнений (2).

В нулевом приближении выражения (4) совпадают с нормальными модами магнитной и акустической волн с учетом доменной границы [9]. Тогда, подставим (3) в систему уравнений (2) , получим

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{b_3}{A}\cos\left(2\upsilon_0\right)\right)\upsilon_1^{(1)}=-\frac{\delta_l}{A}\frac{\partial(u_l^{(0)}+u_l^{(1)})}{\partial x}\sin\left(2\upsilon_0\right);$$
$$\left(\frac{1}{s_l^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_l^{(1)}=-\frac{\delta_l}{\rho s_l^2}\left[\frac{\partial(\upsilon_1^{(0)}+\upsilon_1^{(1)})}{\partial x}\sin\left(2\upsilon_0\right)+\frac{\partial\upsilon_0}{\partial x}\sin\left(2\upsilon_0\right)\right]. \quad (5)$$

Решение системы (5) в первом приближении ищем в виде медленно меняющихся амплитуд аналогично [5] и [7]:

$$\upsilon_1^{(1)}=A_1(x-vt)e^{i\omega_s t-ik_s x}+A_1^*(x-vt)e^{-i\omega_s t+ik_s x};$$
$$u_l^{(1)}=A_2(x-\nu t)e^{i\omega_a t-ik_a x}+A_2^*(x-\nu t)e^{-i\omega_a t+ik_a x}. \quad (6)$$

Здесь $A_1(x-vt)$, $A_2(x-vt)$ – неизвестные функции; $A_1^*(x-vt)$, $A_2^*(x-vt)$ –соответственно комплексно сопряженные функции.

Чтобы найти неизвестные функции $A_1(x-vt)$, $A_2(x-vt)$, $A_1^*(x-vt)$, $A_2^*(x-vt)$, подставим выражения (6) в систему уравнений (5). Будем рассматривать квазистационарное распределение магнитной и акустической волн относительно ДГ. При этом огибающие амплитуд будут зависеть только от одной координаты в системе движущейся ДГ, фазовые скорости волн при этом будут различны. Полагаем

$$A_{1,2}(x,t)=A_{1,2}(x-vt)=A_{1,2}(\varsigma),\quad \varsigma=(x-vt),$$

где ς – координата, перпендикулярная плоскости ДГ, в движущейся системе координат:

$$\frac{\partial A_{1,2}}{\partial t}=-v\frac{\partial A_{1,2}}{\partial x}=-v\frac{\partial A_{1,2}}{\partial \varsigma}.$$

После преобразований, приравняем в уравнениях системы выражения при равных экспонентах.

В условиях отсутствия волновой расстройки

$$\omega=\omega_s+\omega_a,\quad k=k_s+k_a,\qquad \omega=kv$$

система уравнений принимает вид:

$$\left\{\left(\frac{-2i\omega_s v^2}{c^2}-2ik_s\right)\frac{\partial A_1^*(\varsigma)}{\partial\varsigma}\right\}=-\frac{\delta_l}{A}\left[\left(\frac{\partial A_2(\varsigma)}{\partial\varsigma}-ik_aA_2(\varsigma)-ik_aA_2\right)e^{-ik\varsigma}\right]\times\frac{2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\varsigma}{D_3}\right)}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{\varsigma}{D_3}\right)},$$
$$\left[\left(\frac{2i\omega_a\nu^2}{s_l^2}+2ik_a\right)\frac{\partial A_2(\varsigma)}{\partial\varsigma}\right]=-\frac{\delta_l}{\rho s_l^2}\left[\left(\frac{\partial A_1^*(\xi)}{\partial\varsigma}+ik_sA_1^*(\varsigma)\right)e^{ik\varsigma}\right]\times\frac{2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\varsigma}{D_3}\right)}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{\varsigma}{D_3}\right)}. \quad (7)$$

С помощью преобразования Фурье система уравнений (7) сводится к системе уравнений, методика решений которых приведена в [8], где показано, что при выполнении условий синхронизма для трех-волновых взаимодействий возможна перекачка энергии между волнами. В данной работе роль одной из волн играет спектральная составляющая магнитоакустических напряжений ДГ, которая при фиксированной скорости является заданной. Из решения (6) следует, что в результате движение ДГ на определенных скоростях может приводить к одновременной генерации магнитной и акустической волн, а также к их усилению.

Таким образом, представленные расчеты по теоретической модели многоволнового взаимодействия акустической и магнитной подсистем с участием доменной границы в ортоферритах показывают возможность создания регулируемого усилителя гиперзвуковых волн в диапазоне сотен гигагерц. Аналогично, можно усиливать магнитные волны при акустической накачке.

Согласно закону дисперсии магнитных волн, на протяженном участке ($k_s \sim 1–10^4$ см$^{-1}$) частота магнитных волн – около 0,4 ГГц. Тогда измерение параметров магнитных волн оптическими методами можно использовать для косвенного измерения параметров гиперзвука с длиной волны до 10 нм.

---

1. 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. – T. 106, № 2. – C. 164-172.

2. Кузьменко, А.П., Жуков, Е.А., Ли Ц. Резонансное возбуждение магнитоупругих колебаний в ортоферритах одиночной доменной границей // Вестник ТОГУ. – 2005. – № 1. – С. 9-24.

3. 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. – T. 310, № 2 SUPPL. PART 2. – C. 1610-1612.

4. 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.

5. 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 ТОГУ. – 2012. – № 3 (26). – С. 17-27.

6. 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, № 4. – P. 04020 (3pp).

7. 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.

8. Bloembergen, N. Nonlinear Optics. – N.Y.: Benjamin, 1965. – 172 c.

9. Барьяхтар, И.В., Иванов, Б.А. Динамическое торможение доменной границы в слабом ферромагнетике. – Киев: ИТФ АН УССР, 1983. – Препринт ИТФ-83-111Р. – 28 с.

УДК 537.9

ОСНОВНЫЕ СОСТОЯНИЯ ДИПОЛЬНЫХ КАИРСКИХ РЕШЕТОК

А.Г. Макаров[1,2], К.В. Макарова[1,2], К.В. Нефедев[1,2]

[1]Дальневосточный федеральный университет (г. Владивосток)

[2]ИПМ ДВО РАН (г. Владивосток)

makarov.ag@dvfu.ru

Методом исчерпывающего перечисления мы вычислили все возможные конфигурации для систем из 20 и 40 Изинг-подобных точечных диполей на Каирской решетке. Это позволило найти точное решение задачи о поиске всех основных состояний для исследуемых образов Каирских пентагональных решеток с параметром c=376, 450, 500 и 600 нм. Полученные результаты для N=40 позволили провести тестирование и отладку метода Монте-Карло, который использовался для построения решеток из N=80 диполей.

GROUND STATES OF THE DIPOLAR CAIRO LATTICES

A.G. Makarov[1,2], K.V. Makarova[1,2], K.V. Nefedev[1,2]

[1]Far Eastern Federal University (Vladivostok)

[2]IAM FEB RAS (Vladivostok)

makarov.ag@dvfu.ru

Using the exhaustive enumeration method, we calculated all possible configurations for systems of 20 and 40 Ising-like point dipoles on the Cairo lattice. This made it possible to find an exact solution to the

problem of finding all ground states for the studied images of the Cairo pentagonal lattices with the parameter c = 376, 450, 500, and 600 nm. The results obtained for N = 40 made it possible to test and debug the Monte Carlo method, which was used to construct lattices from N = 80 dipoles.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.21-24

Системы искусственного спинового льда с изменяемым, не фиксированным, переменным координационным числом [1, 2] представляют особый интерес. Обычно предполагается, что изменение параметров решетки может существенным образом повлиять на степень вырождения энергетических уровней и, соответственно, на низкотемпературные свойства спинового льда. Точный расчет энергии основного состояния даже для классического спинового стекла Изинга на 2D-решетке с взаимодействием соседей ближайшего окружения является вычислительно сложной задачей, или даже NP-полной, при этом стоит отметить, что решение этой задачи настолько же затруднительно, насколько они представляют фундаментальный и практический интерес.

Каирскую решетку иногда называют «пентагональной решеткой» [3], или «Cairo pentagonal lattice» [4-6]. В данной работе мы приводим решение задачи вычисления конфигурации основного состояния образцов конечного числа диполей Каирской решетки, для заданных координационных чисел. Наноостровки Изинг-типа помещались на центры граней, так называемой Каирской решетки (рис. 1).

На рис. 1 показаны используемые нами обозначения параметров решетки *a, b, c* (расчеты выполняли для *a* = 472 нм, *b* = 344 нм). Расстояние *c* варьировалось. Поскольку размеры наноостровков были ниже критического порога однодоменности, а анизотропия формы выделяет направление для магнитного момента, мы исследовали модель Изинг-подобных точечных диполей.

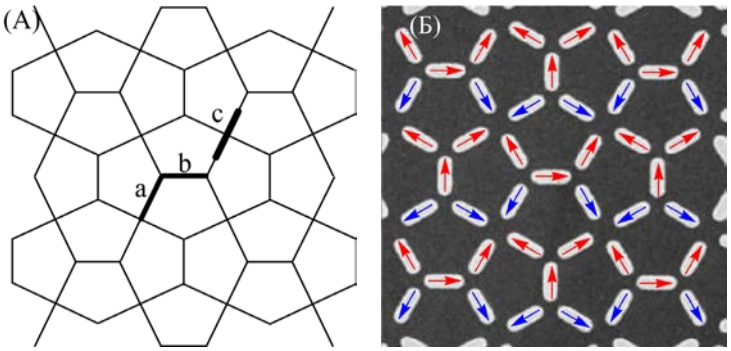


Рис. 1. Каирская решетка, ее параметры – *a,b,c* (А) и наложение модели Изинг-подобных диполей на сканированное изображение электронной микроскопии, состоящее из наномагнетиков (Б).

Для наглядности и представления используемой нами модели мы рассчитали центры наноостровков и поместили сетку точечных диполей на сетку, показанную на изображении 1b. Образец дипольной Каирской решетки состоял из наномагнетиков с длиной и шириной 300 нм и 100 нм, соответственно. На рис. 1Б стрелками изображена одна из возможных конфигураций массива диполей.

Энергия диполь-дипольного взаимодействия в Каирской решетке рассчитывалась по следующей известной формуле

$$E_{dip}^{ij} = \frac{\left(\vec{m}_i \vec{m}_j\right)}{\left|\vec{r}_{ij}\right|^3} - 3\frac{\left(\vec{m}_i \vec{r}_{ij}\right)\left(\vec{m}_j \vec{r}_{ij}\right)}{\left|\vec{r}_{ij}\right|^5}, \quad (1)$$

где D – размерная константа для дипольного взаимодействия; $\vec{r}_{ij}$ – радиус-вектор, соединяющий диполи i и j.

Использовалась плоская решетка со свободными граничными условиями, в которой Изинг-подобные точечные диполи суперспинов были расположены на ребрах пентагонов, магнитный момент i-диполя задается как $\vec{m}_i = S_i \vec{m}_i^* = S_i \left\{ m_x, m_y \right\}$. Ориентация магнитного момента i-диполя $\vec{m}_i^*$ определяется направлением легкой оси намагниченности, которая контролируется анизотропией формы наноостровков.

Мы использовали метод исчерпывающего перечисления для решеток N=20 и 40 диполей. Время, необходимое для решения задачи методом исчерпывающего перечисления, возрастает экспоненциально в зависимости от числа элементов в модели. Однако к положительным свойствам этого метода можно отнести то, что, если возможно применить этот метод, он находит решение всегда.

Поиск основного состояния для решетки в 80 диполей был выполнен методом гибридного мультиспинового Монте-Карло [7]. Метод заключается в совмещении классического Монте-Карло и метода исчерпывающего перечисления.

Отметим здесь, что все найденные нами в этой работе конфигурации основного состояния подчиняются правилу льда «два внутрь – два наружу» для узлов из четырех диполей, и правилам квазильда «два внутрь – один наружу», или «два наружу – один внутрь» для узлов из трех диполей. На рис. 2 представлены основные состояния для исследуемых решеток из 20 диполей со свободными граничными условиями и различными значениями параметра решетки c = 376, 450, 500, 600 нм. Как видно на рис. 2 основные состояния для решетки диполей, имеющих c = 376, 450, 500 нм, одинаковые и отличаются от основных состояний решетки, где c = 600 нм, только инвертированными угловыми диполями. Красным кружком мы обозначили петнагоны, в которых все диполи выстраиваются согласно правилу «голова-хвост». Крестиком мы обозначили пентагоны, в которых имело место хотя бы одно нарушение правила «голова-хвост».

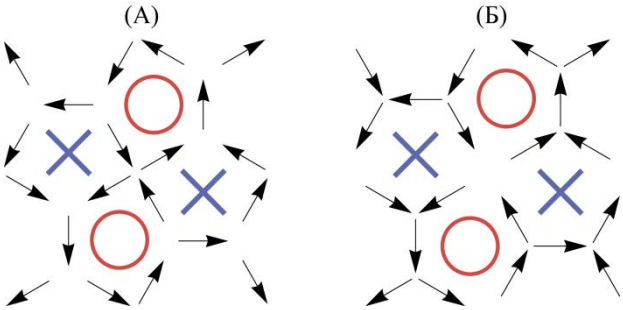


Рис. 2. Основные состояния для решеток (А) c=376 нм (аналогичным образом выглядят основные состояния для 450 и 500 нм), (Б) 600 нм, по одному из четырех возможных.

Всего у каждой Каирской решетки 20 диполей было найдено по 4 основных состояния, которые несложно построить из основных состояний, приведенных на рис. 2(А) для c = 376, 450, 500 нм и рис. 2(Б) для c= 600 нм, путем двух операций: вращения всей решетки относительно центра образца на 90 градусов и инвертирования.

Также методом исчерпывающего перечисления были рассчитаны энергии и конфигурации основных состояний для Каирской пентагональной решетки, состоящей из 40 диполей. Обнаружено, что, как и в случае для N = 20, для системы из 40 диполей конфигурации основного состояния для c = 376, 450 и 500 нм повторяются. Разница в основных состояниях этих трех решеток и решетки c = 600 нм в направлениях угловых диполей.

Найденные методом исчерпывающего перечисления точные решения для конфигурации основных состояний Каирской решетки из 40 диполей послужили основой для тестирования решений, полученных методом Монте-Карло низкоэнергетических состояний.

Найденное и методом Монте-Карло, и методом исчерпывающего перечисления основное состояние для системы 40 диполей мы приводим на ри. 3.

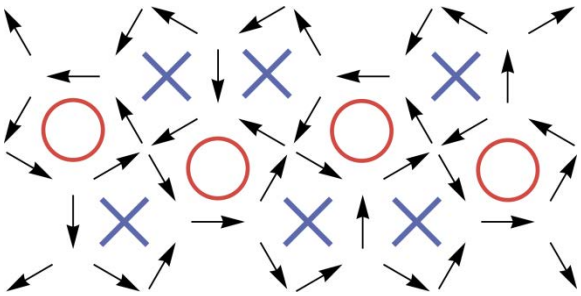


Рис. 3. Одно из четырех возможных основных состояний для систем из 40 диполей, *c* = 376 нм.

Методом Монте-Карло мы молучили основное состояние системы с количеством спинов N=80 (рис. 4).

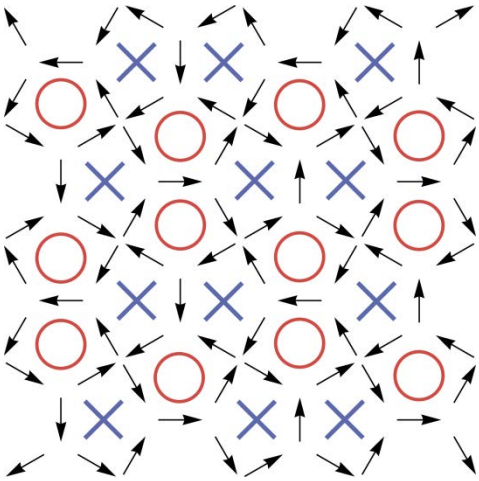


Рис. 4. Одно из четырех возможных основных состояний для системы 80 диполей, *c*=376 нм.

Интересно отметить, что для N=80 конфигурации основного состояния для всех исследованных нами систем с параметром решетки *c*=376, 450, 500 и 600 нм одинаковые, с точностью до двух угловых инвертированных диполей для *c*=600 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации №0657-2020-0005. Для проведения расчетов использовались вычислительные ресурсы, предоставленные Центром коллективного пользования «Дата-центр ДВО РАН» [8].

---

1. Gilbert, I. et al. Emergent ice rule and magnetic charge screening from vertex frustration in artificial spin ice // Nature Physics. – 2014. – V. 10. – № 9. – P. 670-675.

2. Nisoli, C., Moessner, R., Schiffer, P. Colloquium: Artificial spin ice: Designing and imaging magnetic frustration // Reviews of Modern Physics. – 2013. – V. 85, №. 4. – P. 1473.

3. Moessner, R., Sondhi, S. L. Ising models of quantum frustration // Physical Review B. – 2001. – V. 63, № 22. – P. 224401.

4. Urumov, V. Exact solution of the Ising model on a pentagonal lattice // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2002. – V. 35, № 34. – P. 7317.

5. Ralko, A. Phase diagram of the Cairo pentagonal X X Z spin-1 2 magnet under a magnetic field //Physical Review B. – 2011. – V. 84, № 18. – P. 184434.

6. Ressouche, E. et al. Magnetic frustration in an iron-based Cairo pentagonal lattice // Physical review letters. – 2009. – V. 103, № 26. – P. 267204.

7. Makarov, A.G. et al. On the numerical calculation of frustrations in the Ising model // JETP Letters. – 2019. – V. 110, №. 10. – P. 702-706.

8. Sorokin, A.A., Makogonov, S.V., Korolev, S.P. The information infrastructure for collective scientific work in the Far East of Russia // Scientific and Technical Information Processing. – 2017. – V. 44, № 4. – P. 302-304.

УДК 534.21

МОДУЛЯЦИЯ ФАЗЫ ПРИ ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ НЕПРЕРЫВНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПОГЛОЩАЮЩИХ СРЕДАХ

В.О. Ремесловский, Е.А. Жуков
Хабаровский государственный технический университет (г. Хабаровск)
000158@pnu.edu.ru

Рассмотрена модуляция фазы непрерывного излучения из-за процессов диффузии и конвективного движения в поглощающих средах при четырех-волновом взаимодействии. Определены условия, при которых эффективность взаимодействия и дифракционная эффективность голограммы будут максимальными, а искажения из-за нагрева среды минимальными.

PHASE MODULATION IN THE FOUR-WAVE INTERACTION OF CONTINUOUS RADIATION IN ABSORBING MEDIA

V.O. Remeslovsky, E.A. Zhukov
Khabarovsk State Technical University, Khabarovsk

The modulation of the phase of continuous radiation due to diffusion and convective motion in absorbing media with four-wave interaction is considered. The conditions are determined under which the interaction efficiency and diffraction efficiency of the hologram will be maximal, and the distortions due to heating of the medium will be minimal.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.25-26

В импульсном режиме четырехволновое взаимодействие (ЧВ) можно пренебречь не только диффузией тепла вдоль штрихов решетки, но и конвективным движением среды, если смещение среды $v_к t_и$ мало, по сравнению с периодом решетки Λ ($v_к$ –характерная скорость конвективных потоков жидкости, $t_и$ – длительность импульса). В непрерывном режиме эти процессы ответственны за установление стационарного значения общего нагрева δT и могут влиять на формирование пространственной структуры отраженной волны. Хотя в этом случае отсутствуют эффекты, связанные с ростом температуры в течении импульса, учет конвективного движения сильно усложняет рассмотрение ЧВ.

Если конвективное смещение среды за времена релаксации температурных неоднородностей мало, по сравнению с их размерами, то конвекцией можно пренебречь из-за преобладающей роли диффузионной теплопередачи. С учетом двух характерных масштабов и диффузии тепла вдоль оси **z** (толщина среды l_0) подобные условия реализуются при

$$v_к << \frac{r_0}{\tau_0}; \quad v_к << \Lambda\left(\frac{1}{\tau_0}+\frac{1}{\tau}\right). \qquad (1)$$

Первое условие в (1) необходимо для доминирования диффузионной теплопередачи при установлении среднего значения температурного поля δT_0, второе – температурной решетки δT_{13}. Так как диффузия тепла вдоль оси **z** не влияет на поперечное распределение поля ($l_0 << r_0$), то диффузионные искажения отраженной волны при выполнении (1) будут связаны с угловой зависимостью $\tau \sim \theta^{-2}$ в толстых средах ($l_0 >> \Lambda$) и ими можно пренебречь при небольшой расходимости сигнала $\theta_c << \theta_0$.

Условия приобретают вид $\frac{v_к l_0^2}{\chi r_0^2} << 1$, $v_к\Lambda << 1$ при $\Lambda >> l_0$ и $v_к l^2/\chi\Lambda << 1$ при $\Lambda << l_0$. В последнем случае оба вида искажений отсутствуют и влияние на отраженную волну оказывает только тепловая линза. Так как скорость конвекции $v_к$ падает при уменьшении толщины среды l_0 из-за трения о поверхности границ, то искажения, обусловленные диффузией тепла и конвекцией, минимизируются при уменьшении толщины среды.

Степень влияния на ЧВ рассмотренных паразитных эффектов, сопровождающих тепловой механизм нелинейности в жидких средах, определяется нагревом сред. Для уменьшения искажений взаимодействующих волн этот нагрев необходимо ограничивать. Кроме того, в поглощающих жидких средах суммарная интенсивности волн ограничена температурой кипения. В связи с этим исследуем предельные возможности эффективности ЧВ на тепловой нелинейности при ограничении максимального нагрева величиной T_m.

Для оценки энергетических характеристик ЧВ рассмотрим коэффициент отражения по интенсивности:

$$R = G^2 W_{10} W_{2l}\, \mathrm{e}^{-\alpha l_0}\left(1-\mathrm{e}^{-\alpha l_0}\right)^2,$$

где W_i – плотности энергий волн. Интенсивности будем считать равными. Коэффициент отражения можно повышать, увеличивая интенсивности накачек до I_m (плотности энергии до W_m), пока температура среды не достигнет максимально допустимого значения δT_m к окончанию импульса.

При изменении поглощения максимальное значение коэффициента отражения R_{onm} достигается в слабо поглощающих средах ($\alpha l_0 << 1$) и растет квадратично с толщиной среды

$$R_{onm} = \left[\frac{k l_0}{2 n_0}\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_p \delta T_m\right]^2.$$

Одновременно растет требуемая плотность энергии волн накачек. При этом к.п.д. взаимодействия, который можно определить отношением энергии отраженной волны к суммарной энергии волн накачек, а также дифракционная эффективность голограммы будут максимальными.

При одинаковых размерах пучков падающих волн $r_{1,2,3} = r_0$ коэффициент отражения по яркости $R_{m\theta}$ при небольших значениях в 3 раза меньше R, а при больших не превышает $3R/16$ из-за действия тепловой линзы.

Уменьшение поперечных размером сигнальной волны по отношению к волнам накачки, приводит к улучшению расходимости отраженной волны, $R_{m\theta} = R$. Действие тепловой линзы уменьшается из-за того, что на апертуре сигнала профиль суммарной интенсивности волн приближается к плоскому. При этом используется небольшая часть мощности волн накачек. Для уменьшения фазовых искажений и снижения требований к потребляемой энергии предпочтительнее формировать эти волны с прямоугольным профилем интенсивности.

УДК 533.9

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ РЕЗОНАНСОВ В СЕЧЕНИИ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМА БЕРИЛЛИЯ МЕЖДУ ПЕРВЫМ И ВТОРЫМ ПОРОГАМИ

С.М. Бурков, А.С. Зайцев, В.И. Севериненко
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
figure0011@gmail.com

В этой статье рассматривается сечение процесса фотоионизации бериллия полученное R-матричным методом. Предлагается параметризация данного сечения по методу Фано в представлении комплексных энергий.

PARAMETRIZATION OF OVERLAPING RESONANCES IN SECTION OF PHOTOIONIZATION OF ATOM OF BERYLLIUM BETWEEN THE FIRST AND THE SECOND THRESHOLDS

S.M. Burkov, A.S. Zaitsev, V.I. Severinenko
Pacific National University (Khabarovsk)
figure0011@gmail.com

This article discusses the cross section of the beryllium photoionization process obtained by the R-matrix method. A parametrization of this cross section by the Fano method in the representation of complex energies is proposed.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.27-30

В данной работе производится анализ резонансной кривой сечения фотоионизации атома бериллия между первым и вторым порогами, соответствующим ($1s^2$ 2s;^{2}S| и ($1s^2$ 2p;^{2}P| состояниям остаточного иона Be^+. Теоретический расчет сечения рассеяния производился методом R-матрицы, с использованием численных орбиталей, построенных с помощью MCHF-95. Задача состоит в нахождении параметров, которые полностью определяют резонанс. Этими параметрами являются: положение резонанса E_m, ширина резонанса Γ_m и параметры, которые называются параметрами асимметрии Фано [1]: q и ρ. Этот метод обобщает теорию на сечения резонансной фотоионизации атомов в случае нескольких каналов распада и произвольного числа взаимодействующих состояний.

Для одного изолированного резонанса, распадающегося в произвольное количество открытых каналов формулы, полученные в рамках формализма [2] совпадает с формулой Фано.

$$\sigma_{tot}^{\nu}(E) = \sigma^{dir}(E)\left\{1 + \sum_m \left(\rho_m^2 \frac{(q_m+\epsilon_m)^2}{\epsilon_m^2+1} - \rho_m^2\right)\right\}. \quad (1)$$

Параметры Фано для отдельного резонанса можно приближенно оценить с использованием следующих формул:

$$q_m = \frac{1}{\rho_m}\left(\frac{\sigma_{max}^m}{\sigma^{dir}} - 1\right)^{1/2};\ \rho_m^2 = \left(1 - \frac{\sigma_{min}^m}{\sigma^{dir}}\right). \quad (2)$$

$$E_m = \frac{E_{min}^m + E_{max}^m q_m^2}{1+q_m^2}\ ; \quad (3)$$

$$\Gamma_m = \frac{2(E_{max}^m - E_{min}^m)q_m}{1+q_m^2}\,. \quad (4)$$

где $(\sigma_{max}^m; \sigma_{min}^m)$ – максимум и минимум сечения, $(E_{max}^m; E_{min}^m)$ – энергии в этих точках, σ_m^{dir} – фоновое сечение.

Теперь обратимся к обсуждению фона прямых переходов σ_m^{dir}. Неправильное определение этого параметра может значительно повлиять на аппроксимацию. Данный параметр входит как в параметры Фано, так и в итоговую многорезонансную формулу (1). В расчетах фоновое сечение вычислено в виде функции, из соображений минимизации отклонения итоговой аппроксимированной кривой. В области резонанса фоновое сечение, на основании резонансного условия, было вычислено как константный параметр, для каждого отдельного резонанса.

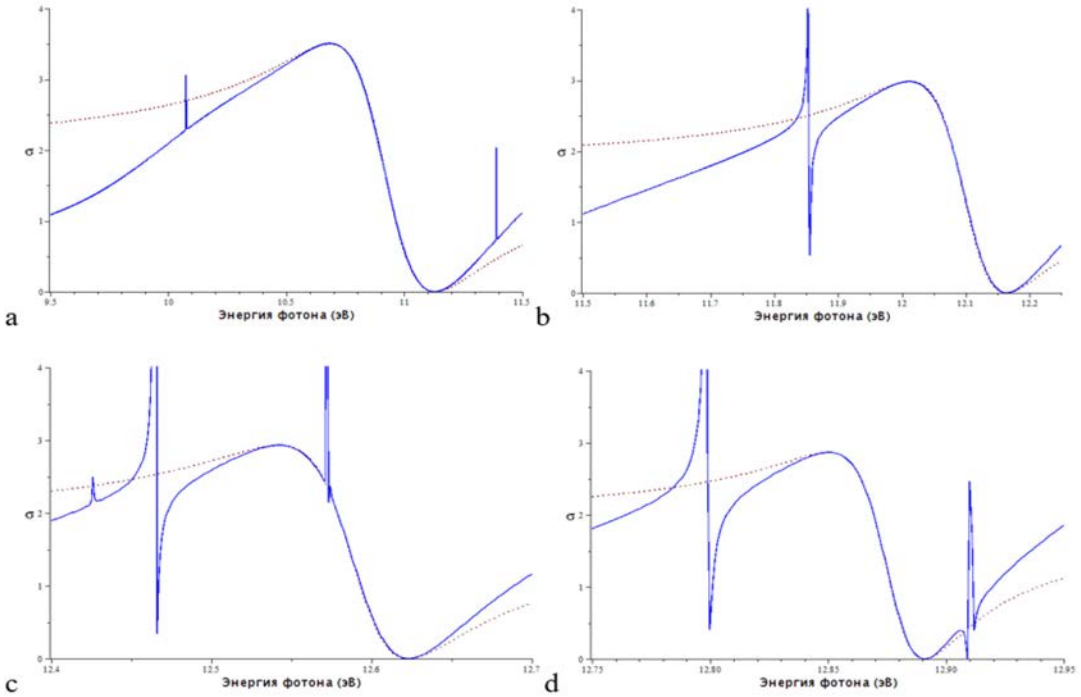


Рис. 1. Полное сечение процесса фотоионизации атома бериллия (непрерывная синяя линия); однорезонансное, независимое приближение первых четырех резонансов 2p3s (a), 2p4s (b), 2p5s (c), 2p6s (d) (пунктирная линия красного цвета).

Далее, рассмотрим приближение, которое получилось в результате применения многорезонансной формулы (1) (рис. 2.).

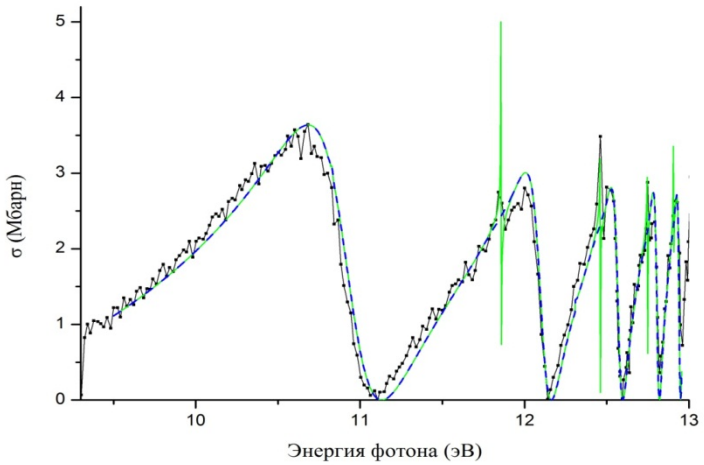


Рис. 2. Полное сечение процесса фотоионизации атома бериллия (непрерывная зеленая линия); Многорезонансное приближение широких *2pns*-резонансов (пунктирная линия синего цвета); полное сечение процесса ионизации атома бериллия – экспериментальные данные (черная линия); в области энергий 9.2-13.0 эВ.

Следует учитывать, что данные формулы так же больше подходят для описания неперекрывающихся резонансов. Однако при этом, параметры резонансов получаются физически более точными, в соответствии с тем, что параметры, описывающие форму резонанса (в нашем случае *q*), не должны меняться в зависимости от энергии или от других параметров резонанса (табл. 1.).

Таблица 1

Сравнительная таблица параметров *q* Фановских *2pns* резонансов для ионизации атома бериллия области энергий 9.5-13.05 эВ.

Q					
n	Эксп. [3]	Теор. [8]	Теор. [6]	Теор. [9]	Теор. Данная работа
3	-0.93	-0.83	-0.91	-0.71	-0.94
4	-0.52	-0.49	-0.64	-0.48	-0.85
5	-0.54	-0.44	-0.48	-0.38	-0.82
6	-0.48		-0.45		-0.73
7	-0.62		-0.40		-0.71

Кроме того, было проведено сравнение положений и ширин резонансов для *2pns* и сравнение положений *2pnd* резонансов (табл. 2, 3, 4).

Таблица 2

Сравнительная таблица положений *2pns* резонансов для ионизации атома бериллия области энергий 9.5-13.05 эВ.

Энергия E_0 (эВ)							
N	Эксп. [3]	Эксп. [4]	Эксп. [5]	Теор. [6]	Теор. [7]	Теор. [8]	Теор. Данная работа
3	10.889	10.7068	10.933	10.915	10.63	10.9103	10,9207
4	12.112	11.9678	12.096	12.102	12.09	12.0918	12,1005
5	12.571	12.5339	12.572	12.571	12.64	12.5579	12,5903
6	12.812	12.7820	12.811	12.800	12.91	12.7911	12,8766
7	12.944	12.9219	12.945	12.932	13.06	12.9239	13,0181

Таблица 3

Сравнительная таблица ширин *2pns* резонансов для ионизации атома бериллия области энергий 9.5-13.0 эВ.

Ширина Г (мэВ)					
n	Эксп. [3]	Теор. [8]	Теор. [6]	Теор. [9]	Теор. Данная работа
3	531	473	606	530	445
4	174	162	180	168	149
5	77	73	78	76	79
6	47		42		39
7	29		22		24

Таблица 4

Сравнительная таблица положений *2pnd* резонансов для ионизации атома бериллия области энергий 9.5-13.0 эВ.

Энергия E_0 (эВ)							
n	Эксп. [3]	Эксп. [4]	Эксп. [5]	Теор. [6]	Теор. [7]	Теор. [8]	Теор. Данная работа
3	11,840	11,8623	11,855	11,840	12,03	11,8310	11,8545
4	12,460	12,4658	12,503	12,448	12,61	12,4374	12,4649
5	12,742	12,7570	12,789	12,735	12,89	12,7272	12,7983
6		12,9192	12,952	12,893	13,05	12,8863	12,9753

Чтобы окончательно завершить рассмотрение полученных в данной работе результатов, осталось привести остальные параметры *2pnd* резонансов (табл. 5.). Эти резонансы также представляют интерес, кроме того, они наиболее подходят для применения резонансного приближения.

Таблица 5

Ширины и параметры Фано *q* для *2pnd* резонансов для ионизации атома бериллия области энергий 9.5-13.0 эВ.

n	Г мкэВ	q
3	307	-5.01
4	303	-4.39
5	207	-4.07
6	139	-3.85

В работе исследовались сечения фотоионизации атома бериллия полученные методом R-матрицы. Аппроксимация кривой сечения производилось с использованием формул полученных методом взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных энергий. Полученные результаты находятся в полном согласии с экспериментальными данными, полученными в работах [3-7]. В итоге, в работе была получена параметризация сечения процесса ионизации атома бериллия. Наибольший интерес представляют значения, полученные для параметров Фано *q*, так как они выгодно отличаются от полученных в других работах. Кроме того, интерес составляет и то, что применение многорезонансных формул для теории Фано в случае комплексно го представления, удалось применить для перекрывающихся, неизолированных резонансов. Представленное исследование ионизации бериллия касается двух каналов реакции, и ставит вопрос об определении фонового процесса.

---

1. Fano, U. Effects of configuration Interaction on Intensities and phase shifts // Phys. Rev. A. – 1961. – Vol. 124, № 6. – P. 1866-1874.

2. Burkov, S.M., Strakhova, S.I., Zajac, T.M. Total and partial generalized oscillator strengths for transitions to the continuum of helium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1990. – Vol. 23. – P. 3677-3690.

3. Wehliz, R., Lukic, D., Bluett, J.B. Single and double photoionization of beryllium below 40 eV. // Phys. Rev. A. – 2005. – Vol. 71.

4. Mehlman-Balloffet, G., Esteva, J.M. Far-ultraviolet absorption spectra with auto-ionized levels of beryllium and magnesium // Astrophys. J. – 1969. – Vol. 157. – P. 945.

5.Esteva, J.M, Mehlman-Balloffet, G., Romand, J. Spectres d'absorption dans l'ultraviolet lointain de Be, B, C, N, Mg, Al ET Si // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 1972. – Vol 12. – P. 1291.

6. Tully, J.A., Seaton, M.J., Berrington, K.A. Atomic data for opacity calculations. XIV. The beryllium sequence // J. Phys. – 1990. – Vol. 23. – P. 3811.

7. Kim, D.-S., Tayal, S.S., Zhou, H.-L., Manson, S.T. Photoionization of atomic beryllium from the ground state // Phys. Rev. A. – 2000. – Vol. 61.

Секция 2

Физика конденсированного состояния

УДК 537.226

С.В. Барышников
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
svbar2003@list.ru

Исследованы температурные зависимости диэлектрической проницаемости и амплитуды третьей гармоники в композите $(KNO_3)_{1-x}/(CsNO_3)_x$. Обнаружена стабилизация температурной области сегнетоэлектрической фазы III нитрата калия вплоть до температуры 77 К.

STABILIZATION OF POTASSIUM NITRATE FERROELECTRIC PHASE IN THE COMPOSITE $(KNO_3)_{1-x}/(CsNO_3)_x$

S.V. Baryshnikov
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
svbar2003@list.ru

The temperature dependences of the dielectric constant and the amplitude of the third harmonic in the $(KNO_3)_{1-x}/(CsNO_3)_x$ composite have been investigated. Stabilization of the temperature region of the potassium nitrate ferroelectric phase III of up to 77K has been found.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.31-33

Введение

Нитрат калия широко известен как материал с прямоугольной петлей гистерезиса и является удобным материалом для создания энергонезависимой сегнетоэлектрической памяти [1]. Однако сегнетоэлектрическая фаза в KNO_3 возникает только при охлаждении в узком температурном интервале. В ряде работ сообщалось о попытках расширения области существования сегнетоэлектрической фазы путем создания композитов и твердых растворов на основе нитрата калия [2-5]. Для сегнетоэлектрических композитов $(KNO_3)_{(1-x)}/(BaTiO_3)_x$ [2] и $(KNO_3)_{(1-x)}/(KNbO_3)_x$ [3] наблюдается расширение области существования сегнетоэлектрической фазы нитрата калия. В [5] сообщалось о расширении области существования сегнетоэлектрической фазы KNO_3 при легировании ионами Na^+. В данной работе исследуется влияние нитрата цезия на формирование сегнетоэлектрического состояния в KNO_3.

Образцы и методика эксперимента

Нитрат калия при комнатной температуре имеет ромбическую структуру (пространственная группа *Pmcn*) [6]. Эту фазу часто обозначают как фазу II. При нагреве образца около 401 K происходит переход в фазу I, имеющую разупорядоченную тригональную кальцитоподобную структуру $R\bar{3}m$. При охлаждении фаза II не превращается непосредственно в фазу I, а вместо этого при T = 397 K переходит в другую тригональную фазу III, которая является сегнетоэлектрической со спонтанной поляризацией вдоль оси *c*. Спонтанная поляризация составляет около 8-10 μC/cm^2 при температуре 393 K [6]. Было обнаружено, что температурный диапазон существования сегнетоэлектрического

состояния в KNO_3 зависит от тепловой предыстории и скорости охлаждения [7, 8] и при предварительном прогреве образца до 473 К для первого цикла нагрев-охлаждение составляет около 24 К.

Нитрат цезия $CsNO_3$ при комнатной температуре имеет тригональную симметрию. Атомы Cs образуют псевдокубическую подрешетку с девятью псевдокубами на элементарную ячейку. Кристаллическая структура низкотемпературной фазы была определена как полярная тригональная с постоянными решетки a = 10.950 А, c = 7,716 А [9] и спонтанной поляризацией P_s порядка 1-2 мкК/см^2 (при температуре 410-420 К) [10]. Выше температуры Кюри (T_c = 427 К) элементарная ячейка является кубической, с восемью формульными единицами и постоянной решетки a = 8,980 А.

Для получения образцов использовались порошки KNO_3 и $CsNO_3$ с частицами размером 5-10 мкм. Порошки смешивались в соответствующих пропорциях (10 и 20 объемных % $CsNO_3$) и тщательно перемешивались, затем из них прессовались образцы в виде таблеток с диаметром 10 мм и толщиной 1.5 мм при давлении $8\cdot10^3$ кг/см^2.

Для измерения диэлектрической проницаемости образцов использовался цифровой измеритель импеданса Е7-25 с частотным диапазоном 25 Гц – 10^6 Гц. В качестве электродов применялась In-Ga паста. Измерения проводились со скоростью нагрева-охлаждения ~ 2 К/мин в температурном интервале, охватывающем фазовые переходы в KNO_3. Температура фиксировалась электронным термометром Center 340 с хромель-алюмелевой термопарой. Перед измерениями для удаления адсорбированной воды образцы в течение 30 минут прогревались при температуре 420 К.

Установка для исследований нелинейных диэлектрических свойств образцов включала в себя генератор гармонических колебаний с рабочей частотой 2 kHz. Напряженность электрического поля на образцах в процессе измерения составляла 40 В/мм. 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 ZETView. При определении области существования сегнетоэлектрической фазы использовался коэффициент третьей гармоники ($\gamma_{3\omega} = U_{3\omega}/U_\omega$) или пятой гармоники ($\gamma_{5\omega} = U_{5\omega}/U_\omega$). Более подробно методика исследования сегнетоэлектриков с использованием нелинейной диэлектрической спектроскопии описана в [11, 12].

Экспериментальные результаты и обсуждение

Температурные зависимости диэлектрической проницаемости ε' и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ для поликристаллического нитрата калия представлены на рис. 1.

При прогреве до 423 К аномалии на кривой ε'(T) при нагреве и охлаждении соответствуют переходу между фазами II и I. Наблюдаемый гистерезис обусловлен фазовым переходом первого рода. Других структурных переходов в процессе охлаждения не наблюдалось.

Согласно данным по коэффициенту третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ (рис. 1), сегнетоэлектрическая фаза в нитрате калия возникает при охлаждении, что соответствует известным данным [6]. Температурный интервал ее существования составляет примерно 24 К.

На рис. 2 приведена температурная зависимость ε' и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ для композита $(KNO_3)_{0.9}/(CsNO_3)_{0.1}$.

Как показали исследования, сегнетоэлектрическая фаза в данном композите возникает в первом цикле нагрев – охлаждение и сохраняется до комнатной температуры. Дополнительные исследования показали, что полярное состояние сохраняется и после охлаждения образца до температуры 77 К. Однако спонтанная поляризация, оцененная из коэффициента третьей гармоники для $(KNO_3)_{0.9}/(CsNO_3)_{0.1,}$ падает примерно в 3.5 раза по сравнению с чистым KNO_3, что свидетельствует о понижении спонтанной поляризации в 1.8 раза.

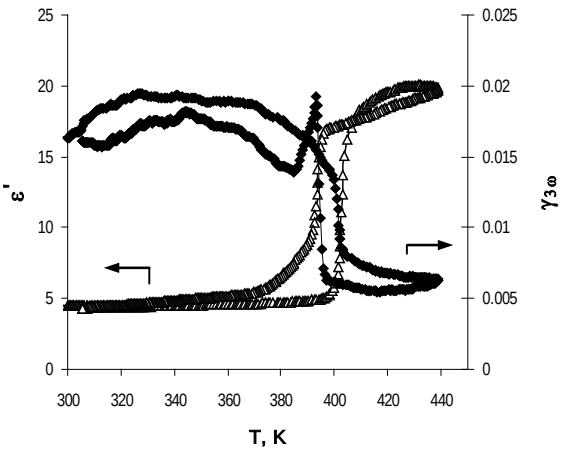


Рис. 1. Зависимости ε'(*T*) на частоте 20 кГц (треугольники) и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ (ромбы) для KNO_3.

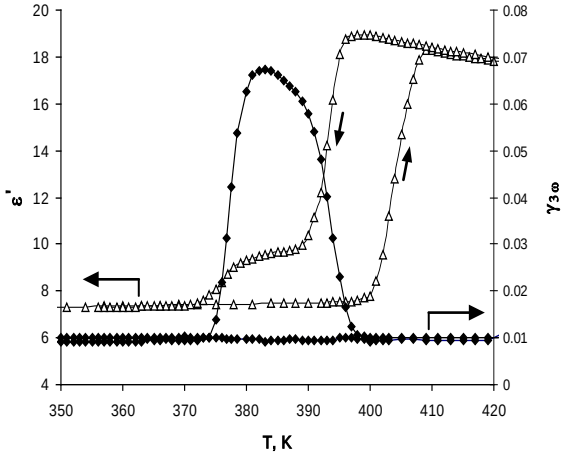


Рис. 2. Зависимости ε'(*T*) на частоте 20 кГц (треугольники) и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ (ромбы) для $(KNO_3)_{0.9}/(CsNO_3)_{0.1}$.

Для состава $(KNO_3)_{0.8}/(CsNO_3)_{0.2}$ наблюдается аналогичная зависимость, но фазовый переход больше размыт и коэффициент третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ на 20 % выше. На первом цикле нагрева наблюдается небольшая аномалия диэлектрической проницаемости, соответствующая фазовому переходу в $CsNO_3$ (T_c = 427 K). При дальнейших циклах нагрев – охлаждение эта аномалия исчезает, что может указывать на образование твердого раствора $K_{0.8}Cs_{0.2}NO_3$. В пользу этого свидетельствует большая ионная проводимость в $CsNO_3$ при высоких температурах [13].

Таким образом, в работе показано, что добавление $CsNO_3$ в KNO_3 приводит к стабилизации полярного состояния нитрата калия в широком температурном интервале, но понижению спонтанной поляризации последнего.

---

1. Scott, J.F. Ferroelectric Memories // Springer Series in Advanced Microelectronics. –2000. –V. 3, iss. 26. – 248 p.

2. Stukova, E.V., Baryshnikov, S.V. Stabilization of the ferroelectric phase in $(KNO_3)_{1-x}$ – $(BaTiO_3)_x$ Composites // Inorganic materials: applied research. – 2011. – V.2, № 5. – P.434-438.

3. Stukova, E.V. Baryshnikov, S.V. Диэлектрические исследования сегнетоэлектрических композитов на основе $(KNO_3)_{1-x}$ – $(KNbO_3)_x$. // Перспективные материалы. – 2011. – № 13. – С.801-805.

4. Shimada, S., Aoki, T. Stabilization of the ferroelectric phase of KNO_3 by doping with Na+, determined by theacoustic emission method // Chemistry Letters. – 1996. – V. 25, iss. 5. – P. 393-394.

5. Милинский, А.Ю. Иванюк, Ю.О., Барышников, С.В. Стабилизация сегнетоэлектрической фазы KNO_3 в твердых растворах $(KNO_3)_{1-x}(NaNO_2)_x$. // Известия Самарского научного центра РАН. – 2012. – Т.14, № 4. – С. 141-147.

6. Chen, A., Chernow, A. Nature of feroelectricity in KNO_3 // Phys. Rev. – 1967. – V.154, № 2. – P. 493-505.

7. Deshpande, V.V., Karkhanavala, M.D., Rao, U.R.K. Phase transitions in potassium nitrate // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 1974. – V. 6. – P. 613-621.

8. Nimmo, J.K., Lucas, B.W. The crystal structures of γ– and β– KNO_3 and the α←γ←β phase transformations. // Acta Cryst. – 1976. – V. B32. – P. 1968-1971.

9. Lucas, B.W. The structure (neutron) of phase II caesium nitrate at 298 K, $CsNO_3$. //Acta Cryst. –1983. – C39. – P1591-1594.

10. Takagi, Y., Kimura, S., Takeuchi, Y. Structural Phase Transition of $CsNO_3$ Crystal. Spontaneous Polarization // Ferroelectrics.– 2003. – V. 284.– P. 129-135.

11. Ikeda, S., Kominami, H., Koyama, K., Wada, Y.J. Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluo-ride and trifluoroethylene // Appl. Phys. –1987. –V. 62, № 8. – P. 3339–3342.

12. Yudin, S.G., Blinov, L.M., Petukhova, N.N., Palto, S.P. Ferroelectric phase transition in Langmuir-Blodgett films of copper phthalocyanine // Journal of Ex-perimental and Theoretical Physics Letters. 1999.– V.70, № 9. – P. 633-640.

13. Бурмакин, Е.И. Твердые электролиты с проводимостью по катионам щелочных металлов. – М.: Наука, 1992. – 264 с

УДК 538.958

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ АДДИТИВНОСТИ КОМБИНИРОВАННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ПОТОКОВ ЭЛЕКТРОНОВ И ПРОТОНОВ НА МИКРОПОРОШКИ ОКСИДА ЦИНКА

И.В. Верхотурова, В.В. Нещименко
Амурский государственный университет (г.Благовещенск)
rusia@mail.ru

В настоящей работе приведены результаты расчета коэффициента аддитивности оптических свойств оксида цинка, применяемого в качестве пигмента терморегулирующих покрытий, при облучении его одинаковыми по энергии, но разными по типу заряженными частицами при разных режимах.

CALCULATION OF THE ADDITIVITY COEFFICIENTS OF THE COMBINED EXPOSURE OF ELECTRON AND PROTON FLUXES ON ZINC OXIDE MICROPOWDERS

I.V. Verkhoturova, V.V. Neshchimenko
Amur State University (Blagoveshchensk)
rusia@mail.ru

This work presents the results of calculating the additivity coefficient of the optical properties of zinc oxide, used as a pigment for thermoregulatory coatings, when irradiated with charged particles of the same energy but different in type under different modes.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.34-35

В настоящее время особый интерес в области космического материаловедения представляют исследования синергетических эффектов, возникающих материалах внешних покрытий космических аппаратов под действием факторов космического пространства [1-4]. В работах [2, 3] представлены результаты исследования и интерпретации синергетических эффектов (неаддитивность свойств) при воздействии ионизирующих излучений и электромагнитного излучения Солнца на полиимидные пленки и на эмали ЭКОМ-1, представляющей собой композицию из акрилового сополимера и порошка оксида цинка ZnO. Однако вопрос о причинах возникновения эффекта не аддитивности остаётся открытым.

Для исследования эффекта неаддитивности, выражающегося в неодинаковости изменения оптических свойств оксида цинка, применяемого в качестве пигмента терморегулирующих покрытий, проведено облучение микропорошков оксида цинка одинаковыми по энергии, но разными по типу заряженными частицами (протонами и электронами) при разных режимах. Облучение микропорошков ZnO протонами (энергией 100 кэВ, флюенсом $3\cdot10^{15}$ см$^{-2}$, плотностью потока $5\cdot10^{11}$ см$^{-2}\cdot$с$^{-1}$ и электронами (энергией 100 кэВ, флюенсом $6\cdot10^{15}$ см$^{-2}$, плотностью потока $1\cdot10^{12}$ см$^{-2}\cdot$с$^{-1}$) проводилось в комплексном имитаторе факторов космического пространства «КИФК» (Харбинский политехнический университет, Китай). Воздействие на оксид цинка ионизирующим излучением было следующим: облучение только протонами (p^+); облучение только электронами (e^-); комбинированное облучение (одновременно протонами и электронами ($p^+ + e^-$), комплексно сначала электронами затем протонами ($e^- \rightarrow p^+$), комплексно сначала протонами затем электронами ($p^+ \rightarrow e^-$). Исследование измене-

ния оптических свойств оксида цинка проводилось по спектрам диффузного отражения, полученным абсолютным методом (*in situ*) также к камере «КИФК».

С помощью разностных спектров диффузного отражения микропорошков рассчитан интегральный коэффициент поглощения солнечного излучения α_s и его изменение $\Delta\alpha_s$, определяющие оптические свойства пигментов. Полученные значения $\Delta\alpha_s$ использовались для расчета коэффициента аддитивности, количественно определяющего эффект неаддитивности комбинированного воздействия ионизирующего излучения на микропорошки оксида цинка. Данный коэффициент определялся как отношение изменения коэффициента поглощения при каком-либо из комбинированных режимов облучения к суммарному изменению коэффициента поглощения при раздельном воздействии каждого из видов излучений [1, 4, 5]. Результаты расчетов коэффициентов аддитивности представлены в таблице

Значения коэффициентов аддитивности комбинированного воздействия потоков электронов и протонов

Суммарное изменение коэффициента поглощения при раздельном облучении электронами и протонами $\Delta\alpha_s^{sum}$	Коэффициенты аддитивности комбинированного воздействия потоков электронов и протонов		
	$K_{адд}^{p^+ + e^-}$	$K_{адд}^{e^- \to p^+}$	$K_{адд}^{p^+ \to e^-}$
0,137	0,577	0,569	0,365

Расчеты изменения интегрального коэффициента поглощения солнечного излучения и коэффициента аддитивности при комбинированном облучении оксида цинка одинаковыми по энергии, но разными по типу заряженными частицами показали, что присутствие электронов в потоке ионизирующих частиц понижает деградацию отражательной способности пигментов от действия потока протонов. Наименьшее изменение величины коэффициента поглощения солнечного излучения микропорошков оксида цинка при воздействии на него двух типов ионизирующих частиц наблюдается при комплексном облучении сначала протонами затем электронами. Это может объясняться тем, что при этом виде комбинированного воздействия концентрация определённого типа наведенных центров поглощения, механизмы их радиационного дефектообразования и взаимодействия с исходными дефектами облучаемой структуры могут отличаться от аналогичных при двух других режимах комбинированного облучения. Причина этого требует дальнейшего уточнения.

1. Семкин, Н.Д. Испытания материалов и элементов электронного оборудования космических аппаратов**:** учеб. пособие. – Самара: Изд-во Самарского гос. аэрокосм. ун-та, 2010. – 320 с.

2. Шувалов, В.А. Синергетический эффект воздействия потоков атомарного кислорода и вакуумного ультрафиолета на полиимидные пленки космических аппаратов / В.А. Шувалов, Н.А. Токмак, Н.И. Письменный, Г.С. Кочубей // Космічна наука і технологія. – 2012. – Т. 18, № 3. – С. 10-19.

3. Хасаншин, Р.Х. Синергетические эффекты в процессе потери массы эмали ЭКОМ-1 при совместном воздействии электронов, протонов и электромагнитного излучения / Р.Х. Хасаншин, Л.С. Новиков // Физика и химия обработки материалов. – 2015. – № 5. – С.14-21.

4. Верхотурова, И.В. Исследование совместного действия заряженных частиц на микропорошки оксида цинка / И.В. Верхотурова, В.В. Нещименко // Вестник АмГУ. Серия «Естественные и экономические науки». – 2020. – Вып. 89. – С. 45-48.

5. Верхотурова, И.В. Влияние последовательного и одновременного облучения протонами и электронами на образование радиационных дефектов в оксиде цинка / И.В. Верхотурова, В.Ю. Юрина, В.В. Нещименко, Ли Чундун // Материалы XVIII регион. науч. конф. «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование». 10–12 ноября 2020 г., г. Хабаровск. – С. 109–112.

УДК 538.91 + 538.95

ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ И ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ СИЛИЦИДЫ НА КРЕМНИИ КАК МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ И ТЕРМОЭЛЕКТРОНИКИ

Н.Г. Галкин, К.Н. Галкин, О.В. Кропачев, И.М. Чернев, С.А. Доценко, А.В. Шевлягин, А.В. Тупкало, Е.Ю. Субботин

Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН (г. Владивосток)

galkin@iacp.dvo.ru

Представлены результаты по росту эпитаксиальных и нанокристаллических пленок Ca_2Si, $CaSi$ $CaSi_2$ на монокристаллических подложках кремния и сапфира. Исследованы особенности их упорядочения в эпитаксиальных и поликристаллических пленках и установлены изменения параметров их кристаллических решеток. Определены особенности оптических функций и параметров зонной структуры полупроводниковых пленок Ca_2Si и полуметаллических пленок $CaSi$ и $CaSi_2$. Показано, что эпитаксиальные пленки $CaSi_2$ являются более проводящими по сравнению с нанокристаллическими пленками $CaSi$. Установлено, что внедрение нанокристаллов Ca_2Si или аморфной фазы $CaSi$ в нанокристаллические пленки $CaSi$ обеспечивает рост коэффициента Зеебека и фактора мощности. Показаны возможности для практического использования силицидов кальция.

SEMICONDUCTING AND SEMIMETAL SILICIDES ON SILICON AS MATERIALS FOR OPTOELECTRONICS AND THERMOELECTRONICS

N.G. Galkin, K.N. Galkin, O.V. Kropachev, I.M. Chernev, S.A. Dotsenko, A.V. Shevlyagin, A.V. Tupkalo, E.Y. Subbotin

Institute of Automation and Control Processes FEB RAS (Vladivostok)

galkin@iacp.dvo.ru

The results on the growth of epitaxial and nanocrystalline Ca_2Si, $CaSi$ $CaSi_2$ films on single-crystal silicon and sapphire substrates are presented. The features of their ordering in epitaxial and polycrystalline films are investigated and changes in the parameters of their crystal lattices are established. The features of the optical functions and parameters of the band structure of semiconductor Ca_2Si films and semimetallic $CaSi$ and $CaSi_2$ films are determined. It is shown that epitaxial $CaSi_2$ films are more conductive than nanocrystalline $CaSi$ films. It was found that the incorporation of Ca_2Si nanocrystals or the amorphous $CaSi$ phase into nanocrystalline $CaSi$ films provides an increase in the Seebeck coefficient and power factor. Possibilities for the practical use of calcium silicides are shown.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.36-41

В настоящее время силициды щелочноземельных (Mg, Sr, Ca) [1,2] металлов привлекают внимание исследователей как экологически чистые, дешевые и совместимые с кремниевой планарной технологией материалы, обладающие полупроводниковыми [1], металлическими [3] и полуметаллическими [4] свойствами и перспективные для создания ИК-фотодиодов [5] и термоэлектрических преобразователей [6]. Большой интерес также представляет совместимость указанных силицидов с кремниевой планарной технологией, которая позволяет планировать миниатюризацию термоэлектрических преобразователей и их использование в качестве источников энергии, собирающих отходящее

тепло для микросхем автоматизации и обмена данными в производственной среде Интернета вещей [7].

Кальций, являясь щелочноземельным металлом и элементом, широко распространенным в земной коре, образует по крайней мере шесть силицидов с различной кристаллической структурой и составом (Ca_2Si, CaSi, Ca_5Si_3, Ca_3Si_4, $Ca_{14}Si_{19}$ и $CaSi_2$ [8]), которые имеют различную электронную структуру от из полупроводника [9] в полуметаллический [10]. Такое обилие фаз может привести к их широкому использованию в различных областях оптоэлектроники и термоэлектроники. Широкий спектр свойств и возможных применений связан с тонкой настройкой электронной структуры силицидов кальция с увеличением концентрации кремния и изменением в них доли ковалентных и ионных связей за счет вовлечения d-электронов Ca в связь с кремнием [10,11] и кинетические факторов, таких как скорость осаждения кальция и кремния [12], температура подложки и ее ориентация.

Достаточно большое внимание было уделено эпитаксиальному росту $CaSi_2$ на Si(111) [13,14] и двойным гетероструктурам на его основе [13,15], но полупроводниковым пленкам Ca_2Si и полуметаллическим пленкам CaSi и $CaSi_2$ на подложках Si(111), Si(110), Si(100) и сапфире не было уделено заметного внимания до настоящего времени. Это связано с небольшой разницей в энергии формирования силицидов кальция различного состава [16], а также – с влиянием рассогласования кристаллических решеток силицидов кальция при росте в виде пленок [17]. Это приводит к росту смеси фаз на кремнии, что осложняет их эпитаксиальный рост, а также – их использование для практических целей и построения приборных структур.

В данном докладе основное внимание будет уделено проблемам роста на кремнии и сапфире пленок полупроводникового силицида кальция (Ca_2Si), а на кремнии - пленок полуметаллических силицидов кальция (CaSi и $CaSi_2$), обладающих частичной прозрачностью в ближнем и среднем ИК-диапазоне. Будут рассмотрены структура, оптические, электрические и термоэлектрические свойства пленок, включая эпитаксиальные. На основе анализа свойств выращенных пленок будут предложены виды приборных структур, в которых они могут быть использованы.

Эксперимент

Рост пленок силицида Ca проводился в сверхвысоковакуумных (СВВ) камерах в установках OMICRON Compact и VARIAN с базовым вакуумом $1\cdot10^{-10}$ Торр. СВВ-Камеры были оснащена источниками сублимации ячеек Si и Кнудсена для осаждения Ca и Mg, анализаторами ДМЭ и ЭОС/ХПЭЭ и кварцевым датчиком толщины. Рост пленок Ca_2Si всех подложках (кремний и сапфир) осуществлялся в установке Omicron-Compact при соосаждении Si и Ca (метод МЛЭ) при температуре 250 ^oC на предварительно сформированный затравочный слой Mg_2Si, который преобразовывался в Ca_2Si при осаждении атомов Ca на подложку при 250 ^oC. Пленки CaSi и $CaSi_2$ выращивали в установке VARIAN путем совместного осаждения Ca и Si и отжига (метод твердофазной эпитаксии (ТФЭ)) или осаждения Ca (метод реактивной эпитаксии (РЭ)) на подложках Si(100), Si(111) и Si(110) при различных температурах от 190 до 650 ^oC. Прямоугольные полоски FZ Si(111) или Si(100) (4,6x12 мм^2) p-типа с удельным сопротивлением соответственно 2000 Ом·см и 45 Ом·см, соответственно, использовались как подложки и/или источники сублимации кремния. Скорость осаждения Mg для образования Mg_2Si была постоянной и составляла 0,1 нм/мин. Скорость осаждения Ca по данным датчика толщины кварца составляла 0,1 нм/мин для замещения Mg и 6,5 нм/мин для роста молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), а для Si она составляла 0,5 нм/мин во всех экспериментах по выращиванию.

После выгрузки образцов из СВВ камеры морфология поверхности пленок силицида Ca и ее структура, а также оптические, электрические и термоэлектрические свойства выращенных пленок были исследованы с использованием методов, описанных в [13,18].

Основные результаты

В рамках разработанных подходов к росту были выращены более 30 образцов. Исследованы комплексно 23 образца с пленками силицидов Ca, выращенные методами МЛЭ (15 образцов) и РЭ (8 образцов) при различных температурах на кремниевых подложках с различной ориентацией и на монокристаллическом сапфире. Основной упор был сделан на рост пленок Ca_2Si на подложках Si(111), Si(100) и Si(110) методом МЛЭ с различным отношением скоростей осаждения Ca и Si. Определено их оптимальное соотношение при осаждении на сформированный затравочный слой Ca_2Si при двух температурах осаждения 250 ^oC и 300 ^oC. Анализ структуры, фазового состава, оптических и фононных свойств пленок, выращенных методом МЛЭ на поверхностях кремния с ориентациями (111), (100) и (110) показал, что оптимальной температурой однофазного формирования Ca_2Si является температура 250 ^oC. Увеличение температуры подложки до 300 ^oC при доращивании на затравочном слое приводит к увеличению вклада фазы CaSi и блокированию роста Ca_2Si не зависимо от соотношения скоростей осаждения кальция и кремния. Апробирован и структурно обоснован метод МЛЭ роста Ca_2Si на монокристаллическом сапфире путем осаждения тонкого слоя аморфного кремния, формирования при T=150 ^oC жертвенного слоя Mg_2Si с последующей его трансформацией в Ca_2Si при осаждении атомов Ca со скоростью 0.1 нм/мин при T=300 ^oC и дальнейшем увеличение толщины пленки Ca_2Si при со-осаждении кальция и кремния при T=250 ^oC. Анализ структуры выращенных пленок показал, что формирование затравочного слоя Ca_2Si через жертвенный слой Mg_2Si является не только ориентирующим фактором, но и фазостабилизирующим фактором, облегчающим дальнейший рост Ca_2Si, как на кремнии, так и на сапфире при фиксированной температуре подложки.

Для всех образцов с пленками Ca_2Si проведена регистрация спектров пропускания и отражения, а также - расчет основных оптических функций в рамках двухслойной модели с резкой границей раздела и учетом поглощения и многократного отражения в пленке и подложке, но без учета интерференционных явлений в пленках с разной толщиной. Для всех пленок Ca_2Si на подложках с ориентациями (111) и (110), независимо от их толщины и структурного качества наблюдается первый прямой межзонный переход с энергией от 1.02 эВ до 1.09 эВ, который не является фундаментальным. Показано, что надежное определение величины данного межзонного перехода возрастает с уменьшением толщины пленки, улучшением ее однофазности и кристаллического качества. Для пленок Ca_2Si с наилучшим кристаллическим качеством на подложке Si(111) определен бездисперсионный коэффициент преломления ($\boldsymbol{n_o}$=4.0±0.03) для энергий фотонов ниже 0.7 эВ, что доказывает вклад фундаментального перехода в диапазоне энергий 0.7-1.0 эВ. По данным температурных измерений спектров отражения и пропускания пленок Ca_2Si на кремнии и сапфире определен фундаментальный прямой межзонный переход E_g=0.82±0.04 эВ, а также впервые установлена температурная зависимость коэффициента поглощения пленки Ca_2Si в диапазоне T=83-293 K, свидетельствующая об увеличении ширины запрещенной зоны с уменьшением температуры за счет упругого сжатия решетки Ca_2Si.

Для пленки Ca_2Si с максимальным кристаллическим качеством проведены расчеты по методу Крамерса-Кронига. Показано, что основные пики в спектре коэффициента преломления с энергиями 1.60 эВ, 2.0 эВ, 2.67 эВ, 3.25 эВ и 4.05 эВ повторяют пики в спектре отражения. Спектр коэффициента экстинкции показывает основной рост выше 1.7 эВ, что соответствует вкладу от высокоэнергетических межзонных переходов в пленке Ca_2Si. Сравнение данных расчетов зонной энергетической структуры из первых принципов и оптических свойств для монокристалла Ca_2Si и двумерных слоев Ca_2Si с экспериментальными данными в области высокоэнергетических переходов показало хорошее совпадение основных максимумов в теоретических и экспериментальных спектрах отражения.

Для получения однофазных пленок CaSi на кремнии с ориентацией (111) апробированы два метода роста, а также исследованы их структура, оптические и фононные свойства. В образце, выращенном методом РЭ при 500 ^oC, обнаружен преимущественный вклад (99%) фазы CaSi с ориентацией

CaSi(010)/Si(111). Вклад от пиков фазы tr3-$CaSi_2$(001) составляет около одного процента. При этом также наблюдается эпитаксиальная ориентация: tr3-$CaSi_2$(001)/Si(111). При росте через жертвенный слой Mg_2Si и затравочный слой Ca_2Si с постепенным превращением в фазу CaSi путем более высокотемпературного осаждения Ca и Si при T= 300 ^oC и 400 ^oC методом МЛЭ наблюдалось формирование поликристаллического слоя CaSi с тремя типами кристаллитов CaSi: CaSi(020), CaSi (110) и CaSi(170). Формирование эпитаксиальных кристаллитов CaSi по методу МЛЭ было подтверждено также данными ПЭМ и ВРПЭМ на поперечном срезе. Из данных быстрого преобразования Фурье (БПФ) для зёрен силицида CaSi первого типа с эпитаксиальными соотношениями: CaSi[001]||Si[$\bar{1}$10] и CaSi(220)||Si(111) получены межплоскостные расстояния для плоскостей CaSi(200) и CaSi(020): 0.2279 нм и 0.5396 нм, по которым определены постоянные решётки ***a***=0.4558 нм (-0.04%) и ***b***=1.0793 нм (0.57%). Оказалось, что решётка слегка сжата (сжатие всего на 0.04%) в направлении CaSi[100] и растянута на 0.57% в направлении CaSi[010]. Для зерен CaSi второго типа с эпитаксиальными соотношениями: CaSi[00-1]||Si[-110] и CaSi(220)||Si(111) получены межплоскостные расстояния 0.2241 нм и 0.5528 нм для плоскостей CaSi(200) и CaSi(020), что позволило определить постоянные решётки для этого зерна: ***a***=0.4483 нм (-1.68%) и ***b***=1.1057 нм (3.03%). Решётка такого зерна сжата на 1.68% в направлении CaSi[100] и растянута на 3.03% в направлении CaSi[010]. Установлено, что количество зёрен CaSi второго типа в плёнке является большим, чем зерен первого типа. По данным оптической спектроскопии рассчитаны основные оптические функции пленки CaSi в диапазоне энергий фотонов 0.05 – 1.2 эВ. Проведено сравнение экспериментальных оптических данных с данными первопринципных расчетов оптических свойств CaSi. Показано хорошее совпадение основных межзонных переходов в спектрах отражения и отклонение от оптических функций в области малых энергий фотонов, что связано с вкладом поглощения на дефектах в выращенных пленках. Дополнительное исследование выращенных образцов с пленками CaSi методом КРС показало наличие сдвигов основных пиков КРС при 100 – 220 $см^{-1}$ и 350-380 $см^{-1}$, что связано с различной ориентацией кристаллитов CaSi.

Апробирован рост пленок $CaSi_2$ на кремнии с ориентациями (111), (100) и (110) методом РЭ при различных скоростях осаждения кальция и температурах подложки. Установлено, что при температурах подложки от 500 ^oC до 600 ^oC формируется смесь двух силицидных фаз tr3-$CaSi_2$ и tr6-$CaSi_2$ с различным процентным соотношением на трех типах подложек. При росте методом МЛЭ на подложке Si(111) удалось при T=680 ^oC получить толстую (382 нм) монофазную пленку с эпитаксиальными соотношениями: tr6-$CaSi_2$[100]||Si[10] и tr6-$CaSi_2$(01$\bar{1}$)||Si(002). По данным высокоразрешающей ПЭМ в пленке $CaSi_2$ обнаружено два типа зерен со следующими эпитаксиальными ориентациями: (1 тип) - tr6-$CaSi_2$[100]||Si[1$\bar{1}$0] и trR6-$CaSi_2$(01$\bar{1}$)||Si(002) и (2 тип) - tr6-$CaSi_2$[$\bar{1}$00]||Si[1$\bar{1}$0] и tr6-$CaSi_2$(012)||Si(002).

Регистрация спектров пропускания и отражения выращенных образцов с пленками $CaSi_2$ в диапазоне энергий фотонов от 0.05 эВ до 6.5 эВ показала, что основными особенностями является частичная прозрачность в диапазоне энергий фотонов 0.4 – 1.1 эВ и плазменный минимум в отражении, что ранее наблюдалось для пленок $CaSi_2$ на подложке Si(111) с полуметаллическими свойствами [13]. Сравнение с данными теоретических спектров отражения для трех плоскостей монокристаллов $CaSi_2$ показало хорошее совпадение по пикам в $CaSi_2$, что соответствует основным межзонным переходам в монокристаллах. Следует отметить близкие положения плазменного минимума при теоретических расчетов в $CaSi_2$, который согласно данным расчетов связан с вкладом двух типов носителей, с данными эксперимента. Расчеты из R- и T- спектров коэффициентов поглощения (□) для выращенных пленок $CaSi_2$ показали существенные их значения (3×10^4 – 2×10^5 $см^{-1}$) в области менее 1.2 эВ, что можно связать с вкладом дефектов в пленках $CaSi_2$. Это подтверждается сравнением с данными первопринципных расчетов для монокристаллов $CaSi_2$, для которых значения □ при 0.5 - 1.2 эВ были несколько меньшими. Впервые зарегистрированы пики в спектрах КРС для однофазных пленок $CaSi_2$

(201,3; 330,0; 381,9; 412,2 и 439,5 $см^{-1}$), при этом их величина и полуширина соответствуют высокому кристаллическому качеству пленок $CaSi_2$.

Исследована взаимосвязь морфологии зерен, низкотемпературного холловского и магниторезистивного эффектов, а также высокотемпературной термоэлектрической генерации носителей в нанокристаллических пленках CaSi. Обнаружено, что в пленках CaSi с различным качеством кристаллов и фазовым составом полуметаллический тип проводимости наблюдается в интервале температур 80 - 300 K, в котором дырки являются наиболее подвижными носителями, согласно холловских измерений. Добавление аморфной или нанокристаллической фазы полупроводникового силицида кальция (Ca_2Si) к нанокристаллической фазе CaSi приводит к увеличению коэффициента Холла и, соответственно, к уменьшению концентрации дырок при T = 300 K по сравнению с однофазной нанокристаллической пленкой CaSi. Охлаждение нанокристаллических пленок CaSi с различным фазовым составом от 100K до 50K выявило фазовый переход полуметалл-полупроводник, который сопровождается появлением гигантского линейного магнитосопротивления (от 180% до 510%) в полях 4 Тл в зависимости от фазы и состава пленок. Предполагается, что этот эффект обусловлен введением в нанокристаллические пленки CaSi напряжений, приводящих к изменению их зонной структуры вблизи уровня Ферми. Исследование термоэлектрической генерации в однофазных нанокристаллических пленках CaSi в интервале температур 330–460 К показало, что пленки CaSi, независимо от эффекта шунтирования подложкой, сохраняют полуметаллические свойства с основным вкладом дырок в малый коэффициент Зеебека, что значительно снижает коэффициент мощности этих пленок. Установлено, что нанокристаллические пленки CaSi, внедренные в аморфную матрицу CaSi, имеют практическое значение для термоэлектрических генераторов, что на порядок увеличивает их коэффициент мощности при температурах 350-450 К по сравнению с монокристаллическим кремнием КДБ-45.

Показано, что эпитаксиальные пленки $CaSi_2$ являются более проводящими по сравнению с нанокристаллическими пленками с составом CaSi за счет высокой и практически независимой от температуры концентрации свободных электронов около уровня Ферми, но и поглощение света в них более значительное. Известно [14], что на n-типе кремния высота барьера Шоттки $CaSi_2$/Si-n составляет 0.25 эВ, а на кремнии p-типа проводимости она равна 0.82 эВ. Поэтому первым применением может быть создание фотодиодов на основе эпитаксиальной пленки $CaSi_2$ и Si p-типа проводимости с границей внутреннего фотоэффекта около 1.5 мкм, а барьер $CaSi_2$/Si-n может быть использован в качестве омического контакта к кремнию n-типа проводимости при дополнительном легировании и увеличении концентрации в нем электронов. Второе применение это создание полупрозрачных и проводящих контактных площадок к солнечным элементам на основе Si p-n перехода (контакт к n-слою кремния) или его модификаций. Необходимо выбрать толщину пленки $CaSi_2$ не более 50 нм, чтобы обеспечить примерно 30-40% пропускание света к ниже лежащим структурам, как в ИК области света, так и частично в видимой до 2.5 – 3.0 эВ. При энергиях фотонов менее 0.4 эВ коэффициент отражения резко возрастает более 80%, что позволит отражать большую часть падающего среднего и дальнего ИК-излучения. Для уменьшения коэффициента отражения в видимой части спектра и увеличения светового потока в солнечную батарею, можно использовать создание текстурированной поверхности до роста на ней дисилицида кальция. Удельное сопротивление слоя составляет менее $7 \cdot 10^{-4}$ $(Ом \cdot см)^{-1}$, что соответствует с учетом размеров площади пленки слоевому сопротивлению 26-40 Ом/кв. Поскольку слоевое сопротивление уменьшается при гелиевых температурах, то такие солнечные элементы могут использоваться на земле и в космосе. С учетом того, что дисилицид кальция обладает ограниченной окислительной стойкостью, то его необходимо закрывать тонким слоем легированного поликристаллического кремния n-типа в едином ростовом процессе толщиной не более 10 нм. В этом случае пленки $CaSi_2$ являются конкурентом прозрачного и проводящего контакта на основе смеси высоколегированного оксида индия и оксида олова (ITO), который является дорогостоящим

материалом и требует специального легирования и многоступенчатых отжигов. ITO контакты также не могут быть использованы при низких температурах, поскольку их ионная проводимость уменьшается на несколько порядков по величине.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-02-00123_а и грант №20-52-00001_БРФФИ_а).

---

1. Semiconducting Silicides / ed. by V.E. Borisenko. – Berlin: Springer, 2000.

2. Ogawa, S., Katagiri, A., Shimizu , T., Matsushima, M., Akiyama, K., Kimura, Y., Uchida, H., Funakubo, H. Electrical properties of (110)-oriented nondoped Mg_2Si films with p-type conduction prepared by RF magnetron sputtering method // J. Electron. Mater. – 2014. – V. 43. – P. 2269-2273.

3. Murarka, S.P. Silicides for VLSI Applications; Academic Press, 2012.

4. Takane, D., Wang, Z., Souma, S., Nakayama, K., Nakamura, T. et al. Observation of Chiral Fermions with a Large Topological Charge and Associated Fermi-Arc Surface States in CoSi // Phys. Rev. Lett. – 2019. – V. 122. – P. 076402.

5. Shevlyagin, A.V., Goroshko, D.L., Chusovitin, E.A., Galkin, K.N., Galkin, N.G., Gutakovskii, A.K. Enhancement of the Si p-n diode NIR photoresponse by embedding β-$FeSi_2$ nanocrystallites // Sci. Rep. – 2015. – V. 5. – P. 14795.

6. Nozariasbmarz, A., Agarwal, A., Coutant, Z.A., Hall, M.J. et al. Thermoelectric silicides: A review // Japanese Journal of Applied Physics. – 2017. – V. 56. – P. 05DA04.

7. Haras, M., Skotnicki, T. Thermoelectricity for IoT – A review // Nano Energy. – 2018. – V. 54. – P. 461-476.

8. Manfrietti, P., Fornasini, M.L., Palenzona, A. The phase diagram of the Ca-Si system // Intermetallics. – 2000. – V. 8. – P. 223-228.

9. Lebegue, S. Calculated quasiparticle and optical properties of orthorhombic and cubic Ca_2Si // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 72. – P.

10. Bisi, O., Braikovich, L., Carbone, C., Lindau, I., Iandelli, A., Olcese, G.L., Palenzona, A. Chemical bond and electronic states in calcium silicides: Theory and comparison with synchrotron-radiation photoemission // Phys. Rev. B. – 1989. – V. 40. – P. 10194 - 1202.

11. Fahy, S., Hamann, D.R. Electronic and structural properties of $CaSi_2$ // Phys. Rev. B. – 1990. – V. 41. – P. 7587-7593.

12. Wen, C., Kato, A., Nonomura, T., Tatsuoka, H. Phase selection during calcium silicide formation for layered and powder growth // J. Alloys and Compounds. – 2011. – V. 509. – P. 4583-4587.

13. Galkin, N.G., Dotsenko, S.A., Galkin, K. N., Migas, D.B., Bogorodz, V.O., Filonov, A.B., Borisenko, V.E., Cora, I., Pécz, B., Goroshko, D.L., Tupkalo, A.V., Chusovitin, E.A., Subbotin, E.Y. Conducting $CaSi_2$ transparent in infra-red // J. Alloys and Compounds. – 2019. – V. 770. – P. 710-720.

14. Wurz, J.F. Solid-phase epitaxy of $CaSi_2$ on Si(111) and the Schottky-barrier height of CaSi2/Si(111) / R. Wurz, M. Schmidt, A. Schopke, W. Fuhs // Appl. Surf. Sci. – 2002. – V. 190. – P. 437.

15. Galkin, N.G. Formation and optical properties of semiconducting thick Ca silicide films and Si/CaxSi/Si heterostructures on Si(111) substrate / N.G. Galkin, D.A. Bezbabnyi, K.N. Galkin, S.A. Dotsenko, E. Zielony, R. Kudrawiec, J. Misiewicz // Phys. St. Sol. C. – 2013. – V. 10. – 1819-1823.

16. Wen, C., Kato, A., Nonomura, T., Tatsuoka, H. Phase selection during calcium silicide formation for layered and powder growth // J. Alloys and Compounds. – 2001. – V. 509. – P. 4583.

17. Pearson, W.B. A handbook of Lattice Spacing and Structure of Metals and Alloys (Pergamon Press, New York, 1958).

18. Galkin, N.G., Galkin, Galkin, K.N., Chernev, I.M., Goroshko, D.L., Chusovitin, E.A., Shevlyagin, A.V., Usenko, A.A., Khovailo, V.V. Comparison of the structural, optical and thermoelectrical properties of Ca silicide films with variable composition on Si substrates // Defect and Diffusion Forum. – 2018. – V. 386. – P. 3-8.

УДК 544.723.2

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОРОШКОВ В КАЧЕСТВЕ АДСОРБЕНТА ДЛЯ 3,4-БЕНЗПИРЕНА

А.А. Зеева, Т.А. Меределина, С.В. Барышников

Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)

biofirm@mail.ru

Методом тонкоструктурной спектроскопии получены спектры гексановых растворов 3,4-бензпирена, адсорбированных сегнетоэлектрическими порошками. По интенсивности головных мультиплетов квазилинейчатых спектров исследуемых образцов дана оценка молекулярных взаимодействий адсорбента и адсорбата, рассмотрены возможные механизмы взаимовлияния.

USE OF FERROELECTRIC POWDERS AS AN ADSORBENT FOR 3,4-BENZPYRENE

A.A. Zeeva, T.A. Meredelina, S.V. Baryshnikov
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
biofirm@mail.ru

The spectra of hexane solutions of 3,4-benzpyrene adsorbed by ferroelectric powders were obtained by fine-structure spectroscopy. Based on the intensity of the head multiplets of the quasilinear spectra of the samples under study, the molecular interactions of the adsorbent and the adsorbate are estimated, and possible mechanisms of mutual influence are considered.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.41-45

1. Введение

Адсорбция – это процесс увеличения концентрации вещества у поверхности раздела двух фаз вследствие нескомпенсированных сил межмолекулярного взаимодействия на границе раздела. В зависимости от природы адсорбцию принято подразделять на химическую и физическую. Химическая адсорбция обязана химическим связям, возникающим между адсорбатом и адсорбентом. Физическая адсорбция обусловлена действием электрических сил, главным образом сил Ван-дер-Ваальса. Типичные энергии связи для сил Ван-дер-Ваальса составляют примерно 10-100 мэВ. Для физической адсорбции характерна многослойность, отсутствие активационного барьера и обратимость процесса адсорбции. Физадсорбцию можно наблюдать только при сравнительно низких температурах, т.к. при комнатной температуре тепловая энергия k_BT составляет примерно 25 мэВ, что приводит к обратному процессу [1].

Особый случай физической адсорбции представляет адсорбция на поверхности сегнетоэлектриков, у которых за счет спонтанной поляризации на границе раздела могут возникать значительные электрические поля. Если оценить напряженность электрического поля, создаваемую монодоменной частицей на её поверхности по направлению поляризации, то, например, для классического сегнетоэлектрика титаната свинца (P_s~ 60 мкК/см^2) получим E ~$7\cdot10^8$ В/см [2]. При разбиении кристалла на домены его среднее макроскопическое поле стремится к нулю, однако на границах доменов остаются локальные поля, имеющие тот же порядок, благодаря чему ионы и полярные молекулы будут притягиваться поверхностью [3].

2. Образцы и методика эксперимента

В данной работе методом тонкоструктурной спектроскопии исследовалась адсорбционная способность различных сегнетоэлектрических порошков по отношению к 3,4-бензпирену: два образца титаната бария (BaTiO3) с разными размерами частиц; порошок титаната свинца (PbTiO3) с наибольшей из представленных образцов спонтанной поляризацией; два образца цирконата-титаната свинца ($Pb(Zr_{0,52}Ti_{0,48})O_3$), второй из которых дополнительно поляризован во внешнем электрическом поле с напряженностью ~ 5 кВ/м. Адсорбция 3,4-бензпирена осуществлялась из гексанового раствора с концентрацией 10^{-6} моль/л, на 1 мл раствора использовалось 0,5 см^3 адсорбента.

3,4-бензпирен ($C_{20}H_{12}$) – ароматическое соединение, представитель семейства полициклических углеводородов, обладает сильнейшей канцерогенной активностью. По степени воздействия на организм относится к I классу опасности и представляет собой кристаллическое вещество, практически нерастворимое 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, имеет вытянутую форму с размерами 3×12 Å [4]. Электрический дипольный момент молекулы 3,4-бензпирен имеет величину порядка 0,049 D (или $1{,}63 \cdot 10^{-31}$ Кл·м) [5].

Титанат бария ($BaTiO_3$) при температуре 393 К переходит из кубической (пароэлектрической) фазы в тетрагональную (сегнетоэлектрическую) фазу. При этом возникает спонтанная поляризация, величина которой плавно нарастает от P_s = 18 мкК/см^2 в точке Кюри до ~26 мкК/см^2 при комнатной температуре [6].

Титанат свинца ($PbTiO_3$) является классическим сегнетоэлектриком с температурой Кюри, равной $T_c \approx 763$ K. При комнатной температуре $PbTiO_3$ находится в тетрагональной сегнетоэлектрической фазе с $P_s \sim 60$ мкК/см^2 [6].

Цирконат-титанат свинца (PZT) – твёрдый раствор титаната свинца и цирконата свинца с общей формулой $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$. Наиболее интересными являются составы, прилегающие к так называемой морфотропной границе около $x \approx 0{,}52$. Используемый в работе состав $Pb(Zr_{0.52}Ti_{0.48})O_3$ является сегнетоэлектриком с температурой Кюри ~693 К и спонтанной поляризацией ~ 42 мкК/см^2 [7]. Физические характеристики сегнетоэлектрических порошков приведены в таблице.

Физические характеристики адсорбентов при комнатной температуре

№ образца	Адсорбент	Формула	Размер частиц, мкм	Спонтанная поляризация, мкК/см^2	Диэлектрическая проницаемость
2	Титанат свинца	$PbTiO_3$	1-2	~60	~30-40
3	Титанат бария	$BaTiO_3$	1-2	~26	~1000
4	Титанат бария	$BaTiO_3$	0,5	~26	~1000
5	Цирконат-титанат свинца (*не поляризованный*)	$Pb(Zr_{0,52}Ti_{0,48})O_3$	1-2	~42	~1000
6	Цирконат-титанат свинца (*поляризованный*)	$Pb(Zr_{0,52}Ti_{0,48})O_3$	1-2	~42	~1000

Для определения содержания 3,4-бензпирена в образцах использовался эффект Шпольского, который заключается в возникновении квазилинейчатых спектров сложных органических соединений, растворенных в специально подобранных растворителях при низких температурах. Эффект Шпольского, позволяющий регистрировать спектры, состоящие из узких спектральных линий, даёт возможность изучать электронные переходы в многоатомных молекулах. Результаты адсорбции и десорбции отслеживались по головным мультиплетам квазилинейчатых спектров флуоресценции замороженных при температуре жидкого азота (77,3 К) растворов, возбуждение которых проводилось лазером ЛГИ-21 с длиной волны 337 нм. Спектры регистрировались спектрографом ИСП-51, обработка данных, построение графиков, сохранение информации осуществлялась посредством аппаратно-программного комплекса на основе ПЗС линейки TCD1304DG и макетной платы Nucleo-F303re в специально созданной компьютерной программе на языке Java [8].

3. Экспериментальные результаты и обсуждение

Как следует из рис. 1, образец № 3 титаната свинца с наибольшей спонтанной поляризацией, но малой диэлектрической проницаемостью, хуже всех адсорбировал 3,4-бензпирен.

Для титаната бария адсорбционная способность значительно выше. Из графиков (рис. 1) следует, что концентрация 3,4-бензпирена, адсорбированного титанатом бария с размером частиц 0,5

мкм (образец №4), примерно в 1,5 раза больше, чем у $BaTiO_3$ с размером частиц 1-2 мкм (образец №3). Это объясняется тем, что из всех представленных образцов у образца №4 самая большая активная поверхность.

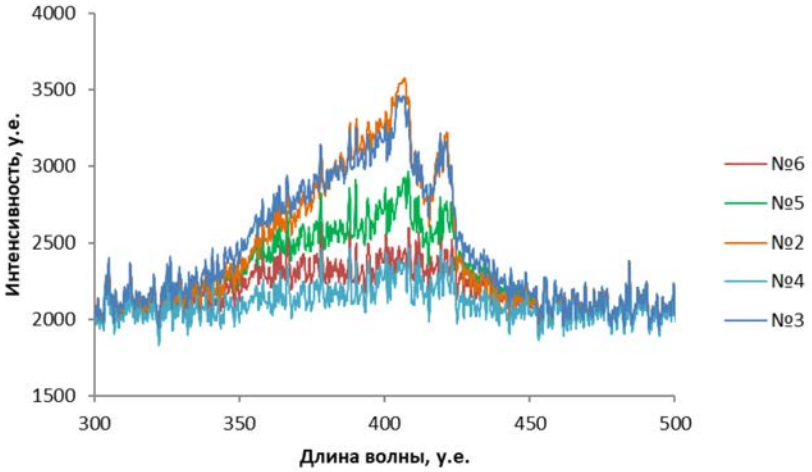


Рис. 1. Адсорбция 3,4-бензпирена сегнетоэлектрическими образцами:
№ 2 – $PbTiO_3$; № 3 – $BaTiO_3$ (1-2 мкм); № 4 – $BaTiO_3$ (0,5 мкм); № 5 – PZT; № 6 – PZT (поляр.).

На рис. 2 представлены спектры адсорбции образцами цирконата-титаната свинца. Видно, что эффективнее адсорбирует поляризованный образец, концентрация раствора 3,4-бензпирена в 1,13 раза меньше, чем после адсорбции неполяризованным образцом.

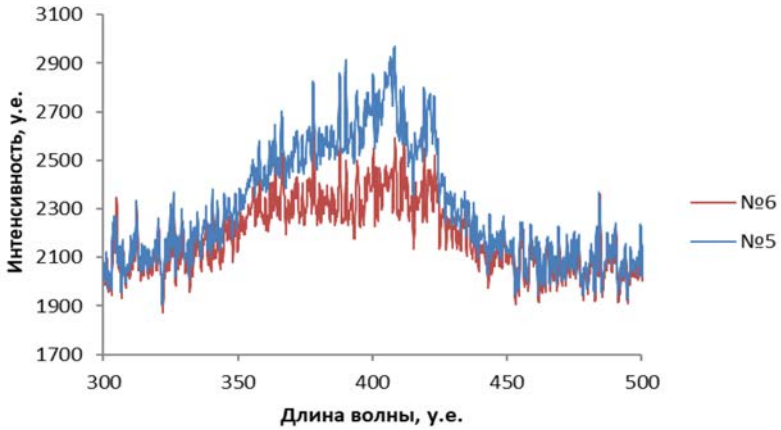


Рис. 2. Адсорбция 3,4-бензпирена образцами №5 – PZT; №6 – PZT (поляр.).

Для понимания полученного результата запишем энергию электрического взаимодействия между дипольными частицами и молекулами 3,4-бензпирена. Эта энергия будет складываться из энергий Кеезома (энергия взаимодействия частиц с готовыми дипольными моментами) и Дебая (энергия взаимодействия дипольной и недипольной частиц, обусловленная наведенной поляризацией). В общем виде энергию взаимодействия одной сегнетоэлектрической частицы с n молекулами 3,4-бензпирена можно записать в виде:

$$F_i = \sum_{j=1}^{n} k_{ij} \frac{P_i p_j}{\varepsilon_0} + \sum_{j=1}^{n} k_{ij} \frac{\alpha_j P_i^2}{\varepsilon_0} + \sum_{j=1}^{n} k_{ij} \frac{\varepsilon_i p_j^2}{\varepsilon_0} + \ldots, \qquad (1)$$

где первое слагаемое – энергия Кеезома, описывающая взаимодействия сегнетоэлектрической частицы с n полярными молекулами с p_j; второе слагаемое – энергия Дебая, учитывающая взаимодействия сегнетоэлектрической частицы с наведенными дипольными моментами в частицах 3,4-бензпирена; третье слагаемое учитывает взаимодействие полярных молекул 3,4-бензпирена с наведенным дипольными моментами в сегнетоэлектрической частице; k_{ij} – размерные коэффициенты, определяемые

геометрией частиц и направлением поляризации, α_j и ε_i – поляризуемость молекул 3,4-бензпирена и диэлектрическая проницаемость сегнетоэлектрической частицы, соответственно.

Из соотношения (1) следует, что средняя адсорбционная способность сегнетоэлектрических порошков будет зависеть от спонтанной поляризации, диэлектрической проницаемости и размера частиц в порошках. Наибольшей адсорбционной способностью обладают порошки титаната бария с размером частиц 0,5 мкм, так как они имеют одновременно значительную спонтанную поляризацию, высокую диэлектрическую проницаемость и большую активную поверхность.

---

1. Оура, К., Лифшиц, В.Г., Саранин, А.А. и др. Введение в физику поверхности / под ред. В. И. Сергиенко. – М.: Наука, 2006. – 490 с.
2. Барышников, С.В., Милинский, А.Ю. Электрические взаимодействия в смесях сегнетоэлектрических порошков хлорида диизопропиламмония и титаната свинца // ФТТ. – 2021. – Т. 63, в.6.– С.772-775.
3. Мередeлина, Т.А., Барышников, С.В. Адсорбция 3,4-бензпирена порошками сегнетоэлектриков // Материалы XVI региональной науч. конф. – Хабаровск: ФФПиО, 2018. – С.191-195.
4. Клар, Э. Полициклические углеводороды. – М.: Химия, 1971. – 455 с.
5. 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.
6. Лайнс, М., Гласс, А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы / пер. с англ.; под ред. В.В. Леманова, Г.А. Смоленского. – М.: Мир, 1981. – 736 с.
7. Frantti, J., Ivanov, S. and all. Phase transitions of $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$ ceramics // Phys. Rev. – 2002. – B. 66. – P. 064108.
8. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017616306 «Модуль автоматизации спектрального анализа для спектрографа ИСП-51». Автор: А.А. Антонов. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 07 мая 2019 г.

УДК 538.97

ИЗМЕНЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МИНЕРАЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ

Г.Г. Капустина[1], Г.И. Мирошниченко[1], Н.А. Леоненко[2]

[1]Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

[2]Институт горного дела ДВО РАН (г. Хабаровск)

g.kapustina@mail.ru

В данной работе методом рентгеноструктурного анализа исследуется воздействие лазерного излучения на кристаллическую структуру природного рудного образца магнетита и модельного образца высокоглинистого золотосодержащего песка.

CHANGE IN THE CRYSTAL STRUCTURE OF MINERAL OBJECTS UNDER LASER IRRADIATION

G.G. Kapustina[1], G.I. Miroshnichenko[1], N.A. Leonenko[2]

[1]Pacific State University (Khabarovsk)

[2]Institute of Mining, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)

g.kapustina@mail.ru

In this work, the effect of laser radiation on the crystal structure of a natural ore sample of magnetite and a model sample of high-clay gold-bearing sand is investigated by the method of X-ray diffraction analysis.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.45-48

В последнее время все более актуальными становятся задачи, связанные с воздействием сверхмощных потоков энергии на минеральные среды с целью вовлечения в переработку минерального сырья, содержащего ценные компоненты, извлечь которые традиционными способами практически невозможно. Наиболее перспективным из этих методов в настоящий момент является облучение минеральных концентратов импульсным лазерным излучением. Это объясняется тем, что лазерное излучение позволяет обеспечивать высокие скорости локальных изменений температуры в облучаемой среде и градиенты температуры, как на узко локализованных участках поверхностей, так и по глубине материалов из-за малой температупроводности. Такие параметры не могут быть достигнуты при других способах воздействия.

Основные проблемы изучения и освоения техногенных месторождений связаны с большой неоднородностью вещественного состава, низкими содержаниями в них ценных компонентов и необходимостью всесторонней комплексной оценки. Эти особенности определяют выбор рациональной технологии формирования и освоения техногенных месторождений.

Целью данной работы является выявление изменений кристаллической структуры минеральных объектов в результате мощного лазерного воздействия.

Для проведения эксперимента были взяты модельные золотосодержащие образцы с коллоидным золотом и измельченный рудный образец магнетита. В работе применена иттербиевая лазерная установка с волоконной системой передачи лазерного излучения ЛС-06. Режим работы непрерывный, модуляция до 3 кГц. Спектральная ширина 10 нм. Длина волны λ = 1070 нм. Мощность варьировалась от 60 Вт до 300 Вт. Исходная золотосодержащая ультрадисперсная среда в рассыпном виде помещалась на графитовую подложку, которую перемещали со скоростью 1 мм/с. Диаметр расфокусированного луча составлял 5-7 мм. При мощности излучения 60-90 Вт, исходный материал принимал форму спеков из глинистых, алюмосликатных частиц в виде цепочечных структур (рис. 2). С увеличением мощности излучения эти структуры трансформировались в более крупные стекловидные агломераты [2]

В нашем случае рентгеноструктурные исследования поверхности образцов проводились с помощью дифрактометра ДРОН-7 (НПП «Буревестник»), применяя характеристическое рентгеновское излучение меди Cu K_α (длины волн дублета $\lambda_{.1}$ = 1.54051 Å и $\lambda_{.2}$ = 1.54433 Å). Напряжение трубки – 40 кВ, ток накала катода – 20 мА. В дифрактометре ДРОН-7 сигналы обрабатываются в автоматическом режиме, в результате чего спектр выводится через компьютер на монитор. Диапазон углов 2θ составляет от -100° до +165°. Минимальный угол поворота образца и детектора – 0,005°. Площадь поверхности, освещаемой рентгеновским излучением, изменяется в зависимости от угла поворота образца и составляет порядка 0,1 (на больших углах) - 1 (на малых углах) см^2.

Рентгеновский спектр соответствуют кристаллической структуре поверхностного слоя, толщина которого эквивалента эффективной глубине проникновения рентгеновского излучения. Для железа при Cu K_α излучении она составляет порядка 1 – 2 мкм. Недостатком метода РСА является низкая чувствительность определения фаз малой концентрации (не менее 5 вес.%).

Исследуемые порошки перемешивались с вазелином и закреплялись на поверхности кюветы для прибора. Во время регистрации спектра образец вращался. Интенсивность дифрагированного излучения измеряли методом пошагового сканирования с экспозицией 2 сек в каждой точке и шагом смещения по оси 2Θ – 0,05°. Полученные спектры обрабатывались с помощью пакета PDWin (НПП «Буревестник»).

Рентгеновская дифрактограмма исходного образца представлена на рис. 1. Основные пики исходного материала соответствуют кварцу SiO_2. Кроме того, в небольшом количестве присутствуют

сложные оксиды алюминия, кальция, железа и кремния. Линейное изменение линии фона рентгеновского спектра говорит о том, что образец находится в кристаллическом состоянии.

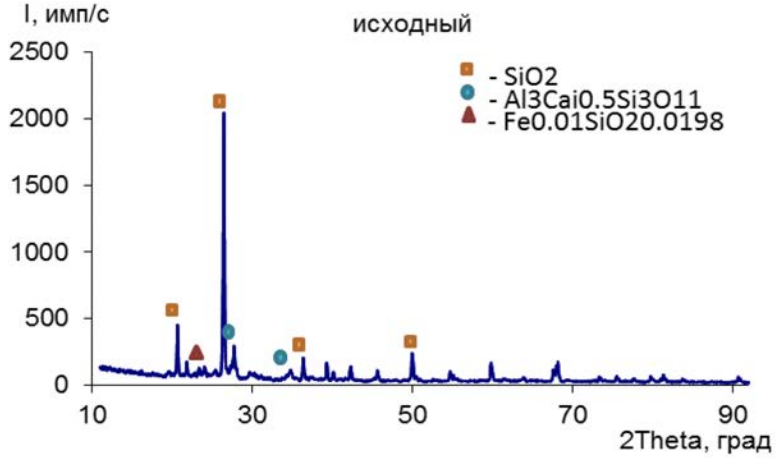


Рис. 1. Дифрактограмма исходного образца.

При воздействии излучением мощностью 60 Вт, на рентгенограмме наблюдается меньшее количество спектральных линий, интенсивность основных спектральных линий уменьшается. С увеличением мощности лазерного воздействия на образец (120 Вт) происходит значительное уменьшение интенсивности наиболее выраженных дифракционных отражений, соответствующих кристаллической фазе SiO_2. Кроме того, на дифрактограмме наблюдается образование рентгеновского «гало», что свидетельствует о начале аморфизации материала (рис. 2).

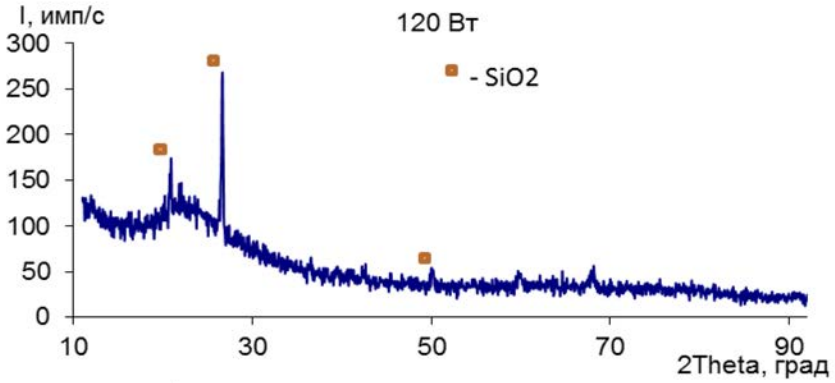


Рис. 2. Дифрактограмма образца, полученного после воздействия лазерного излучения мощностью 120 Вт.

На дифрактограмме для образца после воздействия лазерного излучения мощностью 210 Вт пики интенсивности становятся более размытыми, главный максимум интенсивности уменьшился почти в 10 раз и соответствует фазе $Al_2Si_2O_5(OH)_4$, базисная линия стала более широкой. Наличие выраженного «гало» в области малых и средних углов свидетельствует о высокой степени аморфизации основных составляющих породы. Таким образом, в результате увеличения мощности лазерного воздействия высокоглинистые пески переходят из кристаллической фазы в аморфную.

Магнетит имеет свойства, отличные от свойств высокоглинистых золотосодержащих песков, поэтому для лазерной обработки образцов магнетита были выбраны иные параметры. Дифрактограммы магнетита до и после лазерной обработки представлены на рис. 3, 4.

Пики, изображенные на рис. 3, соответствуют фазам магнетита и пирита. На рентгенограмме образца после лазерной обработки мощностью 300 Вт часть пиков исчезает, интенсивность пиков увеличивается, происходит сдвиг основных пиков. При лазерном воздействии магнетит, имеющий гексагональную кристаллическую решетку, переходит в пирротин с кубической кристаллической решеткой.

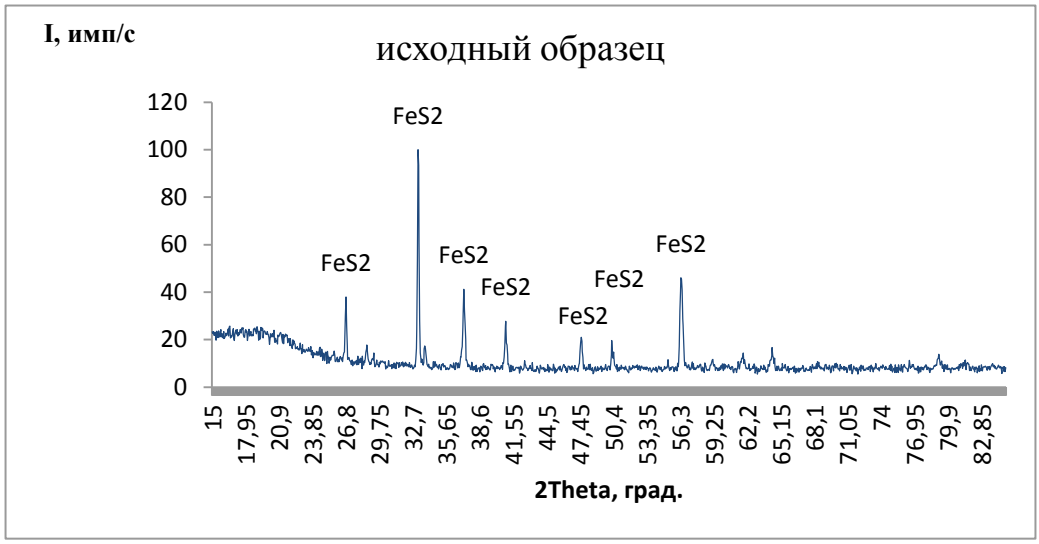


Рис. 3. Дифрактограмма образца исходного магнетита.

При более мощном воздействии лазерного излучения происходит уширение базисных линий, появляются дополнительные пики, соответствующие оксиду железа (II) и чистому железу (II). При данной мощности лазерного основной фазой образовавшегося спека является пирит, имеющий кубическую кристаллическую решетку.

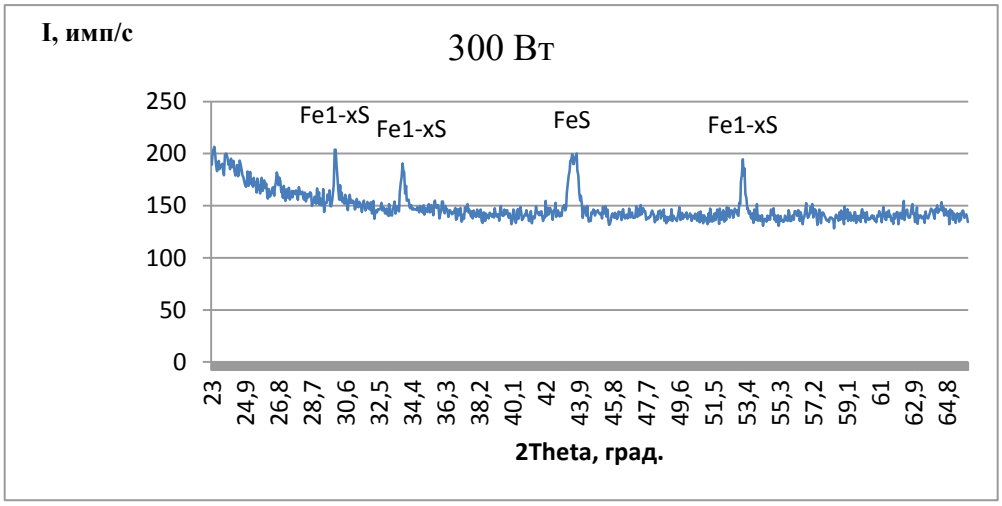


Рис. 4. Дифрактограмма образца, полученного после воздействия на магнетит лазерного излучения мощностью 300 Вт.

Таким образом, при воздействии лазерного излучения на природный магнетит, происходит изменение его кристаллической структуры.

В результате исследования полученных дифрактограмм можно сделать следующие выводы.

При воздействии лазерного излучения на высокоглинистые золотосодержащие пески, исследуемый материал трансформируется в стеклообразную фазу и переходит из кристаллической фазы в аморфную. Золото не обнаружено рентгенофазовым методом, так как содержание золота в модельных образцах составляет 2,5 грамма на тонну, что составляет 0,00025 %, а чувствительность метода РСА составляет не менее 5 вес. %. Природный магнетит под действием лазерного излучения переходит из гексагональной сингонии в кубическую, с образованием фазы оксида железа и чистого железа.

1. Качанов, Н.Н., Миркин, Л.И. Рентгеноструктурный анализ. – М.: Машгиз, 1960. – 216 с.
2. Леоненко, Н.А., Силютин, И.В., Капустина Г.Г. Лазерная обработка техногенного сырья // Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). – 2015. – № 30. – С. 204-212

УДК 533.599; 537.525

ОСОБЕННОСТИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОКСИДА ВИСМУТА, ОБЛУЧЕННОГО ПЛАЗМОЙ ВЧ РАЗРЯДА

Н.В. Кожемяко, М.С. Круглов, Т.В. Бондарева, С.А. Пячин
Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск
nadezdavitman78925@gmail.com

Представлены результаты исследований восстановления оптических характеристик оксида висмута, который был обработан плазмой высокочастотного разряда. Проведенные исследования показали, что после прохождения релаксации в обработанном оксиде висмута происходят необратимые изменения в его электронной структуре.

FEATURES OF THE RESTORATION OF THE OPTICAL PROPERTIES OF BISMUTH OXIDE IRRADIATED BY RF DISCHARGE PLASMA

N.V. Kozhemyako, M.S. Kruglov, T.V. Bondareva, S.A. Pyachin
Pacific National University, Khabarovsk
nadezdavitman78925@gmail.com

The results of studies of the restoration of the optical characteristics of bismuth oxide, which was treated with a high-frequency discharge plasma, are presented. The conducted studies have shown that after the relaxation in the treated bismuth oxide, irreversible changes occur in its electronic structure.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.49-52

В настоящее время металл-оксидные полупроводники находят все более широкое применение в качестве фотокаталитических материалов разрушения органических загрязнителей воды и воздуха [1]. Среди них оксид висмута Bi_2O_3 весьма перспективен как полупроводник, ширина запрещенной зоны которого в зависимости от способа получения может изменяться в широком диапазоне от 2 до 3,96 эВ [2]. Это делает его чувствительным к поглощению светового излучения как ультрафиолетовой, так и видимой области. Одним из эффективных способов улучшения каталитических свойств оксидных соединений является обработка их плазмой высокочастотного разряда [3, 4]. Поскольку метод активирования оксида висмута воздействием низкотемпературной плазмой изучен не в полной мере, то проведение исследований в этом направлении имеет особый научный и практический интерес.

Ранее нами были проведены исследования по изучению влияния обработки плазмой емкостного высокочастотного (ВЧ) разряда на оптические свойства оксида висмута [5 – 7]. Было установлено, что в результате такого воздействия происходит уменьшение коэффициента отражения Bi_2O_3, а соответственно повышается коэффициент поглощения в диапазоне от 420 до 800 нм. Кроме того, граница области поглощения оксида висмута, подверженного плазменной обработке, смещается в длинноволновую область спектра, при этом его фазовый состав не претерпевает изменений. Также было обнаружены, что у облученных образцов постепенно, в течение нескольких дней хранения в темноте, восстанавливается отражательная способность, что сопровождается уменьшением коэффициента поглощения. Цель данной работы заключалась в изучении процессов релаксации оптических

характеристик оксида висмута после плазменной обработки в зависимости от кратности и продолжительности периода между облучениями.

Для плазменной обработки использовали вакуумную установку [8]. Порошок оксида висмута, смоченный в спирте, наносили тонким слоем на стеклянные подложки с размерами примерно 15x15x2 мм. Образцы помещали в вакуумную камеру, которая представляет собой полый стеклянный цилиндр с внутренним диаметром 74 мм и толщиной стенок камеры 3 мм. Длина цилиндра – 16 см. Металлические электроды прикладывали с внешней стороны боковых торцов камеры. Это позволило уменьшить загрязнение камеры продуктами испарения электродов. На электроды подавали напряжение частотой 11 МГц и амплитудой 2 кВ.

Образец располагался вблизи активного электрода таким образом, что осажденный на подложку слой был обращен в сторону области свечения газового разряда. При проведении опытов остаточное давление воздуха в камере составляло 0,07 мм.рт.ст. Продолжительность плазменной обработки – 10 мин. Оптические характеристики оксида висмута изучали с применением спектрометрического комплекса на базе монохроматора МДР-41 с использование приставки диффузного отражения в геометрии «падающий луч 0° – отраженный луч 45°».

В работе представлены результаты исследования двух образцов с покрытиями из порошка оксида висмута: **образец № 1** был подвержен плазменной обработке и выдержан в течение одного месяца в темноте; **образец № 2** подвергался плазменной обработке с теми же параметрами, что и первый образец.

Спектры диффузного отражения образца № 1 представлены на рис. 1, образца № 2 – на рис. 2.

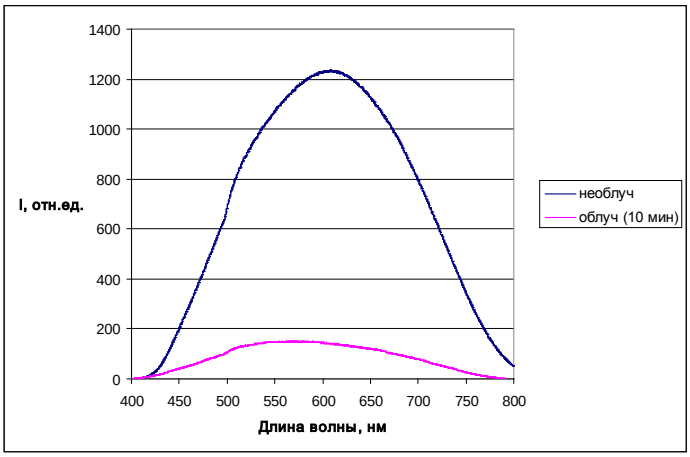


Рис. 1. Спектры диффузного отражения образца № 1 до и после его обработкой ВЧ плазмой.

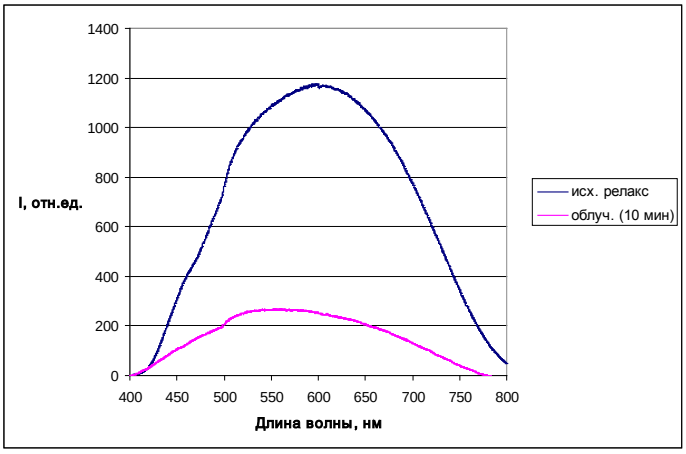


Рис. 2. Спектры диффузного отражения образца № 2 до и после его обработкой ВЧ плазмой.

После хранения этих образцов в светонепроницаемом боксе в течение 10 дней были опять сняты спектры диффузного отражения, и проведено их сравнение. Спектры диффузного отражения после хранения образца № 1 представлен на рис. 3, а образца № 2 – на рис. 4.

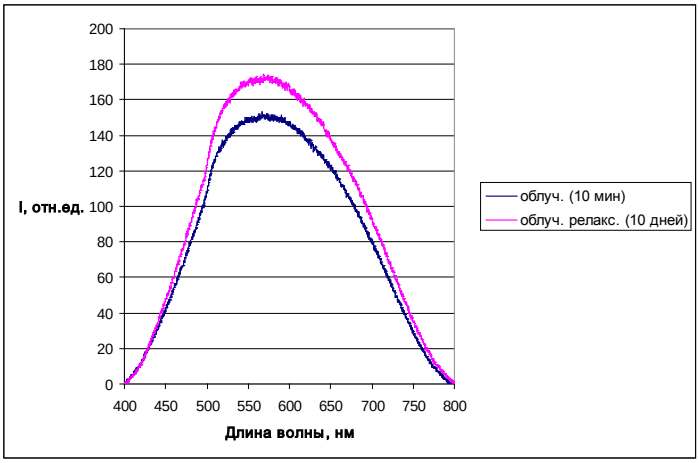


Рис. 3. Спектры диффузного отражения образца № 1 после облучения ВЧ плазмой и по истечении 10 дней.

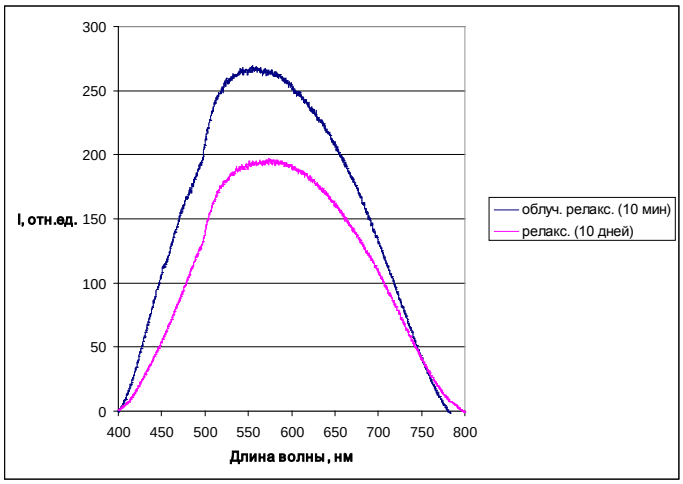


Рис. 4. Спектры диффузного отражения образца № 2 сразу после облучения ВЧ плазмой и по истечении 10 дней.

Анализируя спектры на рисунках, можно заметить, что коэффициент отражения образца, испытавшего предварительно релаксацию после плазменной обработки, больше, чем у образца № 2. Кроме того, процесс релаксации образца № 2 происходит быстрее в два раза, чем релаксация исходно релаксировавшего образца № 1. Проведенные исследования показали, что после прохождения процесса релаксации в обработанном оксиде висмута, по-видимому, происходят необратимые изменения в его электронной структуре, поэтому оптические свойства Bi_2O_3 становятся менее чувствительными к последующей плазменной обработке плазмой ВЧ разряда. Возможно, что после нескольких циклов плазменной обработки характеристики оксида висмута стабилизируются, но это необходимо проверить экспериментально.

---

1. Iyyapushpam, S., Nishanthi, S.T., Pathinettam, Padiyan D. Photocatalytic degradation of methyl orange using α-Bi_2O_3 prepared without surfactant // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – V. 563. – P. 104-107.

2. Leontie, L., Caraman, M., Visinoiu, A., Rusu, G.I. On the optical properties of bismuth oxide thin films prepared by pulsed laser deposition // Thin Solid Films. –2005. – V. 473. – P. 230-235.

3. Qin, P., Xu, H., Long, H., Ran, Y., Shang, S., Yin, Y., Dai, X. Ni/MgO catalyst prepared using atmospheric high-frequency discharge plasma for CO2 reforming of methane // Journal of Natural Gas Chemistry. – 2011. –V. 20, Iss. 5. – P. 487-492.

4. Wei, B., Chen, Y., Ye, M., Shao, Z., He, Y., Shi, Y. Enhanced degradation of gaseous xylene using surface acidized TiO_2 catalyst with non-thermal plasmas // Plasma Chemistry and Plasma Processing. – 2015. – V. 35, Iss. 1. – P. 173-186.
5. Бондарева, Т.В., Пячин, С.А., Егоршин, И.Н., Круглов, М.С., Астапов, И.А., Штарев, Д.С. Релаксация отражательной способности оксида висмута, подверженного воздействию плазмы ВЧ разряда // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование. Материалы XVIII региональной научной конф. – Хабаровск, 10-12 ноября 2020 г. – С. 17-19.
6. Кожемяко, Н.В., Пячин, С.А., Бондарева, Т.В., Егоршин, И.Н. Влияние облучения плазмой высокочастотного разряда на оптические свойства оксида висмута // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование. Материалы XVIII региональной научной конференции. – Хабаровск, 10-12 ноября 2020 г. – С. 33-35.
7. Бондарева, Т.В., Пячин, С.А., Круглов, М.С., Кожемяко, Н.В. Модифицирование оптических свойств оксида висмута обработкой плазмой емкостного ВЧ разряда // ТОГУ-Старт: фундаментальные и прикладные исследования молодых. Материалы региональной научно-практ. конф. – Хабаровск, 12-16 апреля 2021 г. – С. 53-61.
8. Круглов, М.С., Пячин, С.А., Бондарева, Т.В. Установка для облучения твердых тел плазмой емкостного высокочастотного разряда низкого давления // Вестник ТОГУ. – 2020. – № 4(59). – С. 55-62.

УДК 533.599; 537.525

СРАВНЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЕМКОСТНОГО ВЫСОКОЧАСТОТНОГО И ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДОВ НА СВОЙСТВА ОКСИД ВИСМУТА

<u>М.С. Круглов</u>, Н.В. Кожемяко, Т.В. Бондарева, С.А. Пячин
Тихоокеанский государственный университет, (г. Хабаровск)
kruglov_maxim@mail.ru

Было проведено сравнение воздействия на оксид висмута плазмы высокочастотного и тлеющего разрядов. Выявлено, что влияние со стороны плазмы емкостного высокочастотного разряда более интенсивно.

COMPARISON OF THE EFFECT OF CAPACITIVE HIGH-FREQUENCY AND GLOW DISCHARGES ON BISMUTH OXIDE CHARACTERISTICS

<u>M.S. Kruglov</u>, N.V. Kozhemyako, T.V. Bondareva, S.A. Pyachin
Pacific National University, (Khabarovsk)
kruglov_maxim@mail.ru

A comparison was made of the effects of high-frequency and glow discharges on bismuth oxide plasma. It was found that the effect of the capacitive high-frequency discharge from the plasma is more intense.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.52-55

Ранее нами были проведены исследования влияния высокочастотной (ВЧ) плазмы на оптические свойства оксид висмута [1-3], которые показали, что в ходе воздействия высокочастотного газового разряда формируются центры поглощения, которые проявляются в уменьшении его отражательной способности в видимом диапазоне оптического спектра. Было показано, что степень изменения коэффициента отражения зависит от времени плазменной обработки и от характеристик ВЧ разряда, таких как частота поля и амплитуда напряжения [4].

Для поиска причины образования центров поглощения в Bi_2O_3 было проведены сравнительные исследования воздействия плазмы тлеющего газового разряда и емкостного ВЧ разряда. Основное различие между ВЧ разрядом и разрядом постоянного тока [5] заключается в различном характере столкновений электронов с нейтральными частицами: существование разряда постоянного тока обусловлено электронно-эмиссионными процессами на катоде, в то время как ВЧ разряд реализуется в виде γ-разряда при эмиссии электронов с поверхности электродов или α-разряда, в котором электронная эмиссия не важна для его поддержания. В высокочастотных разрядах электрическое поле периодически изменяет своё направление, в результате уход заряженных частиц из разрядного промежутка существенно меньше, чем при постоянном поле, однако только часть электронов, эмитированных из электродов, поддерживает протекание разряда.

В связи с тем, что при постоянном токе поток заряженных частиц не меняет своего направления, было предположено, что воздействие плазмы постоянного тока будет отличаться от действия плазмы ВЧ разряда. Поэтому целью данного исследования стало сравнение воздействия на оксид висмута плазмы постоянного тока и ВЧ поля. Были подготовлены два образца из оксида висмута. После оба образца помещались в плазму разряда постоянного тока и ВЧ поля, которая формировалась в вакуумных камерах, представляющих собой полые стеклянные цилиндры с внутренним диаметром 74 мм и толщиной стенок камеры 3 мм. Длина цилиндра – 16 см. В случае высокочастотного разряда для плазменной обработки использовали вакуумную установку [6]. На электроды подавали напряжение частотой 6 МГц и амплитудой 900 В.

Для облучения оксида висмута разрядом постоянного тока использовали высоковольтный источник питания, подключенный последовательно с вакуумной камерой через реостат. Напряжение на внутренних электродах камеры было 900 В. Образцы в вакуумных камерах располагались вблизи электродов таким образом, что осажденный на подложку слой был обращен в сторону области свечения газового разряда. При проведении опытов остаточное давление воздуха в камерах составляло 0,07 мм.рт.ст. Продолжительность плазменной обработки - 10 минут.

Оптические свойства образцов до и после плазменной обработки изучали с помощью спектрометрического комплекса на базе монохроматора МДР-41 с использование приставки диффузного отражения в геометрии «падающий луч 0°– отраженный луч 45°».

Спектры диффузного отражения оксида висмута, подвергнутого воздействию плазмой тлеющего разряда и ВЧ разряда представлены на рис. 1 и 2 соответственно.

По полученным спектрам были посчитаны коэффициенты отражения (рис. 3), поглощения и ширина запрещенной зоны.

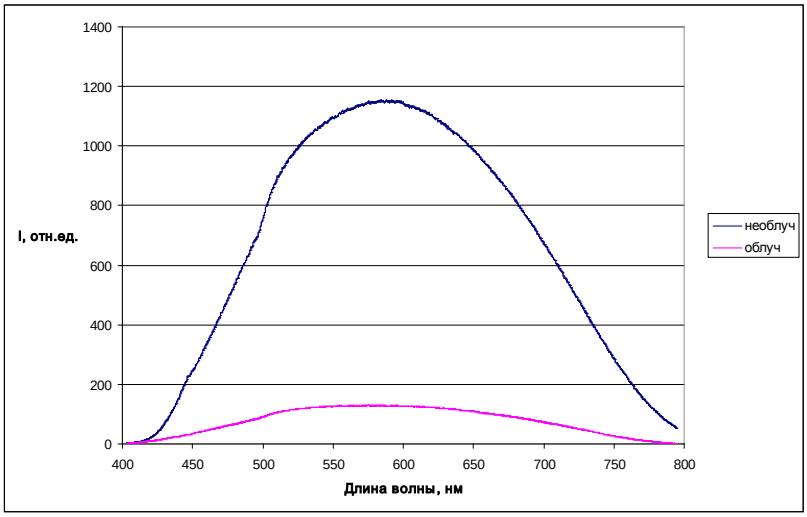


Рис. 1. Спектр диффузного отражения образца до и после плазменной обработки постоянным током.

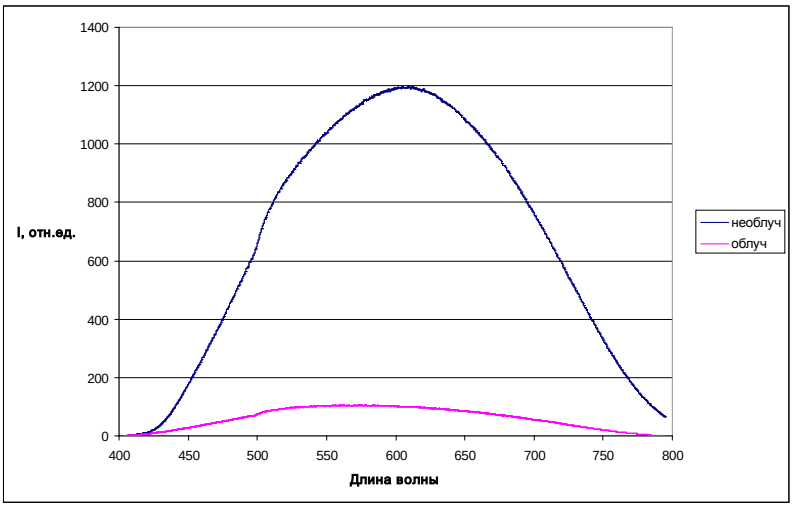


Рис. 2. Спектр диффузного отражения образца до и после плазменной обработки емкостным ВЧ разрядом.

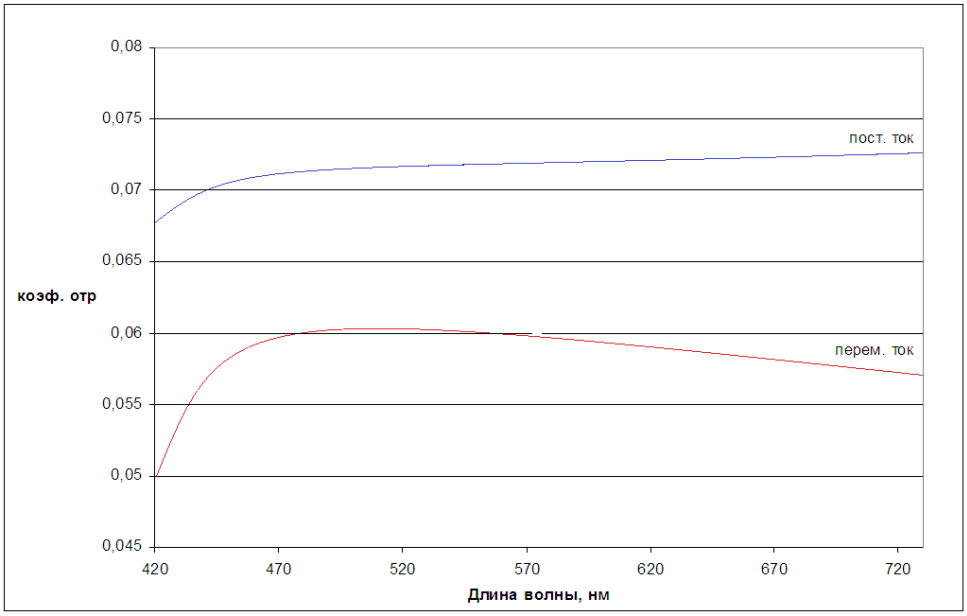


Рис. 3. Графики зависимости коэффициента диффузного отражения оксида висмута, подверженного облучению ВЧ плазмы и тлеющего разряда, от длины волны.

Анализ зависимостей, представленных на рис. 1 и 2, показал, что влияние разряда в переменном поле на оптические характеристики оксид висмута более интенсивное, чем разряда постоянного поля. Коэффициент отражения оксида висмута после плазменной ВЧ обработки примерно на 20% меньше, чем после обработкой тлеющим разрядом (рис. 3). По-видимому, это обусловлено тем, из-за переменного характера ВЧ разряда в определенной области разрядного промежутка могут быть задействованы различные механизмы взаимодействия частиц плазмы с поверхностью твердого тела помещенного в эту область.

Предполагается, что основной вклад в изменение оптических свойств оксида висмута вносят бомбардирующие его ионы, которые не участвуют в воздействии на образец в случае плазмы постоянного тока. Ширина запрещенной зоны оксида висмута, облученного ВЧ плазмой, составляет 2,3 эВ, а облученного плазмой постоянного тока – 2,56 эВ по сравнению с шириной необлученного оксида висмута – 2,7 эВ.

---

1. Бондарева, Т.В., Пячин, С.А., Егоршин, И.Н., Круглов, М.С., Астапов, И.А., Штарев, Д.С. Релаксация отражательной способности оксида висмута, подверженного воздействию плазмы ВЧ разряда // Физика: фунда-

ментальные и прикладные исследования, образование. Материалы XVIII региональной научной конф. – Хабаровск, 10-12 ноября 2020 г. – С. 17-19.

2. Кожемяко, Н.В., Пячин, С.А., Бондарева, Т.В., Егоршин, И.Н. Влияние облучения плазмой высокочастотного разряда на оптические свойства оксида висмута // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование. Материалы XVIII региональной научной конф. Хабаровск, 10–12 ноября 2020 г. – С. 33-35.

3. Бондарева Т.В., Пячин С.А., Круглов М.С., Кожемяко Н.В. Модифицирование оптических свойств оксида висмута обработкой плазмой емкостного ВЧ разряда // ТОГУ-Старт: фундаментальные и прикладные исследования молодых: Материалы региональной научно-практической конференции, Хабаровск, 12-16 апреля 2021 г. – С. 53-61.

4. Борисов, А.В., Бондарева, Т.В., Пячин, С.А., Круглов, М.С. Применение емкостного ВЧ разряда для обработки материалов // Материалы секционных заседаний 61-й студенческой научно-практ. конф. ТОГУ. – Хабаровск, 2021. – С. 6-9.

5. Савинов, В.П. Физика высокочастотного емкостного разряда: монография. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. – 308 с

6. Круглов, М.С., Пячин, С.А., Бондарева, Т.В. Установка для облучения твердых тел плазмой емкостного высокочастотного разряда низкого давления // Вестник ТОГУ. – 2020. – № 4(59). – С. 55-62.

УДК 526.3

ДИНАМИКА НАНОЧАСТИЦ В ЖИДКОФАЗНОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИИЕНТА ВЯЗКОСТИ И СИЛ СВЕТОВОГО ДАВЛЕНИЯ

А.И. Ливашвили, П.В.Виноградова, Г.В. Костина, М.И. Якунина
Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
livbru@mail.ru

Изучается динамики концентрации наночастиц в наножидкости, которая подвергается воздействию светового поля с равномерным профилем интенсивности. При этом мы учитываем концентрационный конвективный потоки и поток, обусловленный действием силы светового давления. Полученное балансное нелинейное уравнение преобразуется в линейное уравнение теплопроводности, для которого решается задача Коши.

DYNAMICS OF NANOPARTICLES IN A LIQUID-PHASE MEDIUM TAKING INTO ACCOUNT THE CONCENTRATION DEPENDENCE OF THE VISCOSITY COEFFICIENT AND LIGHT PRESSURE FORCES

A.I. Livashvili, P.V. Vinogradova, G.V. Kostina, M.I. Yakunin
Far Eastern State Transport University (Khabarovsk)
livbru@mail.ru

The dynamics of the concentration of nanoparticles in a nanofluid, which is exposed to a light field with a uniform intensity profile, is studied. In this case, we take into account the concentration convective fluxes and the flux caused by the action of the force of light pressure. The obtained balance nonlinear equation is transformed into a linear equation of heat conduction for which the Cauchy problem is solved.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.55-58

Коллоидные суспензии (наножидкости) характеризуются особыми свойствами переноса, в отличие от крупных дисперсных частиц, они практически не седиментируют, не подвергают эрозии

каналы. В частности, их успешно используют для доставки лекарственных препаратов (оптические пинцеты) [1-4].

Несмотря на достаточно большое число публикаций и накопленный фактический материал как экспериментальный, так и теоретический, здесь все еще отсутствуют систематические данные, а результаты экспериментов часто противоречивы. Это, в свою очередь, требует понимания механизмов переноса и физического смысла наблюдаемых эффектов.

Нашей целью будет изучение динамики концентрации наночастиц в наножидкости, которая подвергается воздействию светового поля с равномерным профилем интенсивности. При этом мы учитываем концентрационный конвективный потоки и поток, обусловленный действием силы светового давления F_S, определяемом выражением Геометрия задачи показана на рис.1

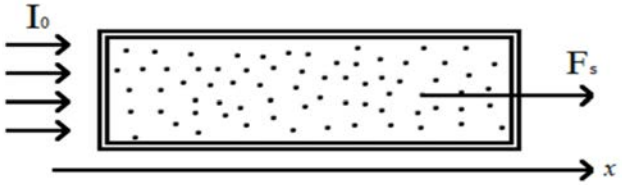


Рис.1 Геометрия задачи.

$$F_s = \frac{8}{3}\pi\left|\frac{2\pi a_0}{\lambda}\right|^4 a_0^2 \frac{\sqrt{\varepsilon_0}}{c_0}\left(\frac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon+2\varepsilon_0}\right)^2 I_0, \qquad (1)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость частицы; ε_0 – диэлектрическая проницаемость среды; a_0 – размер наночастицы; λ – длина световой волны; I_0 – интенсивность; c_0 – скорость света в вакууме. Заметим, что эта сила направлена вдоль распространения волны.

Отметим, что в большинстве опубликованных работ, посвященных явлениям переноса в наножидкости, коэффициент ее вязкости принимается постоянным. В то же время существуют публикации [5-6], в которых теоретически и экспериментально доказана ее концентрационная зависимость.

Запишем балансное уравнение, описывающее нестационарный перенос частиц в наножидкости (без учета термодиффузии):

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V(C)\frac{\partial C}{\partial x} - U(C)\frac{\partial C}{\partial x}, \qquad (2)$$

В уравнении (2) приняты следующие обозначения: D – коэффициент диффузии наночастицы; $V(C)$ – скорость концентрационной конвекции, которую принимаем равной $V = \frac{\upsilon(C)}{l}$, где $\nu(C)$ – кинематическая вязкость; l – характерное расстояние.

Так как $\upsilon(C) = \frac{\eta(C)}{\rho(C)}$, то можем записать $\upsilon(C) = \frac{\eta(C)}{l_\rho(C)}$. В ряде экспериментальных и теоретических работ показано [3-4] , что вязкость пропорциональна концентрации коллоидной суспензии. В дальнейшем мы примем, что $\eta(C) = \eta_0(1+pC)$, где $p>0$. Зависимость концентрации от плотности будем считать несущественной: $\rho(C) \approx \rho_0$. Последнее слагаемое в (2) связано с наличием потока, вызванного электрострикцией частиц.

Далее, $U(C) = \mu \cdot F_s$, где $\mu = \frac{1}{6\pi\eta(C)a_0}$ – подвижность частицы; a_0 – размер частицы. С учетом последних равенств уравнение (2) можно записать в виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\eta(C)}{l_\rho}\frac{\partial C}{\partial x} - \frac{F_s}{6\pi\eta(C)a_0}\frac{\partial C}{\partial x}. \qquad (3)$$

Далее будем использовать линейное приближение для зависимости:

$$\frac{1}{\eta(C)} \approx \eta_0(1 - pC). \tag{4}$$

Переходим в уравнении (3) к безразмерным переменным:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{\mu_0\sqrt{b}}{\rho_0 lD}\frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\mu_0\sqrt{b}}{\rho_0 lD}\rho C\frac{\partial C}{\partial y} - \frac{a_0}{\sqrt{b}}\frac{\partial C}{\partial y} + \frac{a_0}{\sqrt{b}}\rho C\frac{\partial C}{\partial y}. \tag{5}$$

где $\tau = \frac{F_s}{6\pi\eta_0\, a_0{}^2}$; $b = \frac{6\pi\eta_0\, a_0 D}{F_s}$; $y = \frac{1}{b}x$.

После дальнейшей параметризации изучаемое уравнение примет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - m\frac{\partial C}{\partial y} + \rho C\frac{\partial C}{\partial y}, \tag{6}$$

где $m = \sigma + \delta$, $\sigma = \frac{\eta_0}{\rho_0 D}$, $\delta = \frac{a_0}{\sqrt{b}}$. (7)

Введем новую функцию:

$$Q(y,\tau) = m + \rho C(y,\tau). \tag{8}$$

Тогда уравнение (6) запишется в виде

$$\frac{\partial Q}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 Q}{\partial y^2} - Q\frac{\partial Q}{\partial y}. \tag{9}$$

Видно, что полученное уравнение (9) является уравнением Бюргерса. Подстановка Коула – Хопфа [7]:

$$Q(y,\tau) = \mu\frac{\partial lnW(y,\tau)}{\partial y} \tag{10}$$

преобразует его в уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial W}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 W(y,\tau)}{\partial y^2} \tag{11}$$

с начальными условиями

$$W(y,0) = W_0, \quad -\infty < y < \infty, \; 0 \le \tau < \infty. \tag{12}$$

Его решение известно [8]:

$$W(y,\tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\tau}}\int_{-\infty}^{\infty} W_0(\zeta) exp\left[-\frac{(y-\zeta)^2}{4\tau}\right] d\zeta. \tag{13}$$

Значение W_0 определим, используя (10), (8) и начальное условие: $C(y,0) = C_0$:

$$W(y,0) = W_0 = \exp\left(-\frac{1}{2}C_0 y\right) - 1. \tag{14}$$

Используя (8), (10),(13) и (14) можно найти $C(y,\tau)$:

$$C(y,\tau) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{y-\zeta}{4\tau} exp\left[-\frac{G}{4}\right] d\zeta}{\int_{-\infty}^{\infty} exp\left[-\frac{G}{4}\right] d\zeta}, \tag{15}$$

где

$$G(\zeta,y,\tau) = \int_0^{\zeta} exp[-G\sigma]\, d\sigma + \frac{(y-\zeta)^2}{2\tau}. \tag{16}$$

Равенства (15) и (16), в принципе, решают поставленную задачу: определяют динамику наночастицы в жидкофазной среде с учетом зависимости коэффициента вязкости наножидкости от концентрации. Дальнейшее изучение зависимости концентрации от оптических, теплофизических и гидродинамических параметров может быть проведено на основе полученных соотношений.

---

1. Черепанов, И.Н., Попов, В.А. Экспериментальное исследование влияния концентрации на параметры наножидкости. // Вестник Пермского ун-та. Серия «Физика». – 2017. – Вып. 2 (36). – С. 26-31.

2. Иванов, В.И., Ливашвили, А.И. Эффект Дюфура в дисперсной жидкофазной среде в поле гауссова пучка // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. Межвуз. сборник науч. трудов / под общей ред. В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Тверской гос. ун-т, 2013. – Вып. 5. – С. 116-119.

3. Smorodin, B.L., Cherepanov, L.N., Myznikova, B.I, Shliomis, M.I. Traveling wave convection incolloids stratifiedby gravity // Physical ReviewE. – 2011. – Vol. 84, 026305.

4. Рудяк, В.Я. Современные проблемы микро и нанофлюидики / В.Я. Рудяк, А.В. Минаков. – Новосибирск: Наука, 2016. – 296 с.
5. Рудяк, В.Я, Краснолуцкий, С.Л. Моделирование коэффициента вязкости наножидкости методом молекулярной динамики // СПб.: Журнал техн. физики. – 2015. – Т. 85, № 6. –С. 9-16.
6. Venerus, D., Buongiorno, J., Christianson, R. et al. (33 more authors). Viscosity measurements on colloidal dispersions (nanofluids) for heat transfer applications // Applied Rheology. – 2010. – Vol. FED.
7. Cole, J.D. On a quasilinear parabolic equation occuring in aerodynamics // Quart. Appl. Math. – 1951. – Vol. 9. – P. 225-236.
8. Полянин, А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. – М.:ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 576 с.

УДК 544.723.2

ТОНКОСТРУКТУРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КАК МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ МОДИФИКАЦИЙ

Т.А. Меределина, А.А. Антонов, С.В. Барышников
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
biofirm@mail.ru

Получены электронно-колебательные спектры нескольких углеродных модификаций. Установлено, что линейные изомеры ряда алканов могут быть использованы как молекулярные матрицы для углеродных аллотропов. Показано, что топологическое соответствие структур растворителя и примесных молекул является одним из основных условий получения дискретных спектров.

THIN-STRUCTURE SPECTROSCOPY AS A METHOD FOR STUDYING CARBON MODIFICATIONS

T.A. Meredelina, A.A. Antonov, S.V. Baryshnikov
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
biofirm@mail.ru

Electronic-vibrational spectra of several carbon modifications have been obtained. It was found that linear isomers of a number of alkanes can be used as molecular matrices for carbon allotropes. It is shown that the topological correspondence of the structures of the solvent and impurity molecules is one of the main conditions for obtaining discrete spectra.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.58-60

Открытый в 1952 г. Э. В. Шпольским и его сотрудниками эффект резкого сужения полос в спектрах замороженных молекул ПАУ широко применялся для изучения электронно-колебательных спектров плоских молекул. Молекулы фуллеренов многоатомны, спектры растворов таких молекул состоят из широких полос и не могут давать информацию об электронном спектре. В конце 90-х гг. метод получения тонкоструктурных спектров стал применяться и для объемных молекул фуллеренов и их производных. Как отмечалось в работе [1], данные спектры отличались тем, что структурные линии сочетались с более интенсивным бесструктурным фоном-пьедесталом, который обусловливался образованием в растворе наноразмерных кластеров. Преимущественно в этих работах анализировались насыщенные растворы, тогда, как одним из условий появления квазилиний является малая

концентрация исследуемого вещества. Существует несколько факторов, определяющих оптимальные условия для получения квазилинейчатых спектров флуоресценции. Прежде всего это удобный растворитель и правильно подобранная концентрация растворенного вещества.

В данной работе получены электронные спектры четырех углеродных модификаций. Для спектрального анализа были взяты кристаллы фуллерена C_{60}, кристаллы фуллерена $C_{60}C_{70}$, многостенные углеродные нанотрубки и аморфный аллотроп углерода – Soot. Кристаллы C_{60} имеют гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку, два гексагона молекулы имеют связь С–С, равную 0,139 нм, связь на границе гексагона и пентагона составляет 0,145 нм, соответственно внешние углы равны 108° и 120° [3]. Соединение $C_{60/70}$ состоит из 86% C_{60} и 14% C_{70}, молекула C_{70} обладает объемноцентрированной (ОЦК) решеткой, в экваториальной области имеет вставку из десяти атомов углерода, в результате чего молекула становится вытянутой. Углеродные нанотрубки имеют 15-25 слоев с внешним диаметром от 8 до 15 нм и внутренним от 3 до 5 нм, расстояние между соседними графеновыми слоями порядка 0,34 нм, длина трубок колеблется в пределах от 3 до 12 мкм [4]. Образец Soot представляет собой аморфный углерод, диаметр частиц сажи от 40 до 100 Å, элементарный состав: 98% – углерод, 1,5% – кислород, 0,5% – водород.

Образцы аллотропов, взятые в объеме 1 мм^3, заливались 1 мл растворителя, запаивались в тонкие стеклянные трубки. В качестве растворителей были взяты н-гексан ($CH_3(CH_2)_4CH_3$) и н-гептан ($CH_3(CH_2)_5CH_3$) – изомеры линейного строения, оба растворителя нейтральны по отношению к внедренным молекулам, оптически прозрачные, легко кристаллизуются при температуре жидкого азота (T = 77,3 К). Трубки с исследуемым раствором погружались в жидкий азот и облучались светом лазера ЛГИ-21 с длиной волны 337 нм. Возбужденные спектры флуоресценции регистрировались спектрографом ИСП-51 на высокочувствительную ПЗС линейку TCD1304DG со спектральным диапазоном от 300 до 1100 нм. Обработка данных осуществлялась в программе для ЭВМ №2017616306 «Модуль автоматизации спектрального анализа для спектрографа ИСП-51» [2].

Анализ показал, что спектры всех образцов, полученных для гексановых растворов, наиболее интенсивны по сравнению с гептановыми (рис. 1).

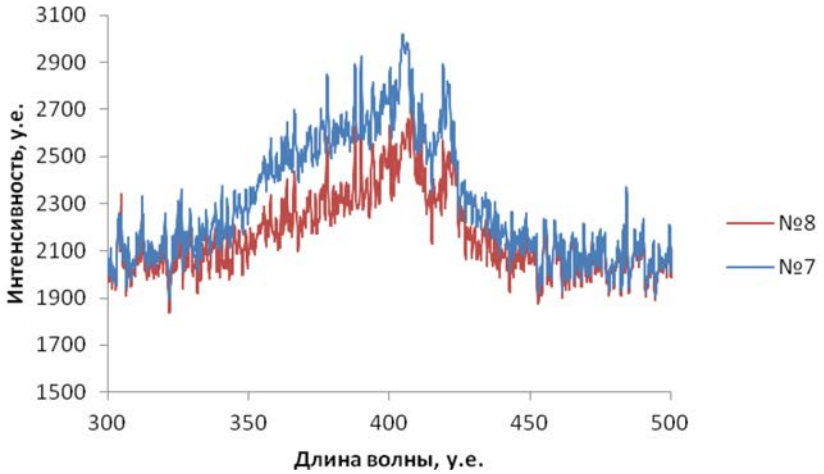


Рис. 1. Спектры люминесценции сажи Soot: № 7 – в гексане, № 8 – в гептане.

На рис. 1 отчетливо видны дискретные линии спектра сажи, а так же достаточно высокий общий фон, наличие которого можно объяснить образованием кластеров при больших концентрациях или взаимодействием молекул растворителя и примеси. Молекулы н-гексана и н-гептана образованы прочными σ-связями, не являются полярными и практически не имеют дипольного момента. Не имеют дипольного момента и молекулы фуллеренов, но в углеродных соединениях всегда присутствуют π-связи, и взаимодействия в данном случае будут зависеть от дисперсионных сил Лондона или индукционного наведенного притяжения в случае полярной молекулы примеси [5].

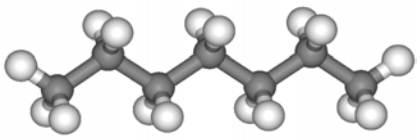


Рис. 2. Модель молекулы н-гептана.

Исследованные углеродные модификации химически нейтральны по отношению к растворителям, в данном случае имеет место не растворение, а встраивание молекул вещества в матрицу растворителя. Одно из главных условий получения дискретных спектров – топологическое соответствие структур растворителя и примесных молекул. Расстояние между атомами углерода алканов С–С составляет 0,154 нм и угол 109,5° (рис. 2). Молекула гептана длиннее молекулы гексана на однозвено CH_2 и по результатам эксперимента менее удобна, следует предположить, что наиболее удобную матрицу для фуллереновых производных нужно искать среди алканов с меньшей длиной молекулы.

Действительно, на рис. 3 видно, что все исследованные модификации способны давать квазилинейчатые спектры, но благодаря топологическим соответствиям структур н-гексана и C_{60}, наиболее интенсивным является спектр C_{60}.

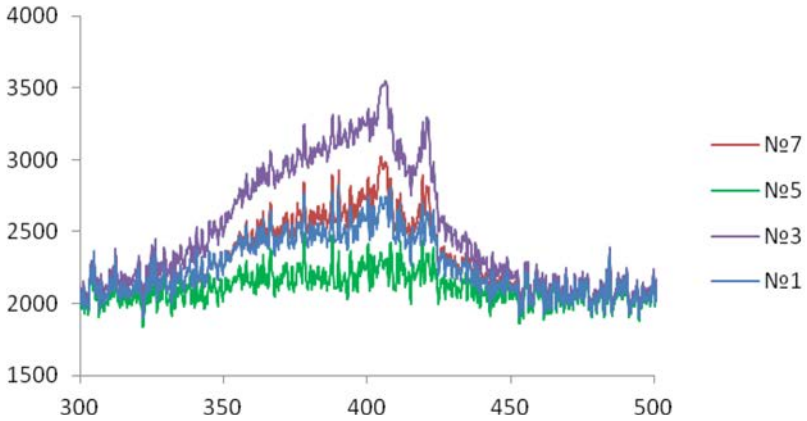


Рис. 3. Спектры люминесценции углеродных соединений:
№ 1 – Soot; № 3 – C_{60}; № 5 – нанотрубки; № 7 – $C_{60/70}$.

Соединение $C_{60}C_{70}$ дает менее интенсивные, сравнимые со спектром сажи, головные мультиплеты. Это объясняется сложностью подбора удобной матрицы для смеси частиц с разными размерами и топологией. Спектр наименьшей интенсивности и высоты квазилиний имеет раствор углеродных нанотрубок. Действительно, многослойность сложных образований и большая длина трубки (на три порядка длиннее молекулы растворителя) затрудняют выполнение условия топологического соответствия.

Таким образом, метод тонкоструктурной люминесценции вполне пригоден для исследования электронных спектров объемных молекул углеродных модификаций. Необходимы дальнейшие исследования для определения факторов, определяющих оптимальные условия получения квазилинейчатых спектров.

1. Разбирин, Б.С., Шека, Е.Ф., Старухин, А.Н., Нельсон, Д.К., Дегунов, М.Ю., Трошин, П.А., Любовская, Р.Н. Эффект Шпольского в оптических спектрах замороженных растворов органического производного фуллерена C_{60} в толуоле // ФТТ. – 2009. – Т. 51. – С.1238-1242.

2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017616306 «Модуль автоматизации спектрального анализа для спектрографа ИСП-51». Автор: А.А. Антонов. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 07 мая 2019 г.

3. Макарова, Т.Л., Захарова, И.Б. Электронная структура фуллеренов и фуллеритов. – СПб.: Наука, 2001. – 67 с.

4. Елецкий, А.В. Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства // УФН. – 2002. – 172 4. – 408 с.

5. Меределина, Т.А. Квазилинейчатые спектры люминесценции как метод исследования углеродных модификаций // Материалы XVIII региональной научной конф. «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование». – 2020. – С. 125-127.

УДК 538.97

ПРИМЕНЕНИЕ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ И РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ И ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

А.А. Набережнов
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе (г. Санкт-Петербург)
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

В докладе рассматриваются вопросы, связанные с использованием дифракционных методов для исследования нанокомпозитных материалов на основе нанопористых матриц. На конкретных примерах показано какую информацию можно получить из анализа дифратограмм и какие подходы следует использовать при интерпретации полученных результатов. Рассмотрены не только основные источники возможных ошибок при проведении измерений и при их обработке, но и методы их устранения.

APPLICATION OF NEUTRON AND X-RAYS DIFFRACTION FOR DIAGNOSTIC AND STUDIES OF NANOCOMPOSITE MATERIALS

A.A. Naberezhnov
Ioffe Institute (St.-Petersburg)
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

This lecture is devoted to application of diffraction methods for the study of nanocomposite materials based on nanoporous matrices. Some examples show what kind of information can be obtained from the analysis of diffraction patterns and what approaches should be used at interpretation of obtained results. It is considered not only the main sources of possible errors at measurements and at their fitting, but also the methods for their elimination.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.61-66

Введение

Одним из наиболее динамично развивающих направлений современной прикладной и фундаментальной физики является создание и исследование свойств наноструктурированных материалов. В настоящее время экспериментально и теоретически доказано, что изменение характерных размеров объекта от масштаба микрометров к нанометрам приводит к значительной модификации физических и структурных свойств ультрадиспергированных веществ. Можно сформулировать ряд критериев, когда можно ожидать подобные изменения свойств, в частности:

количество атомов в поверхностном слое (слоях) наночастицы становится сравнимым с общим числом атомов во всем объеме этой частицы;

размер наночастицы оказывается сравнимым (или меньше) корреляционной длины соответствующего взаимодействия (сегнетоэлектрического, магнитного и т.п.), характеризующего кооперативные эффекты, наблюдаемые в данном материале;

появляется развитый интерфейс между соседними частицами и/или между частицами и матрицей, в которой эти наночастицы находятся.

Безусловно можно сформулировать и другие критерии, но, на мой взгляд, приведенные выше являются наиболее важными.

Существуют различные методы получения наноструктурированных веществ, но в докладе будут рассмотрены только нанокомпозитные материалы (НКМ) на основе природных и искусственных пористых матриц, а в качестве метода исследования будет рассматриваться только порошковая дифракция.

1. Анализ дифрактограмм

Перейдем теперь непосредственно к вопросу: «Какую информацию о наночастицах можно получить из анализа экспериментальных дифрактограмм?». Естественно будет полагать, что функция разрешения использованного прибора нам известна, так как наблюдаемые пики являются сверткой функции разрешения и брэгговского рассеяния от исследуемого образца.

В качестве примера дифракции нейтронов на наноструктурированных материалах рассмотрим дифрактограмму для НКМ на основе пористого стекла со средним диаметром пор 7 нм (PG7) [1], содержащего свинец, введенный из расплава под давлением, приведена на рис. 1. На рисунке хорошо видно упругие пики, соответствующие структуре свинца, и диффузный фон (серая сплошная линия), соответствующий рассеянию на материале матрицы - аморфном SiO_2. Отметим, что фон структурирован в широкие пики, что отражает наличие областей локального упорядочения SiO_2 в матрице. Упругие пики от свинца уширены по сравнению с функцией разрешения дифрактометра. Согласно теории дифракции, причиной такого уширения могут быть два фактора: размерный эффект и наличие внутренних напряжений в наночастицах. Уширение, связанное с размерным эффектом (с размером кристаллитов), описывается функцией Лоренца и пропорционально $1/cos\Theta$, величина уширения, которое вносят напряжения задается функцией Гаусса и пропорциональна $tg\Theta$. Таким образом, можно разделить эти два эффекта: для определения размера частиц рассматривать уширение пиков с малыми брэгговскими углами, когда вклад $tg\Theta$ будет минимален, а при расчете напряжений рассматривать дифракционные пики на больших углах (~ 80º).

Чаще всего для определения дифракционного размера частиц используется метод Холла-Вильямсона (1) [2 – 4]:

$$B\,cos\theta = \eta\,sin\,\theta + k\lambda/D, \qquad (1)$$

где λ – длина волны излучения в ангстремах; B – уширение (ширина на полувысоте) пика, которая определяется с учетом функции, описывающей форму максимума и с учетом функции разрешения (пример см. в [3, 4]); D – дифракционный размер частицы; η – величина внутренних напряжений; Θ – значение брэгговского угла, k – параметр формы, обычно ~ 0.9.

Таким образом, из анализа ширин пиков мы можем определить и величину дифракционного размера наночастиц и наличие (величину) внутренних напряжений. Сразу отметим, что понятие «дифракционный размер» является некой усредненной по объему характеристикой **областей когерентного рассеяния** (в нашем случае нейтронов) и может быть существенно больше характерных средних размеров пор, если последние образуют сложную многосвязную 3D систему, что, например, характерно для нанопористых стекол. В этом случае нанокристаллит формируется сразу в нескольких соседних граничащих порах и параметр D оказывается существенно больше среднего диаметра пор, что неоднократно и наблюдалось экспериментально [5, 6]. На размер наночастиц в порах оказывают влияние смачиваемость стенок матрицы, метод приготовления наночастиц в порах и другие параметры. Так, например, размер частиц ртути, которая не смачивает стекло, введенной под давлением в PG7, составляет 7 нм [7], т.е. соответствует среднему диаметру пор. В случае НКМ PG7+Pb (рис. 2) наблюдается существенная разница в ширинах пиков для отражений типа (hhh) по сравнению с другими семействами. Это означает, что в направлении [111] размер наночастиц свинца несколько больше, т.е. эти наночастицы вытянуты вдоль направления [111]. Действительно, дифракционные размеры, определенные из анализа спектров, составили: вдоль [111] – 150(3) Å, перпендикулярно этой оси 96(3) Å [1].

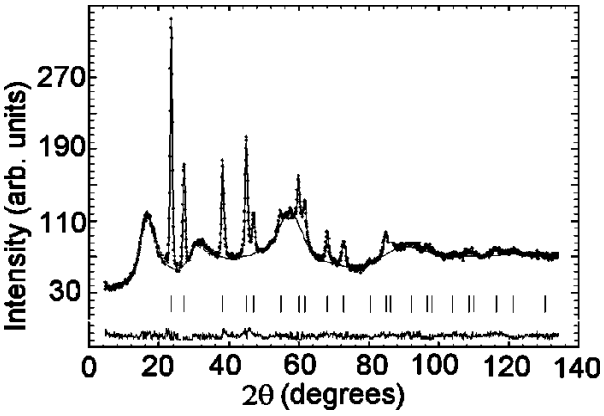


Рис. 1. Дифракционный спектр (точки) рассеяния нейтронов на НКМ PG7+Pb и подгонка (черная жирная линия) при 300 К. Линия внизу – невязка между экспериментом и подгонкой. Вертикальные линии – положения упругих пиков. Рисунок из работы [1].

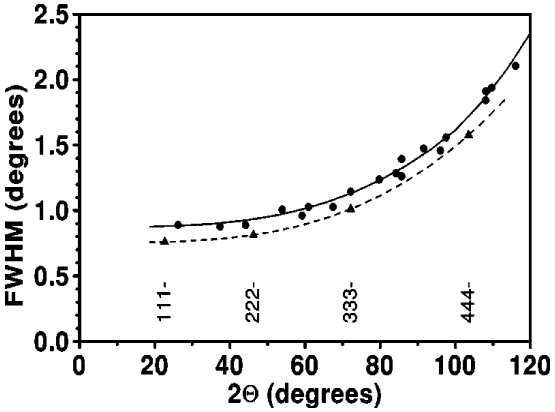


Рис. 2. Зависимость полной ширины на полувысоте (FWHM) для упругих пиков в НКМ PG7+Pb для различных семейств отражений. Пики тина (hhh) обозначены черными треугольниками. Рисунок из работы [1].

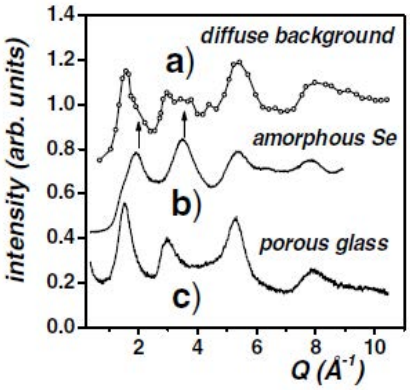


Рис. 3. Кривая a) – диффузный фон для НКМ PG7+Se, вычисленный методом экстраполяции по точкам, в которых вклад упругих пиков от селена пренебрежимо мал. Кривая c) – диффузный фон от пустого стекла. Кривая b) – спектр от аморфного Se. Рисунок из работы [8].

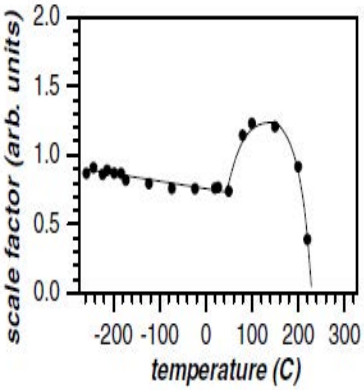


Рис. 4 Температурная зависимость масштабного фактора при обработке дифракционных спектров. Величина фактора пропорциональна количеству кристаллической фазы селена в НКМ PG7+Se. Рисунок из работы [8].

Исключительно информативными являются исследования температурной эволюции дифракционных спектров НКМ. Во-первых, коэффициенты теплового расширения наноструктурированных материалов часто принципиально отличаются от таковых для соответствующих массивных образцов. Во-вторых, анализ температурных зависимостей интенсивности позволяет получить информацию об особенностях тепловых колебаний в материалах, находящихся в условиях ограниченной геометрии, и об изменениях фононных спектров этих материалов.

Теперь обратимся к некоторому дополнительному анализу фона на дифрактограммах. Ранее уже было сказано, что этот фон в основном определяется матрицей, в наноканалы которой вводятся материалы, но это не всегда так. При изучении процессов «плавления-кристаллизации» НКМ PG7+Se [8] было обнаружено (рис. 3), что диффузный фон (кривая a) сильно отличается по форме от фона, характерного для пористого стекла (кривая c). При дальнейшем анализе выяснилось, что положения дополнительных аномалий, указанных стрелками на кривой a, отлично совпадают с положениями пиков в диффузном рассеянии на аморфном селене [9].

На рис. 4 приведена температурная зависимость масштабного фактора, полученная при обработке спектров. Величина этого фактора пропорциональна количеству кристаллической фазы в нанокомпозите. Из рисунка хорошо видно, что при нагреве от низких температур объем аморфной фазы растет, и только при температуре ~ 40 °C начинает возрастать вклад кристаллической фазы.

Таким образом детальный анализ диффузного фона оказался весьма полезен при изучении процесса плавления селена, находящегося в условиях искусственно ограниченной геометрии.

2. Форма линии упругих пиков

При исследованиях ряда НКМ с помощью дифракции нейтронов, а особенно синхротронного излучения, часто наблюдается асимметричная форма линии упругих отражений с резким подъемом слева от максимума и с очень затянутым «хвостом» справа при бóльших углах дифракции, особенно часто это встречается для образцов на основе канальных наноматриц, в которых наночастицы синтезируются с помощью химических реакций. В частности, установлено, что возможно появление наночастиц в порах в виде нанолент и/или наностержней. Профиль напоминает зуб пилы (saw-tooth) и обусловлен двумерной периодичностью структуры и характерен для дифракции на углеродных нанотрубках [10], слоях графита или на тонких слоях адсорбатов на графите [11, 12]. Теория рассеяния на двумерных объектах хорошо представлена в работе [13]. Помимо формы линии для двумерных структур характерна и еще одна особенность: максимум дифракционного пика смещается от Брэгговского положения в сторону больших углов рассеяния 2θ. Этот эффект смещения (сдвиг Уоррена [14]) приводит к некоему «эффективному» параметру элементарной ячейки, который меньше, чем истинный параметр, соответствующий трехмерной решетке. Для идеальной двумерной решетки величина этого сдвига вычисляется по формуле (2)

$$\Delta(\sin(\theta)) = 0.16\frac{\lambda}{L}, \qquad (2)$$

где Δ – сдвиг Уоррена, θ – угол рассеяния, L – характерный размер двумерной решетки, λ – длина волны падающего излучения.

Вопросы, связанные с учетом влияния этого сдвига на определение размеров наночастиц, рассмотрены, например, в работах [15, 16].

Есть еще один важный вопрос, возникающий в основном в случае изготовления образцов на основе порошков молекулярных сит. В основном заполнение таких матриц происходит из водного раствора и всегда остается не до конца решенной проблема присутствия вклада массивного материала. В то же время присутствие массива может существенно измерить макроскопические свойства НКМ [17].

Не всегда примесь массива можно определить, используя дополнительные методы, например, дифференциальную калориметрию. В этих случаях может помочь дополнительный анализ формы линии с привлечением простых математических соображений. Необходимыми условиями являются знание инструментальной формы линии используемого прибора и хотя бы один упругий пик с хорошей статистикой. Полагая, что рассеяние на массивном материале полностью описывается инструментальной функцией, достаточно проанализировать искажения формы линии наблюдаемого в эксперименте упругого пика от НКМ. Для этого достаточно определить все моменты (дисперсию, анизотропию и эксцесс) для экспериментально полученного распределения интенсивности от угла рассеяния и сравнить их с ожидаемыми для массивного материала. Как показывает проведенное нами моделирование [18] для функции разрешения и отклика от НКМ, описываемых либо гауссианом, либо лоренцианом или войтианом, даже при размере наночастиц около 80 нм 10% вклад от массивного материала становится экспериментально обнаружимым из дифракционного спектра. Такая информация

существенно облегчает дальнейшую обработку дифракционных спектров методом полнопрофильного анализа [19].

3. Малоугловое рассеяние

При исследовании НКМ больший интерес вызывает информация об особенностях внутреннего устройства нанокомпозитов, в том числе о пространственной организации наночастиц в исследуемых образцах и об их фрактальных характеристиках. Кроме того, малоугловое рассеяние нейтронов (SANS [20]) или рентгеновского излучения (SAXS [21]) дает независимые данные о размерах наночастиц в нанопористых матрицах. Для интенсивности рассеяния нейтронов на пористых системах можно написать следующее выражение [22]:

$$I(Q) = V_p^2 n_p^2 \left(\rho_p - \rho_s\right)^2 P(Q)\, S(Q), \tag{3}$$

где V_p – общий объем пор; n_p – их плотность (число на единицу объема); ρ_p и ρ_s – плотности длин рассеяния (для нейтронов) для пор и матрицы; $P(Q)$ – форм-фактор для пор (или частиц в матрице); $S(Q)$ – структурный фактор, который определяется пространственным упорядочением пор и описывает интерференционные эффекты от рассеяния на контрасте пора – матрица; Q – переданный импульс. Величина $P(Q)$ может быть рассчитана для частиц (пор) различной формы [22], но в области малых Q выполняется следующее общее условие:

$$P(Q) \approx \exp\left(-\frac{Q^2 R_g^2}{3}\right), \tag{4}$$

где Rg — радиус гирации (среднеквадратичный радиус инерции) рассеивающей частицы. Следует отметить, что при $QRg \leq 1$ (т. е. в области Гинье) величина $S(Q) \approx 1$, и все рассеяние определяется множителем $P(Q)$. При больших Q, в частности в области Порода, где выполняется условие $QRg \geq 1$, интенсивность рассеяния имеет вид:

$$I(Q) \sim S(Q) \sim SQ^{-(6-D)}, \tag{5}$$

где D – фрактальная размерность; S — полная площадь интерфейса между двумя фазами. В частном случае гладкой поверхности $D = 2$, тогда $I(Q) \sim Q^{-4}$, такое асимптотическое поведение носит название закона Порода [23]. Таким образом, определив показатель степени в выражении (5) из анализа данных SANS, можно получить информацию о фрактальной размерности и типе (массовый или поверхностный) фрактала [24].

Следует обратить внимание, что в разности $(\rho_p - \rho_s)^2$ в формуле (3) величины ρ – это плотности длин рассеяния соответствующих веществ, т.е. если поры заполнены несколькими материалами, то в формуле (3) появится несколько слагаемых, и эти разности (контраст) для атомов разного сорта будут иметь разные значения. Кроме того, эта разность не зависит от того в каком состоянии находится соответствующая фракция: в аморфном или в кристаллическом. Таким образом из совместного анализа данных по дифракции и SANS (SAXS) можно определить какая часть внедренного в поле материала находится в кристаллическом состоянии, а какая в аморфном.

Заключение

Использование дифракционных методов позволяет получить важную информацию о структуре, размерах, внутреннем устройстве материалов, внедренных в пористые матрицы, а также о наличии (или отсутствии) упругих напряжений и о состоянии интерфейса «матрица-введенные материал». Стоит отметить, что в случае дифракции нейтронов эта информация является усредненной (интегральной) по всему объему образца. Кроме того, надо также учитывать, что глубина проникновения рентгеновского излучения составляет несколько микрон, поэтому полученная информация скорее относится к поверхностному слою образца. В случае рентгеновского излучения следует использовать тонкие образцы и лучше работать в геометрии на прохождение. Не надо также забывать, что рентге-

новское излучение имеет высокую энергию и в случае поглощения в НКМ может приводить к существенной модификации введенного в поры материала вплоть до его плавления при достаточно малых размерах наночастиц.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 19-02-00760.

---

1. Golosovsky, I.V., Delaplane, R.G., Naberezhnov, A.A., Kumzerov, Y.A. Thermal motions in lead confined within porous glass // Phys. Rev. B. – 2004 – V. 69. – P. 132301-1 – 132301-4.

2. Williamson, G.K., Hall, W.H. X-ray line broadening from filed aluminium and wolfram // Acta Metallurgica. – 1953. – V. 1. – P. 22-31.

3. Mote, V.D., Purushotham, Y., Dole, B.N. Williamson – Hall analysis in estimation of lattice strain in nanometer-sized ZnO particles // Journal of Theoretical and Applied Physics – 2012 – V. 6(6) – P.1-8.

4. Prabhu, Y.T., Rao, K.V., Kumar, V.S.S., Kumari, B.S. X-Ray Analysis by Williamson-Hall and Size-Strain Plot Methods of ZnO Nanoparticles with Fuel Variation // World Journal of Nano Science and Engineering. – 2014 – V. 4 – P. 21-28.

5. Бескровный, А.И., Василовский, С.Г., Вахрушев, С.Б., Курдюков, Д.А., Зворыкина, О.И., Окунева, Н.М., Tovar, M., Rysiakiewicz-Pasek, E., Jaguś, P. Температурные зависимости параметра порядка для нитрита натрия, внедренного в пористые стекла и опалы // Физика твердого тела. – 2010 – Т.52 (5). – С. 1021-1025.

6. Набережнов, А.А., Ванина, П.Ю., Сысоева, А.А., Ciźman, A., Rysiakiewicz-Pasek, E., Hoser, A. Влияние ограниченной геометрии на структуру и фазовые переходы в наночастицах нитрата калия // Физика твердого тела. – 2018. – Т. 60(3). – С. 439-442.

7. Kumzerov, Yu.A., Nabereznov, A.A., Savenko, B.N., Vakhrushev, S.B. Freezing and melting of mercury in porous glass // Phys. Rev. B. – 1995. – V. 52(7). – P. 4772-4774.

8. Golosovsky, I.V., Smirnov, O.P., Delaplane, R.G., Wannberg, A., Kibalin, Y.A., Naberezhnov, A., Vakhrushev, S.B. Atomic motion in Se nanoparticles embedded into a porous glass matrix // Eur. Phys. J. B. –2006. – V.54. – P. 211-216.

9. Jóvári, P., Delaplane, R.G., Pusztai, L. Structural models of amorphous selenium // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67. – P. 172201-1 – 172201-4.

10. Reznik, D. , Olk, C.H., Neumann, D.A., Copley, J.R.D. X-ray powder diffraction from carbon nanotubes and nanoparticles // Phys. Rev. B. – 1995. – V. 52. – P. 116-125.

11. Kjems, J.K., Passell, L., Taub, H., Dash, J.G., Novaco, A.D. Neutron scattering study of nitrogen adsorbed on basal-plane-oriented graphite // Phys. Rev. B. – 1976. – V. 13. – P. 1446-1462.

12. Stephens, P.W., Heiney, P.A., Birgeneau, R.J., Horn, P.M., Moncton, D.E., Brown, G.S. High-resolution x-ray scattering study of the commensurate-incommensurate transition of monolayer Kr on graphite // Phys. Rev. B. – 1984. – V. 29. – P. 3512-3532.

13. Yang, D., Frindt, R.F. Powder x-ray diffraction of two-dimensional materials // J. Appl. Phys. – 1996. – V. 79. – P. 2377-2385.

14. Warren, B.E. X-ray diffraction in random layer lattices // Phys. Rev. – 1941. – V. 59. – P. 693-698.

15. Cervellino, A., Giannini, C., Guagliardi, A., Ladisa, M. Nanoparticle size distribution estimation by a full-pattern powder diffraction analysis // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 72. – P. 035412-1–9.

16. Golosovsky, I.V., Mirebeau, I., Elkaim, E., Kurdyukov, D.A., Kumzerov, Y.A. Structure of MnO nanoparticles embedded into channel-type matrices // Eur. Phys. J. B. – 2005. – V. 47. – P. 55-62.

17. Набережнов, А.А., Стукова, Е.В., Алексеева, О.А., Новикова, С.А., Franz, A. Эффекты, связанные с ограниченной геометрией, в нанокомпозитах на основе мезопористых матриц 2*D*-SBA-15 и 3*D*-SBA-15, содержащих наночастицы нитрита натрия // Журнал технической физики. – 2019. – Т. 89(12). – С. 1964-1969.

18. Алексеева, О.А., Набережнов, А.А. Алгоритм предварительного анализа дифракционных спектров для нанокомпозитных материалов с примесью массивной компоненты // Журнал технической физики (в печати).

19. https://www.ill.eu/sites/fullprof/

20. Cousin, F. Small angle neutron scattering // Eur. Phys. J Web of Conferences. – 2015. –V. 104 - 01004 (49 p.).

21. Guinier, A., Fournet, G. Small-angle scattering of X-rays. – New York, John Wiley& Sons Inc, 1955. – 268 p.

22. Ramsay, J.D.F. Surface and pore structure characterization by neutron scattering techniques // Advances in Colloid and Interface Science. –1998. –V. 76-77. – P. 13-37.

23. Porod, G. Die Röentgenkleinwinkeistreuung von dichtgepackten kolloiden Systemen //Kolloidn Zh. – 1951. – V. 124. – P. 83 -114.

24. Жульен, Р. Фрактальные агрегаты // Успехи физических наук. – 1989. – Т.157(2). – С. 339-357.

УДК 537.226

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ НИТРИТА НАТРИЯ И ПОРИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

А.В. Павлов, Н.С. Контес, Е.В. Стукова
Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
katal75@mail.ru

Получены нанокомпозитные образцы $NaNO_2/Al_2O_3$ путем внедрения нитрита натрия в пористые матрицы оксида алюминия с размером пор 100 и 70 нм. Образцы были исследованы методом растровой электронной микроскопии и диэлектрической спектроскопии. Показано, что в нанокомпозитных образцах $NaNO_2/Al_2O_3$ присутствует один размытый максимум в так называемой «области Кюри». Выявлено, что с уменьшением размера пор область Кюри смещается в сторону более высоких температур.

DIELECTRIC PROPERTIES OF FERROELECTRIC NANOCOMPOSITE BASED ON SODIUM NITRITE AND POROUS ALUMINUM OXIDE

A.V. Pavlov, N.S. Kontes, E.V. Stukova
Amur State University (Blagoveshchensk)
katal75@mail.ru

$NaNO_2/Al_2O_3$ nanocomposite samples were obtained by introducing sodium nitrite into porous alumina matrices with pore sizes of 100 and 70 nm. The samples were examined by scanning electron microscopy and dielectric spectroscopy. It is shown that in nanocomposite $NaNO_2/Al_2O_3$ samples there is one diffuse maximum in the so-called «Curie region». It was revealed that with a decrease in the pore size, the Curie region shifts towards higher temperatures.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.67-69

В последнее время в физике конденсированного состояния уделяется большое внимание изучению различных свойств материалов. Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования были посвящены изменениям физических характеристик отдельных малых частиц, а также частиц, полученных путем внедрения вещества в пористые матрицы, размер пор которых лежит в нанометровом диапазоне.

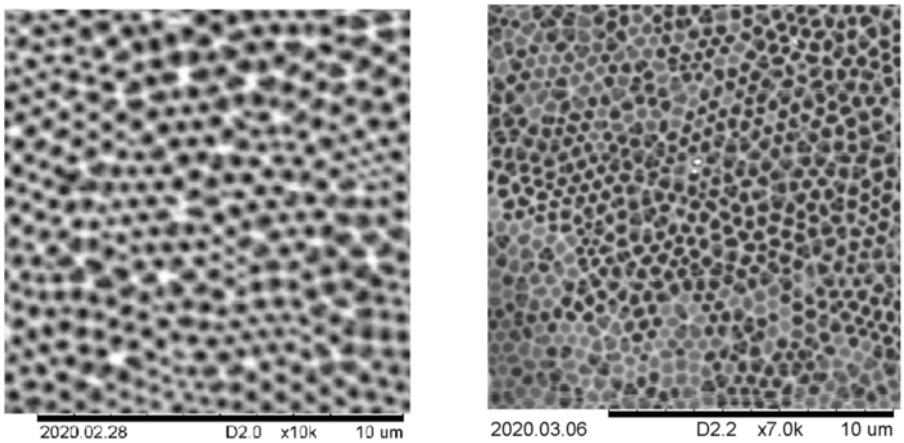
Изучение свойств наноструктурированых материалов – одна из актуальных задач, поскольку эти свойства представляют большой интерес для практического применения. В тоже время исследования хорошо известных классических материалов, находящихся в условиях искусственно ограниченной геометрии, важны для фундаментальной науки, так как их основные физические свойства претерпевают значительные изменения по сравнению с массивными материалами. Так, например, для некоторых материалов при ограниченной геометрии происходит смещение фазового перехода или гигантский рост диэлектрической проницаемости.

Целью работы было определение наличия размерных эффектов в наноразмерном нитрите натрия, внедренном в пористые пленки оксида алюминия.

В качестве сегнетоэлектрической компоненты композитных структур был выбран нитрит натрия $NaNO_2$, являющийся модельным сегнетоэлектриком. Для получения нанокомпозитных образ-

цов использовались подготовленные диэлектрические матрицы пористого оксида алюминия (рисунок 1 а) с размерами пор 100 и 70 нм, с размерами ячеек 125 нм и толщиной пленки 5 мкм. Таким образом, образцы представляли собой совокупность упорядоченных стержней нитрита натрия, разделенных стенками пор оксида алюминия. Внедрение сегнетоэлектрического наполнителя в пористые матрицы производилось из расплава. Для внедрения из расплава сегнетоэлектрик и пластина Al_2O_3 помещались в алундовый тигель, нагревались в печи выше температуры плавления исследуемого сегнетоэлектрика (для $NaNO_2$ T_n = 271°C). После постепенного охлаждения поверхность алюминиевой пластины очищалась от поверхностного слоя нитрита натрия.

Внедрение сегнетоэлектрической компоненты проводилось из расплава. Исследования пустой и заполненной пленок осуществлялись с помощью растрового электронного микроскопа TM1000. После внедрения нитрита натрия в поры образец прогревался для удаления адсорбированной воды и было получено повторное изображение композитного образца (рис. 1Б).



А Б

Рис. 1. РЭМ-изображение пленки пористого оксида алюминия: пленка до внедрения (А); пленка после внедрения нитрита натрия (Б).

На следующем этапе были исследованы диэлектрические свойства нанокомпозитных образцов. На рис. 2 представлен график температурной зависимости диэлектрической проницаемости образца с размером пор 100 нм на частоте 3 МГц, из которого следует, что в области температур от 160°C до 167°C происходит фазовый переход, как при нагреве, так и при охлаждении.

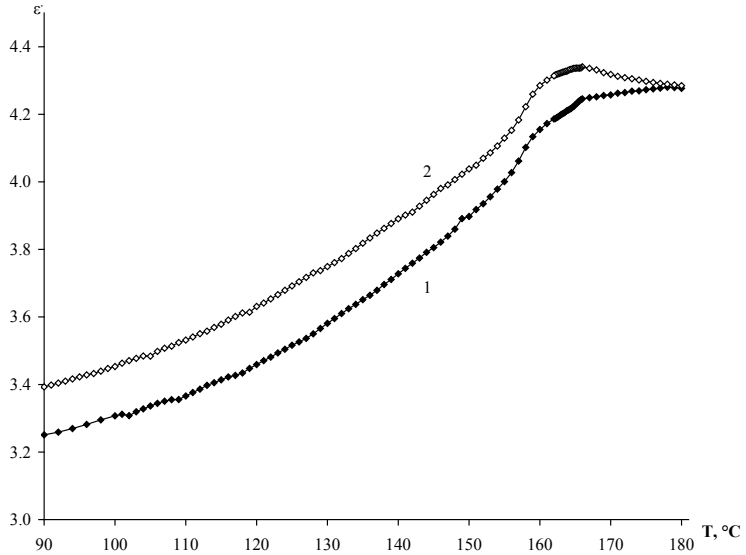


Рис. 2. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости образца $NaNO_2/Al_2O_3$ (100 нм) на частоте 3 МГц: 1 – нагрев; 2 – охлаждение

Максимум, соответствующий фазовому переходу существенно размывается по сравнению с объемным поликристаллическим нитритом натрия, у которого температура перехода составляет 165°С.

Для образца с размером пор 70 нм также происходит существенное размытие максимума. Температурная область, охватывающая фазовый переход составляет от 164°С до 171°С (рис. 3).

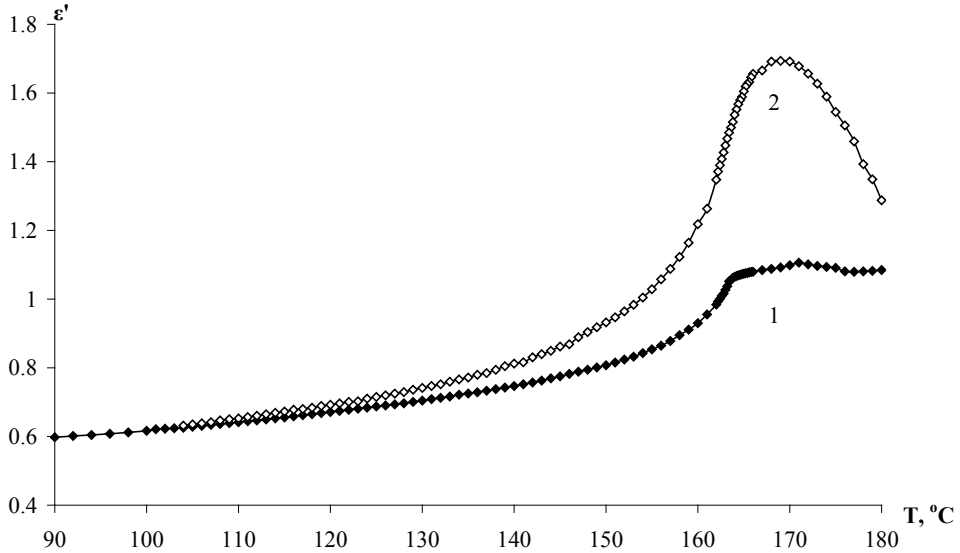


Рис. 3. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости образца $NaNO_2/Al_2O_3$ (70 нм) на частоте 1 МГц: 1 – нагрев; 2 – охлаждение.

Сравнивая полученные результаты с результатами, представленными в [1,2] для нитрита натрия в матрице МСМ-41 с размером каналов 37 Å и [311] для нитрита натрия в матрице SBA-15 с размером пор 52 Å, можно заметить, что пики, соответствующие переходам в несоразмерную, а затем в параэлектрическую фазу, не наблюдаются. Присутствует один размытый максимум в определенном интервале температур. Это можно объяснить тем, что в наноразмерном состоянии эти переходы в нитрите натрия не могут быть реализованы одномоментно при конкретных температурах. Их реализация происходит в течение некоторого времени, а именно в некотором интервале температур, т.е. в так называемой «области Кюри». В рамках этого интервала происходят постепенные переходы, наноразмерный нитрит натрия существует в трех состояниях: сегнетоэлектрическом, несоразмерном, параэлектрическом.

Также наблюдается смещение температурной области в сторону более высоких температур с уменьшением размера пор матрицы. Это также согласуется с данными, полученными для нитрита натрия, внедренного в наноразмерные силикатные матрицы [1-3].

1. Барышников, С.В., Чарная, Е.В., Стукова, Е.В., Michel, D., Адриянова, Н.П., Tien, C. Диэлектрические параметры мезо пористых решеток заполненных $NaNO_2$ // ФТТ. – 2007. –Т. 49, № 4. – С. 751-755.

2. Барышников, С.В., Чарная, Е.В., Стукова, Е.В., Michel, D., Tien, C., Милинский, А.Ю. Диэлектрические свойства смешанных сегнетоэлектриков $NaNO_2 - KNO_3$ в нанопористых силикатных матрицах // ФТТ. – 2009. – Т. 51, № 6. – С. 1772-1776.

3. Барышников, С.В., Чарная, Е.В., Стукова, Е.В., Michel, D., Tien, C., Милинский, А.Ю. Эволюция $NaNO_2$ в пористых матрицах // ФТТ. – 2004. – Т. 46, № 12. – С. 2224.

УДК 538.971:535.215.6

ЛАТЕРАЛЬНЫЙ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СТРУКТУРЕ $TiO_2/SiO_2/Si$

Т.А. Писаренко, В.В. Коробцов, А.А. Димитриев, В.В. Балашев
ИАПУ ДВО РАН (г. Владивосток)
tata_dvo@iacp.dvo.ru

В данной работе проведено исследование особенностей латерального фотовольтаического эффекта в структуре $TiO_2/SiO_2/Si$. Гигантский латеральный фотоэффект наблюдался в структуре $TiO_2/SiO_2/p$-Si вследствие формирования в ней инверсионного слоя на границе раздела SiO_2/p-Si, тогда как в структуре$TiO_2/SiO_2/n$-Si исследуемый эффект не наблюдался. Установлено, что в структуре $TiO_2/SiO_2/p$-Si латеральное фотонапряжение имеет линейную зависимость от положения лазерного излучения, при этом достигается большая чувствительность 477 мВ/мм. Механизмы латерального фотовольтаического эффекта раскрываются с помощью двухканальной модели латеральной фотопроволимости.

LATERAL PHOTOVOLTAIC EFFECT IN THE $TiO_2/SiO_2/Si$ STRUCTURE

T.A. Pisarenko, V.V. Korobtsov, A.A. Dimitriev, V.V. Balashev
IACP FEB RAS (Vladivostok)
tata_dvo@iacp.dvo.ru

In this work, we study the features of the lateral photovoltaic effect in the $TiO_2/SiO_2/Si$ structure. A giant lateral photoeffect was observed in the $TiO_2/SiO_2/p$-Si structure due to the formation of an inversion layer at the SiO_2/p-Si interface, while the studied effect was not observed in the $TiO_2/SiO_2/n$-Si structure. It was found that in the $TiO_2/SiO_2/p$-Si structure, the lateral photovoltage has a linear dependence on the position of the laser radiation, and a high sensitivity of 477 mV/mm is achieved. The mechanisms of the lateral photovoltaic effect are revealed by a two-channel model of lateral photoconductivity.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.70-73

Металл/оксид/полупроводниковые (МОП) структуры с тонким естественным изолирующим слоем (меньше 2.5 нм), многие годы тщательно изучались в качестве материалов для солнечных батарей (поперечный фотоэффект) [1]. Однако, помимо поперечного фотоэффекта, в МОП структурах может проявлять еще и латеральный фотовольтаический эффект [2-4]. Латеральное фотонапряжение генерируется из-за различия концентрации заряда, возникающего в результате локального облучения, и последующей ассиметричной диффузии заряда, при этом величина латерального фотонапряжения линейно меняется с изменением положения пучка света, что может быть использовано в различных оптических преобразователях и датчиках [2, 5]. МОП структуры широко изучаются в последнее время в целях улучшения чувствительности латерального фотоэффекта для развития позиционно-чувствительных детекторов [5-9]. Позиционно-чувствительные детекторы (ПЧД) используются, в основном, для точных измерений, таких как выравнивание различных устройств, медицинских приборах, пультах оптического выравнивания и фотороботах. В этой связи, ПЧД требуют высокого разрешения и высокой корреляции между выходным электрическим сигналом и положением светового луча, а также должны обеспечивать непрерывность информации.

Экспериментально было показано, что чувствительность латерального фотоэффекта определяется несколькими критическими факторами, такими как расстояние между электродами, мощностью и длиной волны источника света, выбором материала, толщиной слоя металла в случае МОП структур [6-8]. Влияние указанных факторов на чувствительность латерального фотоэффекта интерпретируется обычно с помощью диффузионной теории носителей заряда [6]. Хотя механизм латерального фотоэффекта на основе диффузионной теории, может быть несколько упрощенным и могут быть другие факторы, влияющие на величину латерального фотонапряжения и его чувствительность.

Ранее нами были изучены структуры Fe_3O_4/SiO_2/n-Si [7] и Fe/SiO_2/n-Si [8], в которых наблюдался ЛФЭ, причем увеличение удельного сопротивления пленок верхнего слоя привело как к увеличению чувствительности ЛФЭ в 4.7 раза, так и уменьшению нелинейности от 6 до 5%. При этом в обоих случаях имела место зависимость параметров ЛФЭ от толщины верхнего слоя. Представляет интерес исследование структур с более высоким удельным сопротивлением верхнего слоя. В качестве верхнего слоя нами были выбраны низкопроводящие пленки TiO_2, легированные марганцем [10]. Однако, для TiO_2/SiO_2/n-Si эффект не обнаружен. Тогда как высокие значения латерального фотонапряжения возникают в структуре TiO_2/SiO_2/p-Si, в которой на границе раздела SiO_2/Si формируется инверсионный слой, как и в ранее исследованных нами структурах [7, 8].

Пленки TiO_2 формировались на окисленной поверхности кремния ex-situ sol-gel методом [10]. Для измерения фотонапряжения на поверхность пленок наносились алюминиевые контакты (2×1) мм с расстоянием между ними 2 мм. Освещение осуществлялось He-Ne лазером с λ=633 нм и мощностью излучения, падающего на поверхность образца 0.3 мВт. Измерения зависимостей фотонапряжения U(x) и U(t) проводились с помощью Keitly-2000 и цифрового осциллографа АКИП-4115/5А, соответственно.

На рис.1а представлены зависимости латерального фотонапряжения от положения лазерного пучка при разных толщинах верхнего слоя для структуры TiO_2/SiO_2/p-Si. Как можно видеть из рис.1а, имеет место зависимость латерального фотонапряжения от толщины пленки (времени осаждения). На рис. 1б представлены толщинные зависимости чувствительности и нелинейности ЛФЭ. Зависимости чувствительности ЛФЭ являются экстремальными для всех исследуемых структур, а зависимости нелинейности ЛФЭ экспоненциально спадают с увеличением толщины верхнего слоя. Исходя из требований к рабочим характеристикам ПЧД [6], в данном случае в качестве оптимальной толщины следует выбрать образец с показателями чувствительности 477 мВ/мм и нелинейности 9%. Высокие значения нелинейности ЛФЭ в структуре TiO_2/SiO_2/p-Si, на наш взгляд, обусловлены латеральной неоднородностью встроенного барьера и высоким сопротивлением в области контактов. Неоднородность барьера может быть связана с сильной морфологической шероховатостью пленок, например, в работе [11] показано, что в пленках TiO_2, осажденных на стеклянную подложку, шероховатость достигает ~90 нм при размере зерна ~150 нм.

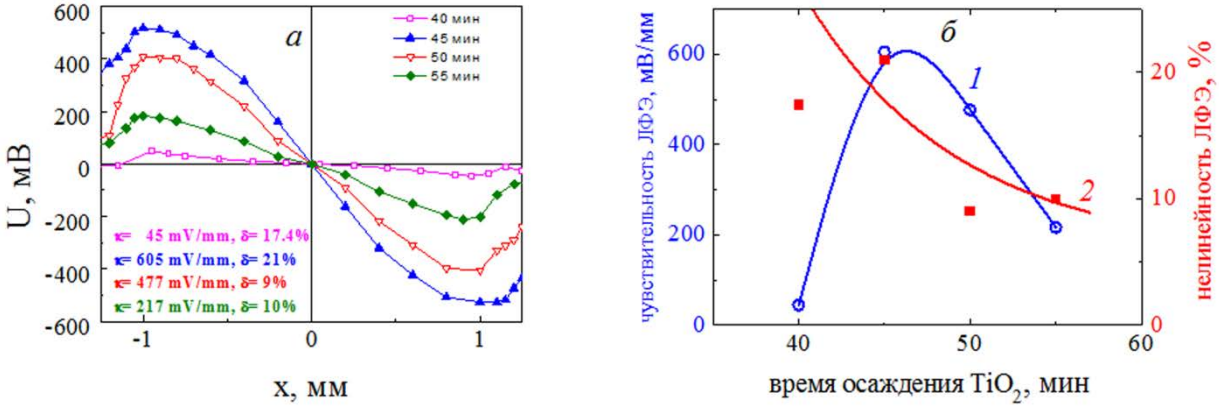


Рис. 1. Зависимости латерального фотонапряжения от положения светового пятна (а) и толщинные зависимости 1 – чувствительности и 2 – нелинейности ЛФЭ (б) для структуры TiO_2/SiO_2/p-Si.

Обычно характер изменения толщиной зависимости чувствительности ЛФЭ объясняют с двух точек зрения. С одной стороны, уменьшение чувствительности ЛФЭ в диапазоне малых толщин связано с нарушением сплошности пленки и, соответственно, уменьшением встроенного поля [9]. С ростом встроенного поля увеличивается число избыточных фотоносителей, а диффузионное рассеяние уменьшается, что и приводит к росту латерального фотонапряжения. Максимум ЛФЭ достигается, когда пленка становится непрерывной, а высота встроенного барьера - однородной [8, 9]. С другой стороны, уменьшение чувствительности ЛФЭ с дальнейшим увеличением толщины пленки приводит к уменьшению ее сопротивления и закорачиванию двух измерительных электродов.

Для более детального понимания поведения толщиной зависимости ЛФЭ необходимо рассмотреть механизмы проводимости в МОП структурах. Поскольку изолятор является достаточно тонким, то основным транспортным механизмом будет туннелирование носителей заряда через изолятор. Согласно теории туннелирования в МОП-структурах, проводимость поверхности полупроводника под межфазным слоем легко инвертируется, и формируется псевдо *pn*-переход, а генерация носителей заряда излучением происходит в объеме полупроводника. Следовательно, в МОП-структуре полупроводник от межфазной границы до его объемной части может быть разделен на три области: инверсионный слой, область обеднения и нейтральная область. Инверсионный слой МОП-структуры, где формируется двумерный электронный (или дырочный) газ, может быть управляемым каналом проводимости. Ранее в работе [12] было показано, что в области комнатных температур в МОП структурах с инверсионным слоем и туннельно-тонким оксидом кремния при толщине металлических пленок до 40 нм невозможно измерение проводимости металлического слоя, поскольку за счет термоэлектронной эмиссии проводимость в них определяется соотношением проводимостей верхнего металлического слоя и инверсионного слоя. Поскольку при комнатной температуре инверсионный слой имеет более высокую проводимость, то большая часть тока переносится электронным газом в инверсионном слое. Исходя из этой точки зрения сопротивление нагрузки, с которого снимается латеральное фотонапряжение, определяется суммарным сопротивлением при параллельном соединении. При малых толщинах пленки сопротивление инверсионного слоя в приповерхностной области монокристаллической подложки кремния значительно меньше сопротивления поликристаллической пленки, и фототок течет по инверсионному слою. С увеличением толщины пленки ее сопротивление уменьшается, когда сопротивление пленки становится меньше сопротивления инверсионного слоя, токоперенос уже осуществляется по пленке, что приводит к закорачиванию двух измерительных электродов и уменьшению чувствительности ЛФЭ. Однако в структуре TiO_2/SiO_2/p-Si сопротивление пленки оксида титана на порядки выше сопротивления пленок переходных металлов, поэтому уменьшение чувствительности ЛФЭ с увеличением толщины пленки TiO_2 обусловлено не уменьшением ее сопротивления, а потерями напряжения на контактах из-за высокого сопротивления пленки в поперечном направлении.

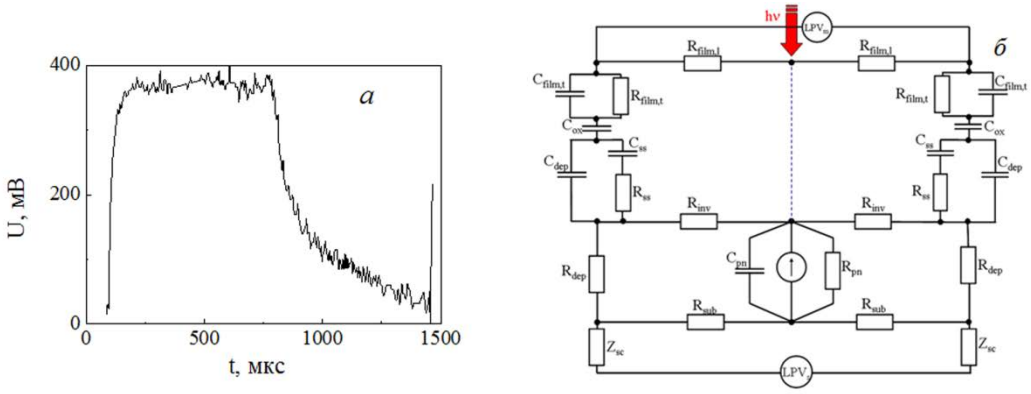


Рис. 2. Временные зависимости латерального фотонапряжения в структуре TiO_2/SiO_2/p-Si (а). Эквивалентная схема латеральной фотопроводимости при импульсном освещении (б).

Также были исследованы временные зависимости LPV при импульсном освещении. Как можно видеть из рис. 2а, высокое удельное сопротивление верхнего слоя приводит не только к увеличению сигнала фотонапряжения, но и достаточно большим временам нарастания и спада сигнала фотоотклика. В данной работе время нарастания определяется как время, необходимое для увеличения фотонапряжения от 10% до 90% пика фотонапряжения (LPV_{max}), а время затухания определяется как время, необходимое для снижения фотонапряжения с 90% до 10% LPV_{max}. В случае открытой схемы измерения в структуре TiO_2/SiO_2/p-Si время нарастания составляет 50 мкс, а время спада – 430 мкс. Исходя из предложенной выше двухканальной модели, следует, что столь существенное различие временных параметров объясняется RC-характеристиками цепи в области измерительных контактов, рис.2б. Замедление процесса фотоотклика в структуре TiO_2/SiO_2/p-Si связано с характеристиками (импедансом) электрического контакта. Поскольку, в отличие от обычных МОП структур, в данном случае к RC-фильтру поверхностного слоя подложки добавляется дополнительный RC-фильтр пленки TiO_2, учитывающий ее импедансные характеристики.

Таким образом, полученные в ходе исследования структуры TiO_2/SiO_2/p-Si характеристики ЛФЭ позволяют рассматривать данную структуру в качестве перспективного кандидата для высокопроизводительных позиционно-чувствительных детекторов.

1. Bube, R.H. Photoconductivity of Solids. – New York: Wiley and Sons, 1960.

2. Wallmark, J.T. A new semiconductor photocell using lateral photoeffect // Proceedings of the IRE. – 1957. – Vol. 45, № 4. – P.474-483.

3. Lucovsky, G. Photoeffects in nonuniformly irradiated p-n junctions // Journal of Applied Physics. – 1960. – Vol. 31, № 6. – P.1088-1095.

4. Коноров, П.П., Таранов, Ю.А. Поверхностный латеральный фотовольтаический эффект в германии // Ученые записки ЛГУ, № 370, Серия физических наук. Вопросы электроники твердого тела – Изд-во ЛГУ. – 1974. – Вып.17. – С. 114-121.

5. Hu, C., Wang, X., Song, B. High-performance position-sensitive detector based on the lateral photoelectrical effect of two-dimensional materials // Light: Science & Applications. – 2020. – Vol. 9, № 1. – P. 1-9.

6. Yu, C., Wang, H. Large lateral photovoltaic effect in metal-(oxide-) semiconductor structures // Sensors. – 2010. – Vol.10, № 11. – P.10155-10180.

7. Писаренко, Т.А., Балашев, В.В., Викулов, В.А., Димитриев, А.А., Коробцов, В.В. Сравнительное исследование латерального фотовольтаического эффекта в структурах Fe_3O_4/SiO_2/n-Si и Fe_3O_4/SiO_2/p-Si // Физика твердого тела. – 2018. – Т. 60. – Вып. 7. – С.1311-1317.

8. Pisarenko, T.A., Balashev, V.V., Korobtsov, V.V., Dimitriev, A.A., Vikulov, V.A. The lateral photovoltaic effect in the Fe/SiO_2/Si structure with different silicon conductivity type // Defect and Diffusion Forum. – 2018. – Vol. 386. – P. 137-142.

9. Huang, X., Mei, C., Hu, J., Zheng, D., Gan, Z., Zhou, P., Wang, H. Potential superiority of p-type silicon-based metal–oxide–semiconductor structures over n-type for lateral photovoltaic effects //IEEE Electron Device Letters. – 2016. – Vol. 37, №. 8. – P. 1018-1021.

10. Опра, Д.П. и др. Легированный марганцем диоксид титана с улучшенными электрохимическими характеристиками для литий-ионных аккумуляторов // Электрохимическая энергетика. – Т.19, № 3.– С.123-140.

11. Lias, J. et al. Influences of deposition time on TiO_2 thin films properties prepared by CVD technique // Jurnal Teknologi. – 2016. – Vol. 78, №. 10-3.

12. Dai, J., Spinu, L., Wang, K.Y., Malkinski, L., Tang, J. Channel switching and magnetoresistance of a metal-SiO_2-Si structure //Journal of Physics D: Applied Physics. – 2000. – Vol. 33, № 11. – P. L65.

УДК 538.975

ФОРМИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ТФЭ ТОНКИХ ПЛЕНОК Mg_2Si НА Si (111) И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ МЕТОДОМ ЭОС И СХПЭЭ

А.В. Поляков, Н.С. Новгородцев, Д.О. Струков, Д.В. Фомин
Амурский Государственный университет (г. Благовещенск)
polyakov_a_1999@mail.ru

Данная работа посвящена отработке методики формирования Mg_2Si путем послойного осаждения слоев магния и кремния в сверхвысоковакуумной камере на кремниевую подложку. В результате проведенного эксперимента методом ТФЭ были сформированы тонкие пленки толщинами 50 нм, исследованные затем методами электронной оже-спектроскопии и спектроскопии характеристических потерь энергии электронами. Анализ спектров оже-электронов показал, что сформированные тонкие пленки содержат атомы Mg и Si. Соотношение атомов Mg к атомам Si было определено методом коэффициентов элементной чувствительности и составило в пленке первого образца 11,3:1, а в пленке второго образца – 1:2,5. По результатам анализа спектров характеристических потерь энергии электронами установлено наличие силицидообразования у первого образца.

FORMATION OF Mg_2Si THIN FILMS ON Si (111) BY THE TFE METHOD AND THEIR RESEARCH BY THE EOS AND SHPEE METHOD

A.V. Polyakov, N. S. Novgorodtsev, D.O. Strukov, D.V. Fomin,
Amur State University (Blagoveshchensk)
polyakov_a_1999@mail.ru

This work was devoted to the development of a technique for the formation of Mg_2Si by layer-by-layer deposition of magnesium and silicon layers in an ultrahigh vacuum chamber on a silicon substrate. As a result of the conducted experiment, thin films with a thickness of 50 nm were formed by the TFE method, which were then studied by the methods of electron Auger spectroscopy and spectroscopy of characteristic energy losses by electro-us. The analysis of the Auger electron spectra showed that the formed thin films contain Mg and Si atoms. The ratio of Mg atoms to Si atoms was determined by the method of elemental sensitivity coefficients and was 11.3:1 in the film of the first sample, and 1:2.5 in the film of the second sample. According to the results of the analysis of the spectra of characteristic energy losses by electrons, the presence of silicide formation in the first sample was established.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.74-77

Силицид магния является перспективным материалом для микро- и нано- электроники, оптоэлектроники, термоэлектрических преобразователей, полупроводниковых приборов [1]. По литературным данным Mg_2Si является полупроводником с шириной запрещенной зоны от 0,6 до 0,8 эВ [2]. Однако при формировании тонких пленок силицида магния существует ряд трудностей, например, из-за высокой десорбции атомов магния с кремния, поэтому в настоящее время идет поиск эффективных и недорогих методов получения тонких пленок Mg_2Si [2 – 4].

В лаборатории физики поверхности НОЦ АмГУ для этой цели используется метод твердофазной эпитаксии, реализованный в сверхвысоковакуумной камере Varian прибора PHI-590 с базо-

вым давлением $1{,}33 \cdot 10^{-7}$Па [5]. Лаборатория уже имеется опыт по формированию силицидов на кремнии [6-7].

Для формирования тонких пленок Mg_2Si использовали кремниевые пластины, вырезавшиеся из промышленной шайбы FZN-100 Si (111) n-типа проводимости с удельным сопротивлением от 50 до 85 Ом·см. В качестве источника Mg использовалась магниевая стружка, срезаемая с бруска магния чистотой 99,999%. Термоисточник изготавливался в виде трубки из Ta с проколом посередине.

Кремниевые подложки подвергались RCA-очистке до загрузки в камеру, а после загрузки – прогреву при T=600°C в течение 1 ч., при температуре T=1250°C в течение 3 сек 3 раза.

Измерение скорости осаждения вещества велось с использованием кварцевого датчика, подключенного к прибору Sycon Instruments и составила 0,8 нм/мин для магния и 0,5 нм/мин для кремния. Первым этапом на кремниевых подложках образцов был сформирован буферный слой Si толщиной 60 нм. Затем на каждый образец осаждали поочередно слои Mg и Si толщинами 10 и 5 нм соответственно. Этот процесс повторяли трижды, в результате чего на образцах были сформированы тонкие пленки толщиной 50 нм. Отличие в формировании образцов заключалось в том, что для первого образца осаждение слоев проходило при температуре подложки 200°C, а для второго образца эксперимент осуществлялся при температуре подложки 100°C с последующим отжигом в течение 1сек.

Анализ сформированных пленок проводили *in-situ* методами электронной оже-спектроскопии и спектроскопии характеристических потерь энергии электронами. Спектры оже-электронов образцов 1 и 2 представлены на рис. 1.

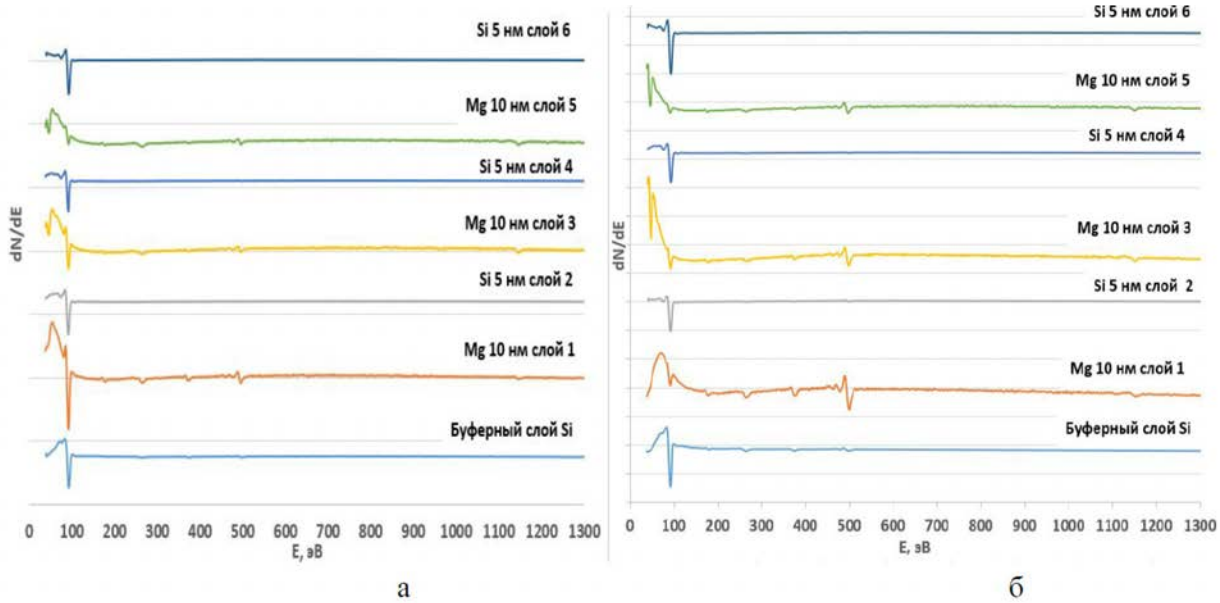


Рис. 1. Спектры оже-электронов образца 1 (а), образца 2 (б)

При анализе спектров оже-электронов, полученных от буферного слоя Si, у обоих образцов отчетливо наблюдается обратный пик большой интенсивности с энергией 92 эВ, по атласу спектров оже-спектров соответствующий чистому кремнию. На этапе формирования первого слоя магния у образца 1, как и у образца 2, кроме выше указанного обратного пика, наблюдается обратный пик малой интенсивности с энергией 1150 эВ, принадлежащий магнию. При этом интенсивность обратного пика Mg у образца 1 выше, чем у образца 2. На этапе формирования второго слоя Mg и у образца 1, и у образца 2 наблюдается дополнительный обратный пик с энергией 45 эВ (большей интенсивности у образца 1), который по данным атласа спектров оже-электронов также принадлежит магнию. Сравнивая спектры оже-электронов образцов при формировании 5 слоя можно заключить, что они незначительно отличаются от спектров, полученных на этапе формирования 3 слоя. После завершения формирования пленок силицида магния оба образца покрывались слоем аморфного Si для защиты их от возможного окисления после извлечения из сверхвысоковакуумной камеры.

Расчет относительной концентрации Mg и Si в тонких пленках, полученных на образцах 1 и 2, проводился для 5 слоя методом коэффициентов элементной чувствительности с использованием формул (1) и (2) [5]:

$$X_{Mg} = \left(\frac{I_{Mg}}{S_{Mg}}\right) / \left(\frac{I_{Si}}{S_{Si}}\right), \quad (1)$$

$$X_{Si} = \left(\frac{I_{Si}}{S_{Si}}\right) / \left(\frac{I_{Mg}}{S_{Mg}}\right), \quad 2)$$

где I_{Mg}, I_{Si} – амплитуда оже-пика Mg (45 эВ) и Si (92 эВ) по атласу спектров оже-электронов; S_{Mg}, S_{Si} – коэффициент элементной чувствительности Mg и Si.

По справочным данным и расчетам по атласу спектров оже-электронов: S_{Mg} = 0,41, S_{Si} = 0,35

Результаты расчета относительной концентрации Mg и Si по спектрам оже-электронов представлены в таблице.

Результаты расчета относительной концентрации Mg и Si по спектрам оже-электронов

Параметр	Образец 1	Образец 2
I_{Mg}	8	3
I_{Si}	2	4
X_{Mg}	3,4	0,6
X_{Si}	0,3	1,6
$\frac{X_{Mg}}{X_{Si}}$	11,3	0,4

В результате проведенного расчета методом коэффициентов элементной чувствительности соотношение атомов Mg к атомам Si составило в пленке первого образца 11,3:1, а в пленке второго образца – 1:2,5. Используемый в работе метод коэффициентов элементной чувствительности служит лишь для предварительной оценки полученных результатов. Более точная оценка состава и электронных свойств пленок будет получена позднее методом рентгенофазного анализа.

Дополнительно, сформированные пленки, исследовались методом спектроскопии характеристических потерь энергии электронами. Спектры характеристических потерь электронами представлены на рис. 2.

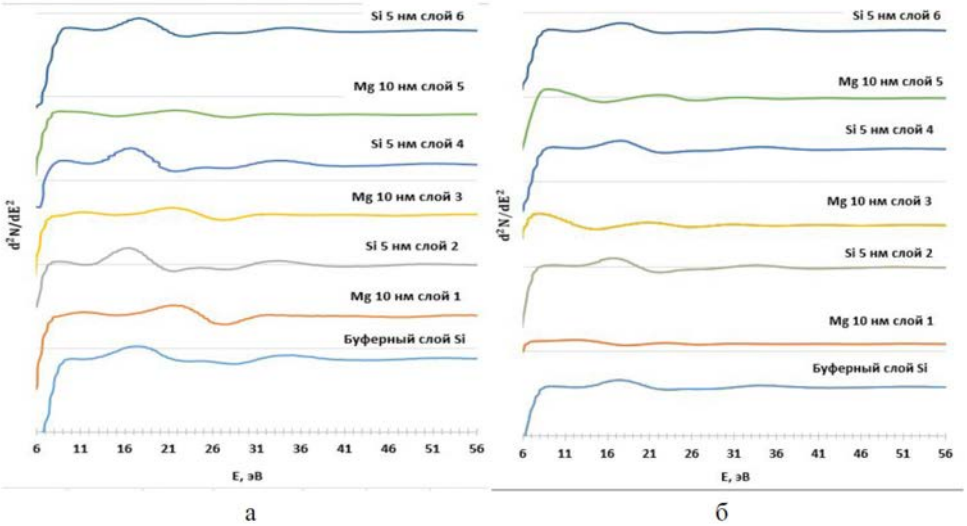


Рис. 2. Спектры характеристических потерь энергии электронами образца 1 (а), образца 2 (б)

Анализ спектров характеристических потерь энергии электронами, полученных от буферного слоя Si обоих образцов, показал, что на них присутствуют два интенсивных пика потерь с энергиями

9,6 и 17,4 эВ, которые, согласно литературным данным, соответствуют возбуждению поверхностного и объемного плазмонов. Остальные менее интенсивные пики связаны с потерями на многократное возбуждение плазмонов [8, 9]. На спектрах обоих образцов, полученных после формирования первого слоя Mg, заметны пики потерь с энергиями 7,7 и 11,3 эВ, по литературным данным соответствующие так же возбуждению поверхностного и объемного плазмонов. Пик потерь с энергией 22,6 эВ указывает на двукратное возбуждение объемного плазмона. Остальные пики связаны с потерями на многократное возбуждение плазмонов [8, 9]. На последнем этапе формирования пленок на спектрах характеристических потерь энергии электронами, соответствующих слою 5, заметен сдвиг по энергиям в меньшую сторону поверхностного и объемного плазмонов, происходит их уширение, как у пленки первого образца, так и второго образца. О начале процесса силицидообразования свидетельствует наличие пика малой интенсивности при энергии 7,7 эВ, наблюдаемого только у первого образца.

Таким образом, в результате проведенного эксперимента методом ТФЭ были сформированы тонкие пленки толщиной 50 нм, исследованные затем методами электронной оже-спектроскопии и спектроскопии характеристических потерь энергии электронами. Анализ спектров оже-электронов показал, что сформированные тонкие пленки содержат атомы Mg и Si. Соотношение атомов Mg к атомам Si в пленках было определено методом коэффициентов элементной чувствительности и составило: в пленке первого образца 11,3:1, а в пленке второго образца – 1:2,5. По результатам анализа спектров характеристических потерь энергии электронами установлено наличие силицидообразования у первого образца.

1. Daniel C., Ramirez, Leilane R., Macario, Xiaoyu, Cheng, Michael, Cino, Daniel, Walsh, Yu-Chih, Tseng, Holger, Kleinke. Large Scale Solid State Synthetic Technique for High Performance Thermoelectric Materials: Magnesium-Silicide-Stannide. ACS Applied Energy Materials 2020.

2. "Probing the Mg_2Si/Si(111) heterojunction for photovoltaic applications" /Alexander Shevlyagin, Igor Chernev, Nikolay Galkin, Andrey Gerasimenko, Anton Gutakovskii, Hirofumi Hoshida, Yoshikazu Terai, Naofumi Nishikawa, Keisuke Ohdaira //Solar Energy 211 (2020). – P. 383-395.

3. Udono, H., Yamanaka, Y., Uchikoshi, M., Isshiki, M., 2013. Infrared photoresponse from pn-junction Mg_2Si diodes fabricated by thermal diffusion. J. Phys. Chem. Solids 74, pp 311–314.

4. "Semiconducting Mg_2Si thin films prepared by molecular-beam epitaxy" /John E. Mahan, Andre´ Vantomme, and Guido Langouche //Physical review B volume 54, Number 23 15 December 1996-I. pp 16 965 - 16 971.

5. Фомин, Д.В. Экспериментальные методы физики твердого тела. Учебное пособие. – Благовещенск: Амурский государственный университет, 2014. – 184 с.

6. "An investigation of the electrical and optical properties of thin iron layers grown on the epitaxial Si(111)-(2 × 2)-Fe phase and on an Si(111)7 × 7 surface"/ Goroshko D.L., Galkin N.G., Fomin D.V., Gouralnik A.S., Vavanova S.V. Journal of Physics Condensed Matter, T. 21, № 43, 2009. C. 435801. (8pp) – DOI: 10.1088/0953-8984/21/43/435801

7. Твёрдофазный рост и структура плёнок дисилицида бария на Si (111) / В. Л. Дубов, Д. В. Фомин, Н. Г. Галкин // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета им. академика С.П. Королёва (национального исследовательского университета). – 2016. – Т. 15. – № 2. – С. 114-121. – DOI 10.18287/2412-7329-2016-15-2-114-121.

8. Оура, К. Введение в физику поверхности: учеб. для вузов / К. Оура, В.Г. Лифшиц, А.А. Саранин, А.В. Зотов, М. Катаяма. – М.: Наука, 2005. – 499 с.

9. Лифшиц В.Г., Луняков Ю.В., Спектры ХПЭЭ поверхностных фаз на кремнии. Владивосток: Дальнаука, 2004. 315 с.

УДК 537.226

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА $(DIPAC)_{0,6}/(PbTiO_3)_{0,4}$

А.В. Сахненко[1], Е.Ю. Королева[2], Е.В. Стукова[1], О.Н. Задорожная[1]
[1]Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
[2]Физико-технический институт им. Иоффе (г. Санкт-Петербург)
anna_izbickaya@mail.ru

Представлены результаты исследований диэлектрических свойств композита $(DIPAC)_{0,6}/(PbTiO_3)_{0,4}$. Показано, что добавка титаната свинца к хлориду диизопропиламмонию приводит к понижению температуры плавления и гигантскому увеличению диэлектрической проницаемости, а также возникновению дополнительного максимума диэлектрической проницаемости при нагреве и охлаждении.

STUDY OF THE DIELECTRIC PROPERTIES OF A FERROELECTRIC COMPOSITE $(DIPAC)_{0.6}/(PbTiO_3)_{0.4}$

A.V. Sakhnenko[1], E.Yu. Koroleva[2], E.V. Stukova[1], O. N. Zadorozhnaya[1]
[1]Amur State University (Blagoveshchensk)
[2]Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University (St. Petersburg)
anna_izbickaya@mail.ru

The results of investigations of the dielectric properties of the composite $(DIPAC)_{0,6}/(PbTiO_3)_{0,4}$. are presented. It is shown that the addition of lead titanate to diisopropylammonium chloride leads to a decrease in the melting temperature and a giant increase in the dielectric constant, as well as the appearance of an additional maximum of the dielectric constant upon heating and cooling.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.78-81

Широкое применение сегнетоэлектриков делает их изучение одним и приоритетных направлений физики конденсированного состояния. Сегнетоэлектрики представляют собой уникальный класс электроактивных материалов, обладающих спонтанной поляризацией, которая возникает в некотором интервале температур и может переключаться электрическим полем. Так сегнетоэлектрики могут применяться в технике и электронике: в конденсаторах, модуляторах, пьезоэлектрических и пироэлектрических устройствах, в устройствах памяти и проч.

Однако можно выделить некоторые недостатки неорганических сегнетоэлектриков: использование токсичных и тяжелых металлов, дорогостоящие методы изготовления, высокотемпературная обработка. Поэтому в настоящее время все больше возрастает интерес к органическим альтернативам неорганических сегнетоэлектриков. Органические сегнетоэлектрики представляют собой особенную группу материалов, для которых характерно возникновение сегнетоэлектричества благодаря наличию электрических дипольных моментов у некоторых молекулярных ионов.

Одним из перспективных направлений являются молекулярные сегнетоэлектрики на основе диизопропиламмония (DIPA), которые могут использоваться, например, в технологиях органической электроники. Для таких соединений характерны большая спонтанная поляризация, относительно вы-

сокая температура плавления, заметно более низкое коэрцитивное поле и экологическая безопасность. Так, для хлорида диизопропиламмония ($C_6H_{16}NCl$, DIPAC) значение спонтанной поляризации (P_s) составляет ~ 8.2 мкКл × см$^{-2}$, температура Кюри T_c = 440 К. Для бромида диизопропиламмония ($C_6H_{16}NBr$, DIPAB), P_s ~ 23 мкКл × см$^{-2}$, T_c = 426 К. Иодид диизопропиламмония ($C_6H_{16}NI$, DIPAI), обладает P_s ~ 33 мкКл × см$^{-2}$, T_c = 415 К [1-3].

Цель настоящей работы – определить влияние частиц титаната свинца на диэлектрические свойства и температуры фазовых переходов хлорида диизопропиламмония в составе композита $(DIPAC)_{0,6}/(PbTiO_3)_{0,4}$.

Для получения композитов использовались порошки DIPAC с размером частиц ~10 мкм и порошки $PbTiO_3$ с размером частиц ~1 мкм. Композитные образцы с объемной долей 0,40 $PbTiO_3$, где получались путем тщательного перемешивания и прессования порошков при давлении ~10^4 кг/см^2. Образцы имели форму дисков диаметром 10 мм и толщиной 1,5 мм; на их поверхность наносились серебряные электроды.

Для измерения диэлектрической проницаемости ε использовался широкополосный спектрометр Novocontrol в частотном диапазоне 0.1 Гц – 3 МГц и температурном интервале от 300 К до 450 К. Измерения проводились в режиме нагрев-охлаждение с точностью до 0.01 градуса. Скорость изменения температуры составляла 1 градус в минуту. В качестве электродов использовалась серебряная паста. Для удаления адсорбированной воды образцы прогревались в течение 30 минут при температуре 393 К.

Результаты исследования диэлектрических свойств композитного образца представлены на рис. 1 и 2. Как следует из представленных графиков, величина диэлектрической проницаемости на низких частотах достигает гигантских значений вые фазового перехода, как при нагреве, так и при охлаждении. Это может быть связано с тем, что образец прогревался до 450 К – температуры плавления DIPAC. В композите эта температура может быть ниже по сравнению с чистым DIPAC.

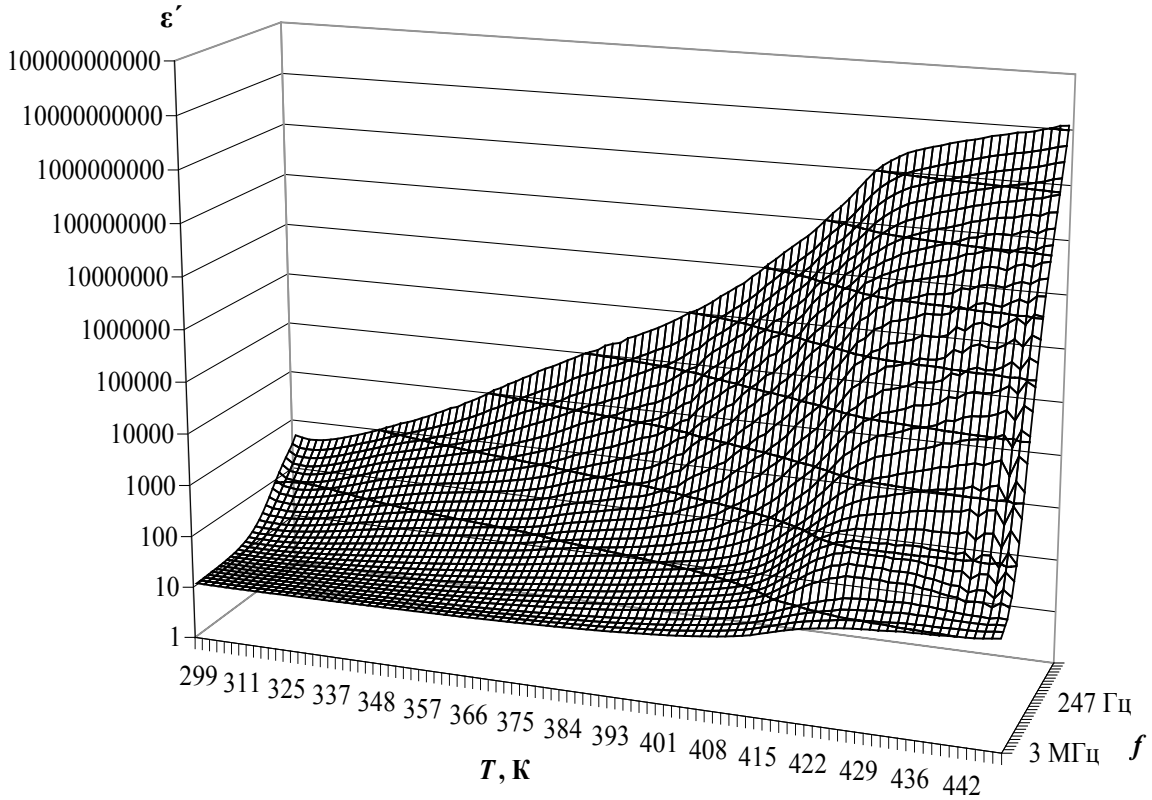


Рис. 1. Температурно-частотная зависимость диэлектрической проницаемости образца $(DIPAC)_{0,6}/(PbTiO_3)_{0,4}$.при нагреве.

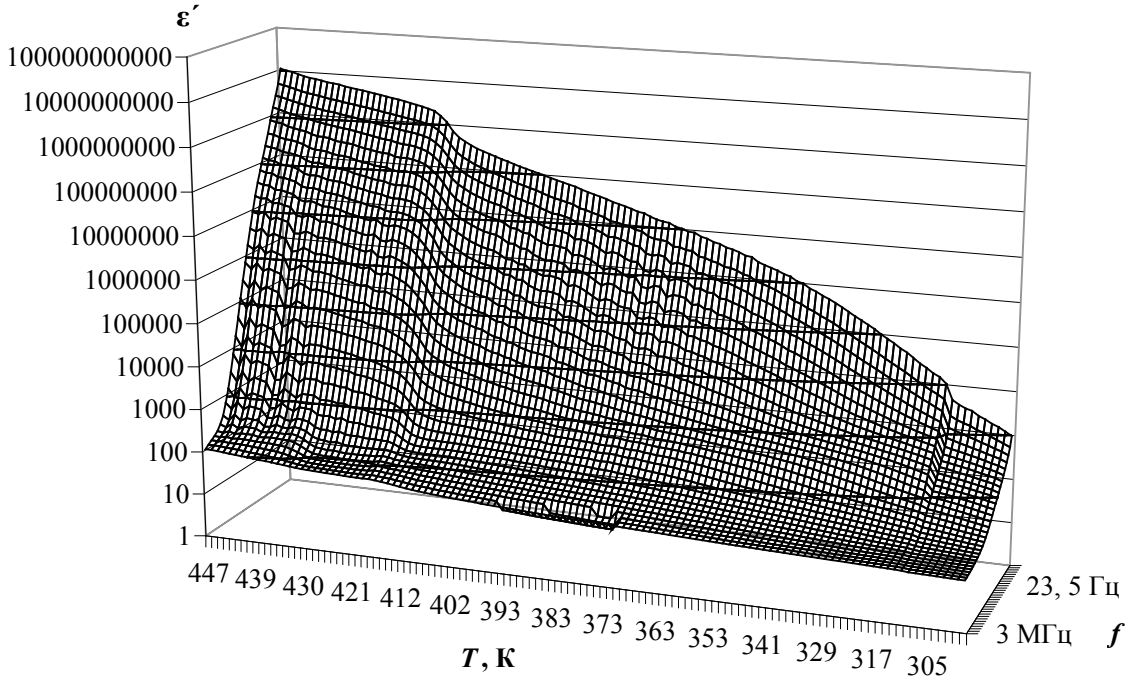


Рис. 2. Температурно-частотная зависимость диэлектрической проницаемости образца $(DIPAC)_{0,06}/(PbTiO_3)_{0,4}$. при охлаждении.

Максимумы диэлектрической проницаемости на температурно-частотных зависимостях существенно размыты и наблюдаются при температурах 425 К (нагрев) и 417 К (охлаждение), что на 15 градусов ниже по сравнению с чистым DIPAC. На частотах выше 100 кГц присутствуют (рис. 3) два максимума, как при нагреве, так и при охлаждении. Верхний максимум наблюдается при температуре 435 К, что близко к температуре фазового перехода в чистом DIPAC.

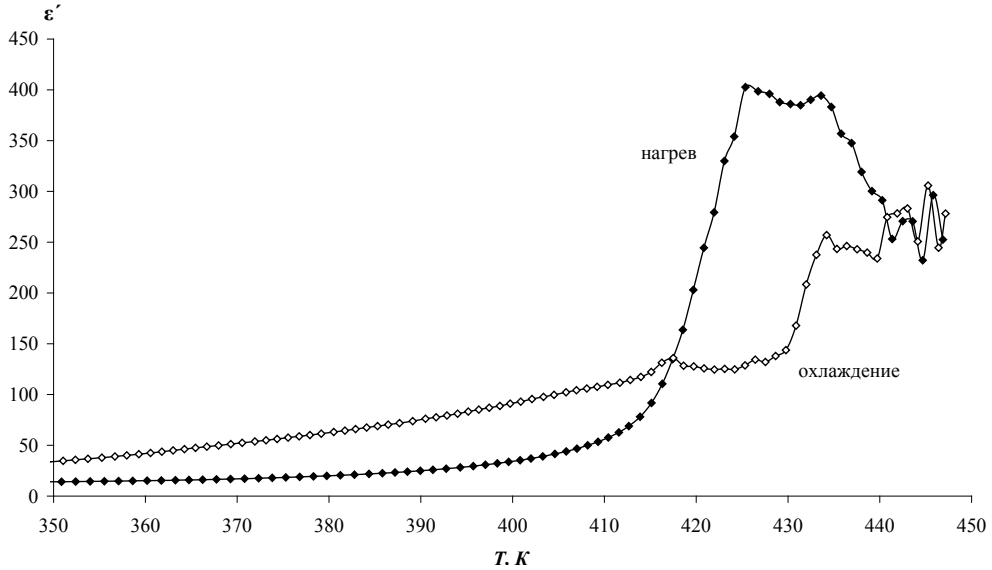


Рис. 3. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости образца $(DIPAC)_{0,06}/(PbTiO_3)_{0,4}$ на частоте 160 кГц.

Полученные данные согласуются с проведенными ранее исследованиями. В работе [4] исследовались диэлектрические свойства композитов $(DIPAC)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$ для x от 0,10 до 0,40. И было показано, что добавка титаната свинца к хлориду диизопропиламмонию приводит к возникновению до-

полнительных фазовых переходов при нагреве и охлаждении. Появление нового фазового перехода объясняется в рамках диполь-дипольного взаимодействия между компонентами.

1. Fu, D.-W., Zhang, W., Cai, H.-L., Ge, J.-Z., Zhang, Y., Xiong, R.-G. Diisopropylammonium chloride: a ferroelectric organic salt with a high phase transition temperature and practical utilization level of spontaneous polarization // Adv. Mater. – 2011. – V. 23. – P. 5658-5662.

2. Fu, D.-W., Cai, H.-L. Liu, Y., Ye, Q., Zhang, W., Zhang, Y., Chen, X.-Y., Giovannetti, G., Capone, M.., Li, J., Xiong, R.-G. Diisopropylammonium bromide is a high-temperature molecular ferroelectric crystal // Science. – 2013. – V. 339. – P. 425-8.

3. Piecha, A., Gagor, A., Jakubas, R., Szklarza P. Room-temperature ferroelectricity in diisopropylammonium bromide // Cryst. Eng. Comm. – 2013. – V. 15. – P. 940-944.

4. Stukova, E.V., Baryshnikov, S.V. Phase transitions in composites based on diisopropylammonium chloride and lead titanate // St Petersburg Polytechnic University Journal-Physics and Mathematics. – 2020. – V. 13 (3). – P. 15-21.

УДК 539.216

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ АНОДНЫХ ОКСИДНЫХ ПЛЕНОК НА СПЕЧЕННЫХ ПОРОШКАХ ГУБЧАТОГО ТИТАНА

К.В .Степанова, А.Н. Кокатев, А.М. Шульга, Д.М. Комлева
Петрозаводский государственный университет (г. Петрозаводск)
lady.cristin4ik@yandex.ru

Представлены результаты оценки фотокаталитической активности анодированных образцов пористых порошковых материалов из губчатого титана в модельной реакции разложения метилового оранжевого при облучении светом в видимой области спектра. Показано, что после термообработки в вакууме наблюдается устойчивая тенденция к уменьшению исходной концентрации красителя при эффективности более 40% в результате семичасовой засветки.

INFLUENCE OF HEAT TREATMENT CONDITIONS ON THE PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF ANODIC OXIDE FILMS FORMED ON SINTERED TITANIUM SPONGE POWDERS

K.V .Stepanova, A.N. Kokatev, A.M. Shulga, D.M. Komleva
Петрозаводский государственный университет (г. Петрозаводск)
lady.cristin4ik@yandex.ru

The results of the photocatalytic activity estimation of anodized samples of porous powder materials made of titanium sponge in a model degradation reaction of methyl orange under visible light irradiation are presented. It is shown that after heat-treatment in vacuum, there is a tendency to decrease the initial dye concentration at an efficiency of more than 40% as a result of seven-hours illumination.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.81-84

На сегодняшний день самым известным и широко используемым фотокатализатором является диоксид титана [1]. Интенсивно также исследуется нанотрубчатый анодный оксид титана (НТАОТ), но его применение в качестве каталитически и фотокаталитически активных материалов сдерживает-

ся низкими механическими характеристиками, малыми значениями фотоотклика и КПД преобразования энергии солнца в электрическую. Известно [2], что в результате нагрева на воздухе НТАОТ с аморфной атомной структурой кристаллизуется с образованием анатаза (a-TiO_2) и/или рутила (p-TiO_2), что вызывает появление фотокаталитических свойств при облучении УФ. Ранее было показано [3], что при определенных условиях анодирования пористых порошковых материалов (ППМ) из губчатого титана на поверхности микрочастиц порошка могут быть получены самоорганизованные нанопористые/нанотрубчатые АОП с рентгеноаморфной структурой и диаметром пор в интервале от 30 до 70 нм. Изучение процесса кристаллизации таких АОП может оказаться перспективным для получения новых фотокаталитических наноматериалов, активных и в видимой области спектра.

Данная работа посвящена оценке фотокаталитической активности (ФКА) анодированных образцов ППМ из губчатого титана до и после термической обработки (в вакууме и на воздухе) с применением метода спектрофотометрии.

Объектами исследования являлись ППМ из губчатого порошка технически чистого титана марки ТПП с размером частиц в интервале от 0.63 до 1 мм. Подробно методика прессования, спекания и предобработки образцов изложена ранее в [2, 3]. В данной работе были использованы образцы массой в диапазоне от 170 до 400 мг (средняя масса составила 295 мг). Анодирование проводилось при комнатной температуре в вольтстатическом режиме (ВСР) в течение 60 мин. в электролите 10% H_2SO_4 + 0.15% HF. Условия анодирования, при которых проводилось формирование оксидных пленок, выбирались в соответствие с данными [3] по анодированию ППМ губчатого титана в этом же электролите. Начальный этап анодирования осуществлялся путем линейного увеличения напряжения до заданного значения 15 В со скоростью 100 мВ/с. Дальнейший процесс проходил при постоянном напряжении с регистрацией зависимости тока от времени с помощью электронного самописца ЭРБИЙ-7115. В результате получали зависимости $I_a(t)$, где I_a – значения тока, приходящегося на единицу массы образца (мА/г). Для исследования влияния термообработки на фотокаталитические свойства полученных оксидов титана осуществлялся отжиг анодированных образцов как в муфельной (на воздухе), так и в вакуумной (~10^{-4} мм рт.ст.) печах при T = 820°C в течении t = 30 мин [2].

Изучение ФКА исследуемых образцов выполнялось с помощью реакции разложения метилового оранжевого (МО) с концентрацией 5 мг/литр (перемешивание осуществлялось с применением барботирования). Экспериментальная установка состояла из металлогалогенной лампы ДРИ-250-5 (мощность 250 Вт, спектральный диапазон λ = 420-700 нм), используемой в качестве источника излучения видимого диапазона, емкости с раствором МО и объектом исследования, погруженную в сосуд с водой для поддержания постоянной температуры. В течение получаса проводили «темновое» перемешивание для обеспечения равновесия между процессами адсорбции и десорбции. Затем в течение 6–7 ч каждый час осуществляли отбор проб. Далее с помощью спектрофотометра ПЭ-5300ВИ и программы Autospectrofot [4] для объектов исследования как до, так и после отжига регистрировались зависимости оптической плотности (А) от длины волны в диапазоне от 320 до 600 нм с шагом 5 нм. Оценку концентрации (С) раствора МО и эффективности (η) его разложения осуществляли по формулам (1) и (2)

$$C_x = \frac{A_x \times C_и}{A_и}, \qquad (1)$$

где C_x – искомая концентрация; A_x – оптическая плотность объекта (раствора МО); $C_и$ – исходная концентрация; $A_и$ – исходная оптическая плотность;

$$\eta = \frac{C_и - C_i}{C_и} \times 100\%, \qquad (2)$$

где η – эффективность разложения; $C_и$ – исходная концентрация; C_i – концентрация объекта.

На первом этапе выполнялось анодирование образцов ППМ из губчатого титана в водном

фторсодержащем электролите 10% H_2SO_4 + 0.15% HF в оптимальных условиях, обеспечивающих формирование наноструктурированной оксидной пленки [3]. Далее анодированные образцы были подвергнуты термообработке при T = 820°C (t = 30 мин), чтобы обеспечить кристаллизацию аморфной пленки диоксида титана. Затем были проведены испытания по оценке ФКА и построены графики зависимостей A(λ) для каждого часа засветки.

Для образцов после анодирования все зависимости A(λ) были практически идентичны исходной кривой для раствора МО. Отсюда можно заключить, что анодированные образцы губчатого титана, являющиеся рентгеноаморфными, не проявляют фотокаталитической активности в видимом диапазоне излучения, что согласуется с литературными данными (ширина запрещенной зоны E_g=3.2 эВ, что соответствует фотокаталитической активности под действием УФ облучения) [1]. После отжига анодированных образцов в муфельной (на воздухе) и в вакуумной печах при T=820°C в течение 30 мин. целостность образцов сохранилась.

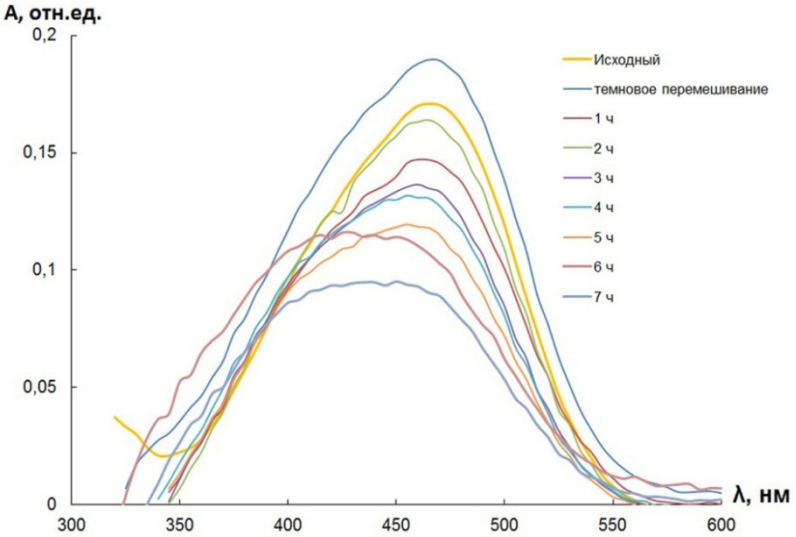


Рис. 1. Зависимости оптической плотности от длины волны A(λ) для анодированных образцов ППМ губчатого титана после отжига в вакууме.

Рентгенографически установлено, что после термообработки на воздухе и в вакууме на рентгенограммах анодированных образцов отмечается наряду с брэгговскими отражениями титана наличие дополнительных пиков: в первом случае – анатаза, рутила и TiO; во втором – анатаза, рутила и фаз TiO и Ti_2O_3 [5]. Таким образом, отжиг при выбранных условиях способствует образованию многофазной кристаллической структуры оксида. Оценка ФКА показала, что при облучении видимым светом раствора с анодированными образцами ППМ губчатого титана, термообработанными на воздухе, не было зарегистрировано уменьшение значения оптической плотности даже после семичасовой засветки. Тогда как для раствора с анодированными образцами ППМ губчатого титана, отожженными в вакууме (рис. 1), после 7 часов засветки наблюдается уменьшение оптической плотности раствора метилоранжа с 0.171 до 0.095 отн. ед., т.е. практически в два раза.

Полученный результат подтверждает предположение о том, что термообработка в вакууме в использованных условиях приводит к появлению фотокаталитической активности анодированных образцов при облучении светом с длиной волны, относящейся к видимому диапазону. Сделанный вывод также коррелирует с присутствием в фазовом составе отожженных в вакууме анодированных образцов нестехиометрических оксидов титана (Ti_2O_3, TiO), благодаря которым и проявляется ФКА в видимом диапазоне, по сравнению с такими кристаллическими фазами TiO_2 как анатаз и рутил [1, 6].

Расчет остаточной концентрации МО по формуле (1) в зависимости от времени засветки показал, что зависимость $C_x(t)$ (рис. 2а) для анодированных образцов, отожженных в вакууме, имеет ли-

нейный характер. Причем, после 7 часов засветки концентрация раствора МО уменьшилась с 5 мг/л до 2.8 мг/л. При расчете эффективности (формула (2) получили значение η ~ 44 % (рис. 2б) после семичасовой засветки в видимом диапазоне. Разброс в значениях эффективности с течением времени может быть объяснена химическими реакциями сорбции и десорбции на поверхности объектов исследования в процессе засветки.

Таким образом, в процессе оценки фотокаталитической активности термически модифицированных АОП, сформированных на поверхности ППМ из губчатого титана, впервые показано, что в результате вакуумного отжига анодированных образцов при T=820 ^{o}C в течение 30 мин наблюдается устойчивая тенденция к уменьшению исходной концентрации метилового оранжевого после облучения светом видимого диапазона. Полученные результаты подтверждают перспективность дальнейших исследований фотокаталитической активности АОП, полученных анодированием ППМ из губчатого титана во фторсодержащих электролитах.

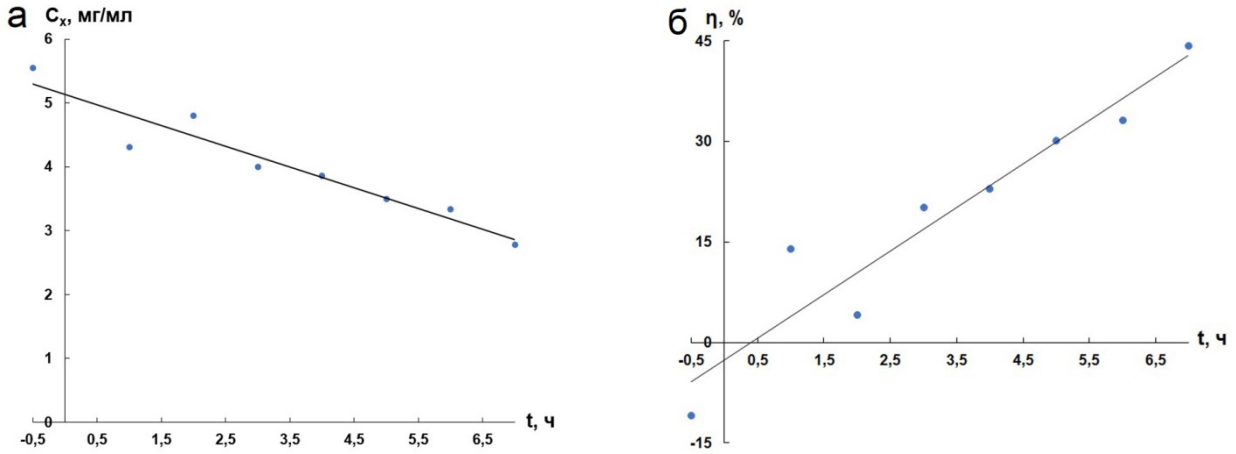


Рис. 2. Зависимости концентрации C_x (а) и эффективности η (б) от времени для анодированных образцов ППМ губчатого титана после отжига в вакууме.

1. Wang, Y., Ma X., Li H., Yin, S., Sato, T. Recent Advances in Visible-Light Driven Photocatalysis // Advanced Catalytic materials - Photocatalysis and Other Current Trends. – 2016. – V. 12. – P. 337–357.

2. Яковлева, Н.М., Кокатев, А.Н., Степанова, К.В., Яковлев, А.Н., Чупахина, Е.А.,. Шульга, А.М, Васильев, С.Г. Наноструктурирование поверхности металлов и сплавов. Часть 2. Наноструктурированные анодно-оксидные пленки на Ti и его сплавах // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2016. – Т. 18, № 1. – С. 6-27.

3. Кокатев, А.Н., Степанова, К.В., Яковлева, Н.М., Толстик, В.Е., Шелухина, А.И., Шульга, А.М. Самоорганизация биоактивного наноструктурированного оксидного слоя на поверхности спеченного порошка губчатого титана при электрохимическом анодировании // Журнал технической физики. – 2018. – Т. 88, № 9. – С. 1377-1383.

4. Программа обработки данных оптического спектрофотометра «autoSpectrofot»: свидетельство № 2016660997 от 27.09.2016 / Никитин Н.А., Яковлева Н.М., Кокатев А.Н., Степанова К.В. Заяв. №2016618509, 3.08.2016.

5. Степанова, К.В., Яковлева, Н.М., Кокатев, А.Н., Комлева, Д.М. Влияние отжига на структуру анодных оксидных пленок на спеченных порошках губчатого титана // XI Международная научная конференция «Современные методы в теоретической и экспериментальной электрохимии», г. Плес, Ивановская обл., 7-11 сентября 2020 г. Тезисы докладов. Иваново: Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 2020. С. 121.

6. Xiaodong, Y., Li, Y., Xia, T. Black Titanium Dioxide Nanomaterials in Photocatalysis // International Journal of Photoenergy. – 2017.– P.1-16.

УДК 535.34

СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ СИСТЕМЫ ПОЛИВИНИЛОВЫЙ СПИРТ – НИТРАТ ВИСМУТА В ОБЛАСТИ ВАКУУМНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТА

Л.А. Трофимова
Дальневосточный государственный медицинский университет (г. Хабаровск)
lianatrofimova@yandex.ru

Представлены результаты исследования системы поливиниловый спирт-нитрат висмута методом электронной спектроскопии в диапазоне 160-225 нм.

ABSORPTION SPECTRA OF THE POLY(VINYL ALCOHOL) – BISMUTH NITRATE SISTEM IN THE VACUUM ULTRAVIOLET

L.A. Trofimova
Far Eastern State Medical University (Khabarovsk)
lianatrofimova@yandex.ru

The results of study of the poly(vinyl alcohol)-bismuth nitrate system by electronic spectroscopy in the 160-225nm range are presented.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.85-86

Висмут и его соединения обладают уникальными свойствами, которые уже обусловливают их широкое применение в самых различных областях: металлургии, ядерной технике, химической и фармацевтической промышленности, оптоэлектронике и др. Однако исследование структур и систем, в которые входит этот металл и его соединения, продолжается. Это относится и к их оптическим свойствам [1, 2].

Предметом изучения в данной работе служили электронные спектры поглощения системы поливиниловый спирт (ПВС) – нитрат висмута. Нитрат висмута $Bi(NO_3)_3 \cdot 5H_2O$ представляет собой бесцветные гигроскопичные кристаллы.

В качестве объектов исследования были взяты пленки толщиной 1,8-2 мкм, изготовленные из 1 %-ного водного раствора поливинилового спирта марки 16/1, в который был добавлен нитрат висмута из расчета 50 мг на 10 мл раствора. Количество соли и толщина пленок выбирались таким образом, чтобы ослабление излучения, прошедшего сквозь образец, максимально осуществлялось за счет поглощения.

Эксперимент проводился на установке для абсорбционных исследований, позволяющей осуществлять их в области вакуумного ультрафиолета. Источником излучения служила водородная лампа проточного типа. Измерение спектров поглощения пленок поливинилового спирта с добавкой нитрата висмута проводилось относительно пленок ПВС без добавок, чтобы исключить изменения, которые происходят в самой полимерной матрице в результате различных воздействия на образцы.

Спектр поглощения системы, находящейся в исходном состоянии, в рассматриваемом диапазоне длин волн представляет собой кривую, состоящую из четырех широких областей с максимумами 177 нм, 188 нм, 200 нм и 218 нм. Форма и ширина областей указывает на сложную структуру, то есть на наличие в каждой из них не менее двух полос поглощения.

Выдерживание пленок в вакууме в течение 10 суток привело к уменьшению оптической плотности в диапазоне от 166 до 206 нм и небольшому увеличению в диапазоне от 206 до 216 нм. По всей видимости, процесс высушивания сопровождался изменением количества центров, отвечающих за поглощение в каждой из полос, что привело к перераспределению их интенсивностей и выделению в спектре в явном виде. Стало понятно, что первая область состоит из полос с максимумами 166 нм, 172 нм, 178 нм, 182 нм, вторая – из полос с максимумами 187 нм и 192 нм, третья – 198 нм, 205 нм и 208 нм. Разностный график позволил увидеть, что наибольшее уменьшение оптической плотности произошло в полосе с максимумом 178 нм, а вот интенсивность самой коротковолновой полосы не изменилась.

Известно [3], что в нитратных растворах образование комплексов между ионами висмута и NO_3-ионами протекает с удалением молекул воды из внутренней сферы ионов металла и образованием внутрисферных комплексов с нитрат-ионами. На основании этого можно предположить, что все центры, отвечающие за поглощение в диапазоне длин волн от 166 до 206 нм, в своем составе имели то или иное количество воды, которая покидает их в процессе высыхания, что приводит к увеличению «маловодных» или «безводных» структур, ответственных за поглощение в длинноволновой области исследуемого диапазона. Полоса с максимумом 166 нм, возможно, принадлежит нитрат-ионам.

Ультрафиолетовое облучение образцов в течение 30 минут интегральным спектром водородной лампы не привело к каким-либо ярким эффектам. В качестве изменений в спектре поглощения можно лишь указать на небольшое уменьшение оптической плотности в полосе с максимумом 166 нм.

Прогрев в течение 20 минут при температуре 343 К вызвал небольшое уменьшение оптической плотности по всему рассматриваемому диапазону длин волн. Значение температуры прогрева выбиралось с учетом того, что при 348,5 К нитрат висмута плавится в кристаллизационной воде с образованием основного нитрата [3].

Хранение пленок в темноте в эксикаторе в течение 2 лет по-разному сказалось на спектрах образцов, которые не подвергались различным воздействиям, и образцов, облученных ультрафиолетовым светом и прогретых. В первом случае спектр стал представлять собой очень широкую неэлементарную полосу с максимумом 215 нм, что указывает на наличие большого количества центров, отвечающих именно за длинноволновое поглощение в исследуемом диапазоне длин волн. Во втором случае наибольшее поглощение приходится на полосу с максимумом 192 нм.

Таким образом, проведенные исследования позволяют предположить о наличии в системе поливиниловый спирт-нитрат висмута нескольких поглощающих центров, имеющих разное строение. Данная система обладает малой светочувствительностью. При этом процессы, запущенные УФО и прогревом, продолжаются некоторое время, что фиксируется изменением формы кривой поглощения.

1. Штарёв, Д.С., Макаревич, К.С., Сюй, А.В. Светочувствительность хлоридных комплексов висмута в композиции поливиниловый спирт-оксид цинка-хлорид висмута // Сборник трудов Международной конференции и семинаров «Фундаментальные проблемы оптики – 2010», С.-Петербург. – 2010. – Т.1. – С.146-149.

2. Кожемяко, Н.В., Пячин, С.А., Бондарева, Т.В., Егоршин, И.Н. Влияние облучения плазмой высокочастотного разряда на оптические свойства оксида висмута // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы XVIII региональной научной конференции. – 2020. – С.33–34.

3. Юхин, Ю.М. Химия висмутовых соединений и материалов. / Ю.М Юхин, Ю.И. Михайлов. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001. – 360 с.

УДК 535.34

ОТЖИГ ДЕФЕКТОВ В ПОЛЫХ ЧАСТИЦАХ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ, ИНДУЦИРОВАННЫХ ОБЛУЧЕНИЕМ ЭЛЕКТРОНАМИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ

В.Ю. Юрина[1], В.В. Нещименко[1], М.М.Михайлов[2]
[1]Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
[2]Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники (г.Томск)
viktoriay-09@mail.ru

Представлен анализ разностных спектров отражения объемных микрочастиц и наночастиц, а также полых микросфер диоксида кремния после облучения электронами с энергией 30 кэВ флюенсом $7{\cdot}10^{16}$ см$^{-2}$ измеряемые на месте в вакууме и на воздухе. Установлено, что наименьшей площадью полос дефектов обладают полые микросферы, что обусловлено их высокой радиационной стойкостью по сравнению с объемными микро- и наночастицами диоксида кремния.

ANNEALING OF DEFECTS IN HOLLOW SILICON DIOXIDE PARTICLES INDUCED BY IRRADIATION WITH LOW ENERGY ELECTRONS

V.I. Iurina[1], V.V. Neshchimenko[1], M.M. Mikhailov[2]
[1]Amur State University (Blagoveshchensk)
[2]Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics
viktoriay-09@mail.ru

An analysis of the difference reflection spectra of bulk microparticles and nanoparticles, as well as hollow microspheres of silicon dioxide after irradiation with electrons with an energy of 30 keV with a fluence of $7{\cdot}10^{16}$ cm^{-2}, measured in situ in vacuum and in air, is presented. It was found that hollow microspheres have the smallest area of defect bands, which is due to their high radiation resistance compared to bulk micro- and nanoparticles of silicon dioxide.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.87-89

В настоящие время существует большое количество работ, посвященных разработке и изучению свойств новых пигментов и покрытий на основе диоксида кремния, которые применяются в медицине, атомной энергетике, добывающей отрасли, а также других областях науки и техники. Функциональное назначение таких материалов определяется составом, структурой, размером и морфологией поверхности составляющих материал частиц. В данной работе представлен анализ разностных спектров отражения полых микросфер диоксида кремния после облучения электронами с энергией 30 кэВ с флюенсом $7{\cdot}10^{16}$ см$^{-2}$, измеряемых на месте в вакууме (*in situ*) и на воздухе, в сравнении с результатами полученными для объемных микро- и наночастиц диоксида кремния.

Объектом исследования являлись микро- и наночастицы SiO_2 высокой чистоты 99,99%, купленные в компании Aladdin Chemistry и полые микросферы SiO_2 синтезирование шаблонным методом, в качестве шаблона использовали полистирольные шарики (ПС) [1]. Средний размер микрочастиц SiO_2 составил 3000–10000 нм, с удельной площадью поверхности 7,3±1,8 м^2/г. Средний размер наночастиц SiO_2 составил 20–40 нм, с удельной площадью поверхности 244,2±20,1 м^2/г. Для полых микросфер SiO_2 средний размер частиц составил 1000–3000 нм с удельной площадью поверхности 36,3±5,9 м^2/г.

Спектры диффузного отражения (ρ_λ) регистрировали в области 200–2500 нм с помощью спектрофотометра Perkin Elmer Lambda 950, диаметр интегрирующей сферы составлял 150 мм с шагом 5 нм/с. Облучение образцов осуществлялось на имитаторе факторов космического пространства «СПЕКТР-1» электронами с энергией 30 кэВ, флюенсом $7\cdot10^{16}$ см$^{-2}$ при плотности потока $4\cdot10^{12}$ см$^{-2}$с$^{-1}$, первоначальный вакуум составлял $5\cdot10^{-5}$ Па, температура образцов при облучении составляла 25°С.

Разностные спектры отражения микрочастиц, наночастиц и полых микросфер SiO_2 после облучения электронами с энергией 30 кэВ с флюенсом $7\cdot10^{16}$ см$^{-2}$ (рис.1.) измеряемые на месте в вакууме с выдержкой 16 часов (рис.1. А, В, Д) и измеряемые на воздухе с выдержкой 24 часа (рис.1. Б, Г, Е) были разложены на 14 элементарных полос вблизи значений энергии фотона, эВ: 5,96, 5,46, 5,05, 4,58, 4,19, 3,84, 3,46, 2,94, 2,35, 1,70, 0,95, 0,86, 0,64, 0,55.

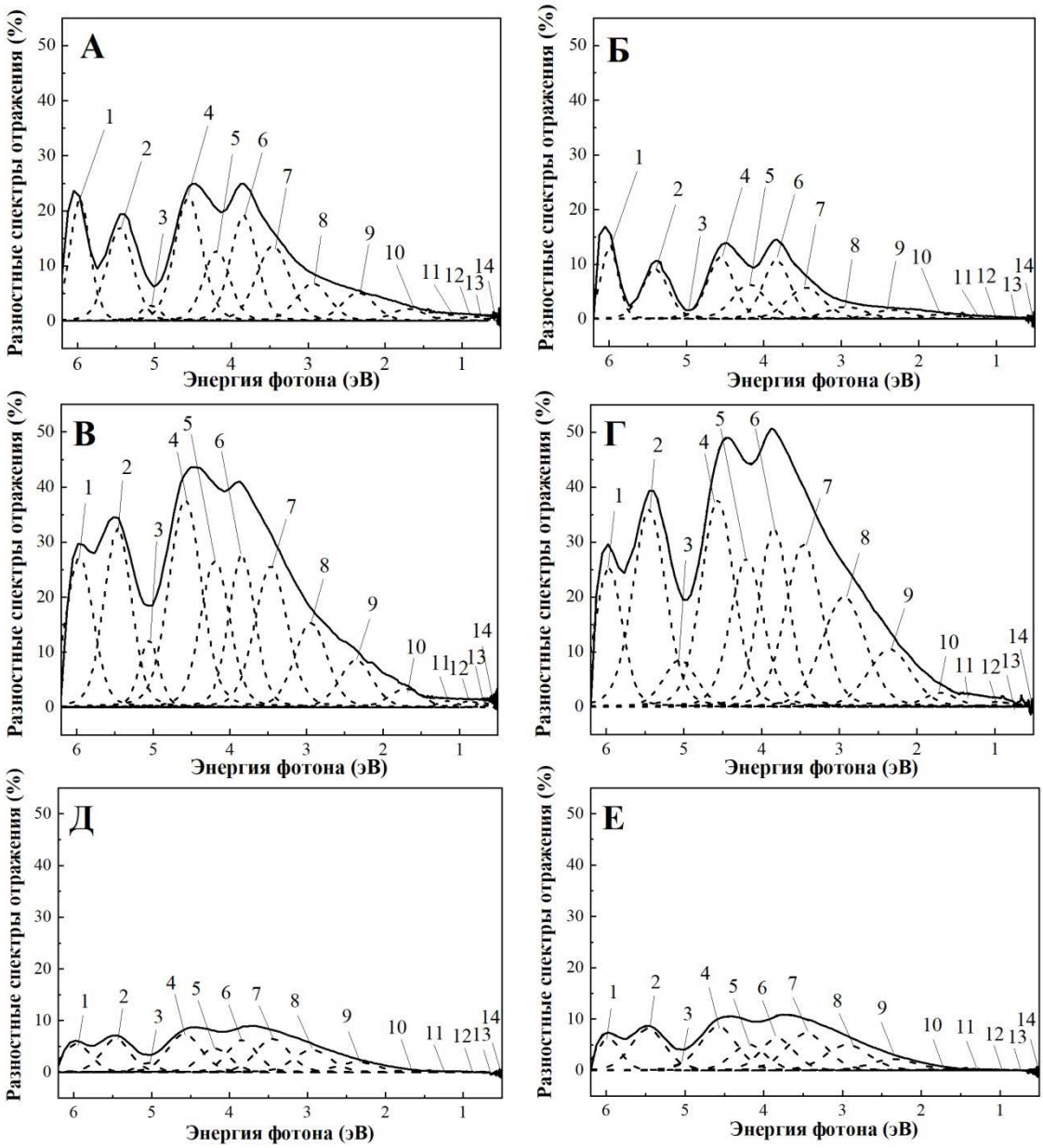


Рис. 1. Разностные спектры диффузного отражения микро- (А, Б), нано- (В, Г), полых (Д, Е) частиц SiO_2 после облучения электронами с энергией 30 кэВ с флюенсом $7\cdot10^{16}$ см$^{-2}$, измеряемые в остаточном вакууме с выдержкой 16 часов (А, В, Д) и на воздухе с выдержкой 24 часа (Б, Г, Е). Разложение спектров на элементарные полосы, эВ: 1 – 5,96 (≡Si•), 2 – 5,46 (≡Si−O−O•), 3 – 5,05 (≡Si−O•), 4 – 4,58 (≡Si•), 5 – 4,19 (≡Si−O−O•), 6 – 3,84 (≡Si−O−O−Si≡), 7 – 3,46 (≡Si−V_O^+−Si≡), 8 – 2,94 (≡Si−O)$_2$Si(O)$_2$), 9 – 2,35 (≡Si−O), 10 – 1,70 (O_{int}), 11 – 0,95 (не опознан), 12 – 0,86 (OH-), 13 – 0,64 (OH-), 14 – 0,55 (OH-) [2-7].

Из полученных результатов следует, что спектры, измеренные на месте в вакууме и спектры после выдержки в атмосфере имеют различную интенсивность. В разностных спектрах диффузного отражения микрочастиц, регистрируемых в атмосфере (рис. 1. Б), наблюдается сокращение полос поглощения во всей области спектра, примерно на 45 %, по сравнению со спектрами, регистрируемыми непосредственно в вакууме (рис. 1. А). Для наночастиц диоксида кремния наблюдается обратная картина, после выноса в атмосферу, спектры наведенного поглощения вырос в области от 2 до 4,5 эВ, однако площади полос дефектов под номерами 4, 5, 6, 7, 8, 9 остались неизменными. Наночастицы диоксида кремния имеют наибольшие значения площадей полос дефектов по сравнению с микрочастицами и полыми микросферами. Полые микросферы имеют самые низкие значения площадей полос дефектов. Так по сравнению с наибольшим значением 4-й полосы дефекта для микрочастиц и наночастиц в вакууме, значение этой полосы полых микросфер меньше на 63 % и 79 %, соответственно. Такое низкое значение площадей полос дефектов для полых микросфер говорит об их высокой радиационной стойкости, по сравнению с микро и наночастицами диоксида кремния. Сокращение полос в разностных спектрах диффузного отражения, регистрируемых в атмосфере, свидетельствует о восстановлении дефектов – происходит отжиг дефектов.

---

1. Юрина, Ю.В., Нещименко, В.В. Отражательная способность покрытий на основе диоксида кремния // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы XVIII региональной научной конференции, Хабаровск, 10–12 ноября, 2020 г. / под ред. А. И. Мазура и К. А. Драчева. – Хабаровск : Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, 2020. – 2020. – С.158-159.

2. Zatsepina A.F., Kortova V.S., Biryukova D.Y. Electron-emission activity of defects in surface layers of crystalline and vitreous silica // Radiation Effects and Defects in Solids. – 2002. – V.157. – P.595-601.

3. Boscaino R., Cannas M., Gelardi F.M., Leone M. ESR and PL centers induced by gamma rays in silica // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – V.116. – P.373-377.

4. Skuja L. Optical active oxygen-deficiency-related centers in amorphous silicon dioxide // Journal of Non-Crystalline Solids. – 1998. – V.239. – P.16-48.

5. Vaccaro L., Morana A., Radzig V., Cannas M. Bright Visible Luminescence in Silica Nanoparticles // J. Phys. Chem. C. – 2011. – V.115. – P.19476-19481.

6. Nishikawa H., Watanade E., Ito D., Ohki Y. Kinetics of enhanced photogeneration of E centers in oxygen-deficient silica // J. of Non-cryst. Solids. – 1994. – V.179. – P.179-184.

7. Pantelides S.T., Lu Z.-Y., Nicklaw C., Bakos T., Rashkeev S.N., Fleetwood D.M., Schrimpf R.D. The E’ center and oxygen vacancies in SiO_2 // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2008. – V. 354. – P. 217-223.

Секция 3
Материаловедение

УДК 538.97

МИНЕРАЛЬНЫЕ СРЕДЫ С УЛЬТРАДИСПЕРСНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ЗОЛОТА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Г.Г. Капустина[1], Д.М.Смотрова[1], Н.Н.Леоненко[2]
[1]Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
[2]Институт горного дела ДВО РАН (г. Хабаровск)
g.kapustina@mail.ru

В работе исследованы природные минеральные образцы россыпного месторождения, содержащие в виде примесей частицы ультрадисперсного золота. Облучение образцов проводилось иттербиевым волоконным лазером ЛС-06 при мощности выходного излучения, равной 90 – 120 Вт. Полученный объект, был исследован методом растровой электронной микроскопии.

MINERAL MEDIA WITH ULTRA-DISPERSION GOLD UNDER THE ACTION OF LASER RADIATION

G.G. Kapustina[1], D.M.Smotrova[1], N.N. Leonenko[2]
[1]Pacific State University (Khabarovsk)
[2]Institute of Mining, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)
g.kapustina@mail.ru

In this work, natural mineral samples of a placer deposit, containing particles of ultradispersed gold in the form of impurities, have been investigated. The samples were irradiated with an LS-06 ytterbium fiber laser at an output power of 90 - 120 W. The resulting object was examined by scanning electron microscopy.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.90-92

При поиске новых способов комплексного извлечения ценных компонентов из минерального сырья в горной промышленности, в связи с существующими трудностями применения для этих целей гравитационных технологий появляется необходимость исследования поведения минеральных сред при высококонцентрированном энергетическом воздействии. Исследование твердофазных термохимичеких быстропротекающих реакций и выявление фазовых переходов в них представляют определенный научный интерес и могут привести к созданию, как новых технологических решений, так и наноструктурированных материалов.

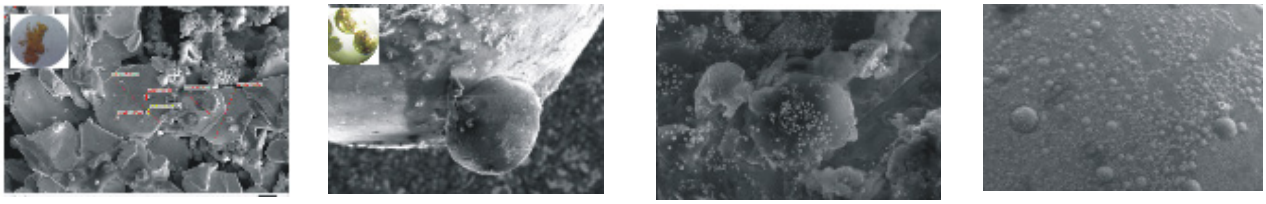
Золото, имеющее размеры частиц менее 20 мкм и пластинчатую или игольчатую форму, извлечь традиционными методами обогащения практически невозможно [1, 2]. Поэтому в последнее время для дезинтеграции упорного золотосодержащего сырья исследуются способы, основанные на нетрадиционных энергетических воздействиях. В экспериментальной работе в качестве высококон-

центрированного энергетического источника применялось лазерное излучение. Лазерное излучение может обеспечить скорость локальных изменений температуры в веществе до 10^{10} К·с$^{-1}$ и градиенты температуры в веществе до 10^{7} К· см$^{-1}$, что приводит к сильному взаимодействию тепловых, концентрационных зарядовых и иных потоков. Достижение подобных параметров не возможно при других способах воздействия.

В данной работе изучены результаты экспериментов по воздействию лазерного излучения на минеральные ассоциации, содержащие ультрадисперсное золото. Как выявило изучение результатов лазерного воздействия на золотосодержащие минеральные лассоциации, проведенное по данным микроанализа, происходит образование обожженных сфероподобных агломератов из глинистых, алюмосиликатных частиц диаметром от 500 до 1500 мкм. Одновременно с этим регистрируется осаждение на них частиц расплавленного золота также приблизительно сферической формы с размером от 100 до 500 мкм. При этом исходная золотосодержащая минеральная смесь представляет собой частицы с размерами, изменяемыми от менее 1 мкм и до 200 мкм.

Были сделаны выводы, что процесс лазерной агломерации может быть представлен следующим сценарием. На начальной стадии при лазерной обработке температура увеличивается до 600-900 °С, происходит оплавление минеральных продуктов с низкой температурой плавления. В этот момент идет процесс формообразования поверхностей материалов с минимальной энергией, то есть сферических поверхностей. Размеры формируемых сфер, определяемые величиной коэффициента поверхностного натяжения, достаточно большие вплоть до 1.5-2 мм.

На второй стадии начинается процесс плавления и агломерации наномасштабных частиц золота. По достижении температуры 1100-1200 °С ультрадисперсные частицы золота, вплоть до достижения температуры плавления выступают в качестве поверхностно-активного вещества по отношению к уже расплавившейся массе сопутствующих минеральных продуктов. Частицы ультрадисперсного золота, подобно броуновским частицам, совершают неупорядоченные движения по поверхности уже возникшей сферы из легкоплавких включений (алюмосиликатной или подобных фаз) вплоть до момента их оплавления (при температуре порядка 1000 °С). Малость размеров частиц золота (наномасштабные размеры) существенно понижает порог температуры плавления. После расплавления этих частиц золота за счет эффекта смачивания происходит агломерация этих мицелоподобных расплавленных наномасштабных частиц золота. С увеличением времени лазерного воздействия наномасштабные частицы золота со сферообразной формой укрупняются, скорость их движения снижается. На последней стадии агломерации движение частиц прекращается, происходит только их укрупнение, что отчетливо видно на рис. 1Такое формообразование в процессе оплавления объясняется действием сил поверхностного натяжения, что и вызывает образование поверхностей из золота, отличающихся минимальной энергией – сферических поверхностей, и их рост до 10 мкм и более [3].



а – ув. 4000 *б* – ув. 790 *в* – ув. 8000 *г* – ув. 8000

Рис. 1. Электронные изображения модельного образца химически восстановленного золота до (*а*) и после лазерной обработки (*б, в, г*).

Золотосодержащие частицы в исходных образцах присутствуют в тонкодисперсной и ультрадисперсной формах (шлихи, коллоидно-ионное золото). Размеры частиц варьируются от 1 до 50 мкм. Рентгеноспектральный анализ показал что наиболее значительная весовая доля з содержания золота

(67-73 %) приходится на гексагональную амальгамированную форму. Весовая доля содержания золота в коллоидно-ионной форме составляет всего порядка 2% (рис. 2, 3).

В обработанных образцах золото содержалось в виде сфероподобных образований без примесей на поверхности спека, размером до 100 мкм.

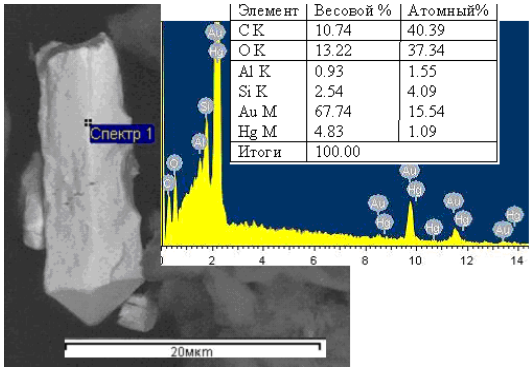


Рис. 2. Электронная фотография и результаты ее рентгеноспектрального анализа гексагональной амальгамированной золотинки.

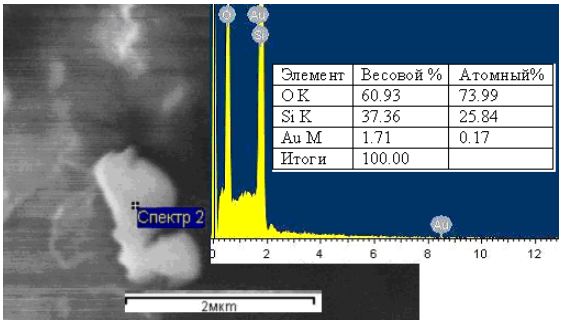


Рис. 3. Электронная фотография и результаты ее рентгеноспектрального анализа создавали золота в коллоидно-ионной форме.

Наблюдаемые изменения формы, структуры и гранулометрического состава минеральных золотосодержащих ассоциаций после лазерной обработки создают условия для выделения из них золота обычными гравитационными методами. Это свидетельствует в пользу практической значимости способа. На этой основе может быть предложен достаточно эффективный и экологически безопасный способ укрупнения частиц благородных металлов, не извлекаемых традиционными методами, основанный на их лазерной обработке [4].

---

1. Галустян, Л.А. Технология извлечения коллоидного золота из производственных и сточных вод золотоизвлекательных фабрик // Горный журнал. – 2003. – № 2. – С. 61-62.

2. Моисеенко, В.Г. Нетрадиционный подход к отработке техногенных золотосодержащих россыпей / В.Г Моисеенко, Н.С. Остапенко, А.Ф. Миронюк // Горный журнал. – 2006. – № 4. – С. 66-68.

3. Леоненко, Н.А. Извлечение ультрадисперсных благородных металлов из минеральных сред при импульсном лазерном воздействии / Н.А. Леоненко, А.П. Кузьменко, Н.А. Кузьменко // Горный информационно-аналитический бюллетень. Отдельный выпуск. Дальний Восток. – 2007. - № 9. – 584 с.

4. Пат. 2413779 Российская Федерация, МПК C 22 B 11/02, B 22 F 1/00. Способ извлечения дисперсного золота из золотосодержащего высокоглинистого минерального сырья / Леоненко Н.А., Кузьменко А.П., Силютин И.В., Рассказов И.Ю., Секисов Г.В., Гурман М.А., Капустина Г.Г., Швец Н.Л.; заявитель и патентообладатель Институт горного дела ДВО РАН, Тихоокеанский государственный университет. № 2010113683/02; заявл. 07.04.10; опубл. 10.03.11. Бюл. № 7.

УДК 621.762; 537.523.4

АРМИРОВАНИЕ ПОКРЫТИЙ ИЗ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА ЧАСТИЦАМИ α-WC

А.А. Бурков, М.А. Кулик
Институт материаловедения Хабаровского научного центра Дальневосточного отделения Российской академии наук (г. Хабаровск)
marijka80@mail.ru

Представлены результаты электроискровой обработки стали 45 анодом из железных гранул, с добавлением порошков CrMoWCBSi и WC. С ростом концентрации WC в анодной смеси до 1.2 об. % наблюдалось повышение содержания фазы WC в составе покрытий. Интенсивность изнашивания покрытий с карбидом вольфрама находилась в диапазоне 0.5 – 1.1 ×10^{-5} мм^3/Нм, что ниже, чем у образца без WC (1.8 × 10^{-5} мм^3/Нм).

REINFORCEMENT OF METALLIC GLASS COATINGS WITH α-WC PARTICLES

A.A. Burkov, M. A. Kulik
Institute of Materials Science, Khabarovsk Scientific Centre (Khabarovsk)
marijka80@mail.ru

The results of electric spark processing steel 45 in iron granules with the addition of CrMoWCBSi and WC powders, are presented. With an increase in the concentration of WC in the anode mixture to 1.2 vol. % there was an increase in the content of the WC phase in the coating composition. The wear rate of the coatings with tungsten carbide were in the range of 0.5-1.1 ×10^{-5} mm^3/Nm, which is lower than that of the sample without WC (1.8 × 10^{-5} mm^3/Nm).

DOI: 10.2250/PFARE.2021.93-96

Композиты с металлической матрицей широко используются в механических деталях, подверженных абразивному воздействию [1]. Армирующей фазой может выступать карбид вольфрама, а в качестве материала матрицы обычно используют сплавы на основе железа, никеля и кобальта [2]. Метод электроискрового легирования (ЭИЛ) [3] позволяет локально упрочнить, защитить от коррозии, восстановить и отремонтировать поверхность металлических деталей, чтобы продлить срок их службы или использовать повторно [4]. В наших предыдущих работах была показана возможность одностадийного формирования аморфных покрытий технологией ЭИЛ в среде гранул, состоящих из разных компонентов [5], и внесением аморфизирующегося порошка [6]. В данной работе исследовались структура и триботехнические свойства покрытий, приготовленных электроискровой обработкой стали 45 в смеси железных гранул и аморфизирующегося порошка с добавлением частиц WC.

Покрытия осаждались на подложку из стали 45, в форме цилиндра диаметром 12 мм и высотой 10 мм. В качестве анодного материала использовались четыре смеси из гранул стали Ст.3, аморфизирующегося многокомпонентного порошка и карбида вольфрама в различных соотношениях (табл. 1). Гранулы изготавливались путем нарезания проволоки из стали Ст.3 диаметром 4 ± 0.5 мм на цилиндры длиной 4 ± 1 мм. Схема установки для ЭИЛ в среде гранул подробно описана в [6].

Фазовый состав и структура покрытий исследовались с применением рентгеновского дифрактометра ДРОН-7 в Cu-Kα излучении и растрового электронного микроскопа (СЭМ) Sigma 300 VP,

оснащенного микрорентгеноспектральным анализатором INCA Energy. Износостойкость покрытий исследовалась по стандарту ASTM G99-17 при сухом трении скольжения с применением контртела в виде диска из быстрорежущей стали Р6М5 на скорости 0.47 мс$^{-1}$ при нагрузке 25 Н. Износ образцов измеряли гравиметрическим способом с точностью 0.1 мг. Коэффициент трения был измерен в процессе испытания на износ с использованием бесконтактного динамического датчика момента вращения М 40-50.

Таблица 1

Концентрация карбида вольфрама в анодной смеси и обозначение покрытий

Наименование образцов	W0	W0.6	W1.2	W1.8
Концентрация WC, об.%	0	0.6	1.2	1.8
Концентрация многокомпонентной шихты, об. %	9	8.4	7.8	7.2

Рентгенофазовый анализ покрытий W0.6 – W1.8 показал присутствие острых Брегговских рефлексов карбида вольфрама, вольфрама и железа подложки (рис. 1).

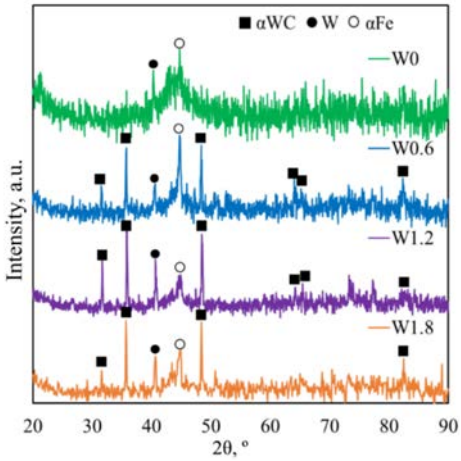


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы осажденных покрытий.

Концентрация карбида вольфрама в составе покрытий с ростом добавки порошка WC в анодной смеси увеличивалась немонотонно (табл. 2).

Таблица 2

Соотношение кристаллических фаз в покрытиях по результатам полуколичественного рентгенофазового анализа

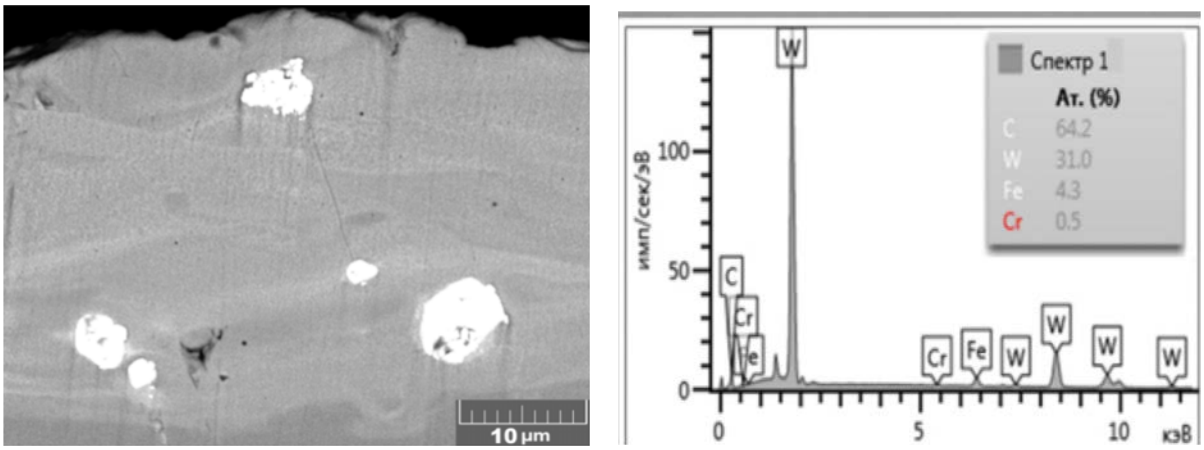
Образцы	Содержание фаз, об. %		
	Fe	WC	W
W0.6	45.8	39.55	14.6
W1.2	15.3	63.1	21.6
W1.8	26	48.8	25.2

Снижение концентрации карбида вольфрама в покрытии при увеличении добавки WC выше 1.2 об.% может объясняться ухудшением условий возникновения разрядов и снижением их количества из-за переизбытка порошка. Максимальная концентрация фазы WC в покрытии достигала 63 об. %, что практически недостижимо для ЭИЛ стали 45 стандартными электродами системы WC-Co по причине высокой активности расплавленного железа к обезуглероживанию карбида вольфрама [7]. В данном случае, сохранение фазы WC в покрытии объясняется присутствием графита в порошке МСП, который насыщает железо углеродом, снижая его активность к обезуглероживанию WC [8]. Тем не менее, часть карбида вольфрама подвергалась декарбидизации с образованием вольфрама, что можно описать уравнением реакции 1:

$$WC+3Fe=W+Fe_3C \quad (1)$$

В сечении покрытия W1.2 (рис. 2) наблюдались светлые включения со средним диаметром 1.8±0.9 мкм, которые представляют собой агломераты зерен карбида вольфрама. Удельный объем

этих включений значительно ниже, чем демонстрируют данные рентгенофазового анализа. Это объясняется, тем, что значительный объем покрытия занимает аморфная фаза. Концентрация железа в составе покрытия находилась на уровне 55 – 60 ат. %, тогда как содержание остальных элементов в среднем составляло от 3 до 4.5 ат.%.



а б

Рис. 2. СЭМ изображение покрытия W1,2 (а) и ЭДС спектр светлого включения (б),

Кинетика изменения коэффициента трения образцов при испытании на износ в режиме сухого скольжения показана на рис. 3.

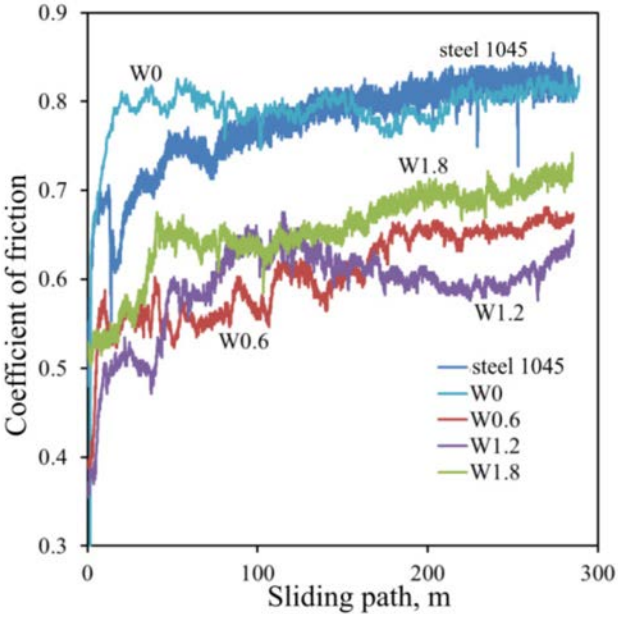


Рис. 3. Коэффициент трения покрытий по сравнению со сталью 45.

Средние значения коэффициента трения покрытий с WC находились в диапазоне от 0.6 до 0.67, что ниже, чем у полностью аморфного покрытия и стали 45 примерно на 30%. Наиболее низкие значения коэффициента трения наблюдались у образца W1.2. В случае стали без покрытия на кривых коэффициента трения наблюдался высокий уровень шума, который объясняется периодическим формированием и разрушением трибооксидного слоя [9].

Результаты испытания покрытий на износ в режиме сухого скольжения показали, что интенсивность изнашивания находилась в диапазоне 0.5 – 1.1 × 10^{-5} мм^3/Нм, что ниже, чем у стали 45 от 4 до 8 раз. Износ аморфного образца W0 был в 3.6 раз выше, чем у наиболее износостойкого образца W1.2. Таким образом, оптимальная величина добавки порошка WC в смеси гранул, при осаждении покрытий для триботехнических применений составляет 1.2 об.%.

Выводы

1. Добавление карбида вольфрама к смеси железных гранул с аморфизирующимся порошком при электроискровой обработке стали 45, приводит к получению покрытий из металлических стекол, армированных частицами α-WC. С ростом добавки WC от 0.6 до 1.2 об.% повышалась концентрация карбида вольфрама в покрытии.

2. Армирование аморфного покрытия карбидом вольфрама повышает его микротвердость с 743 до 1118 HV, снижает коэффициент трения до 30% и улучшает износостойкость в 3.6 раза. Лучшие триботехнические свойства продемонстрировало покрытие с добавкой 1.2 об.% карбида вольфрама.

1. Huang, S.W., Samandi, M., Brandt, M. Abrasive wear performance and microstructure of laser clad WC/Ni layers // Wear. – 2004. – Т. 256, № 11-12. – С. 1095-1105.

2. Vespa, P. et al. Analysis of WC/Ni-based coatings deposited by controlled short-circuit MIG welding // Journal of materials engineering and performance. – 2012. – Т. 21, № 6. – С. 865-876.

3. Hasanabadi, M. F. et al. Production of amorphous and nanocrystalline iron based coatings by electro-spark deposition process // Surface and Coatings Technology. – 2015. – Т. 270. – С. 95-101.

4. Wang, D. et al. Effect of TaC particles on the microstructure and oxidation behavior of NiCoCrAlYTa coating prepared by electrospark deposition on single crystal superalloy //Surface and Coatings Technology. – 2021. – Т. 408. – С. 126851.

5. Burkov, A.A. et al. In situ synthesis and characterization of Fe-based metallic glass coatings by electrospark deposition technique // Journal of Materials Engineering and Performance. – 2017. – Т. 26, № 2. – С. 901-908.

6. Бурков, А.А. Получение аморфных покрытий электроискровой обработкой стали 35 в смеси железных гранул с CrMoWCBSi порошком //Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты). – 2019. – Т. 21, № 4. – С. 19-30.

7. Burkov, A.A., Pyachin, S.A. Tungsten carbide decarburization by electrical discharges // Solid State Phenomena. – Trans Tech Publications Ltd. – 2014. – Т. 213. – С. 131-136.

8. Stott, F.H., Jordan, M.P. The effects of load and substrate hardness on the development and maintenance of wear-protective layers during sliding at elevated temperatures // Wear. – 2001. – Т. 250, № 1-12. – С. 391-400.

9. Wei, M. X. et al. Wear and friction characteristics of a selected stainless steel //Tribology Transactions. – 2011. – Т. 54, № 6. – С. 840-848.

УДК 548-1

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТОДОМ РАССЕЯНИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.В. Филимонов

Академический университет им. Ж.И. Алферова РАН (г. Санкт – Петербург)

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

filimonov@rphf.spbstu.ru

Приведены основные физические принципы проведения структурных исследований материалов методами рассеяния синхротронного излучения. Рассмотрены основные структурные механизмы, определяющие физические свойства ряда материалов, а также базовых физических принципов новых методов структурного эксперимента в электрическом поле и новых подходов к анализу больших объемов экспериментальной информации.

STRUCTURAL STUDIES BY SYNCHROTRON RADIANION SCATTERING

A.V. Filimonov

Alferov University (St. Petersburg)

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

filimonov@rphf.spbstu.ru

The physical principles of structural studies of materials by methods of synchrotron radiation scattering are presented. The main focus is on the basic structural mechanisms that determine physical properties of a number of materials, as well as basic physical principles of new methods of structural experiments in the electric field and new approaches to the analysis of large volumes of experimental information are considered.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.96-100

Введение

Согласно определению, синхротроны представляют собой круговые ускорители, в которых заряженные частицы ускоряются под действием электрических полей и вынуждены двигаться по определяемым магнитами орбитам, при этом их магнитные поля изменяются во времени так, что с ростом энергии частиц радиус кривизны пучка остается постоянным. Генерируемое синхротроном электромагнитное излучение (СИ) перекрывает область энергий от мэВ до МэВ (от вакуумного ультрафиолета до жесткого рентгеновского излучения), что открывает большие возможности его применения. В целях одновременного получения СИ в различных частях спектра источники синхротронного излучения могут включать в себя два кольца. Основными отличительными особенностями СИ, определяющими его уникальную роль в исследовании структуры и динамики вещества одновременно на многих иерархических уровнях, является высокая интенсивность излучения, возможность изменения длины волны, очень малая расходимость пучка (порядка десятков микрорадиан), контроль поляризации СИ и возможность получения когерентного излучения [1].

Применение синхротронного излучения

Определение характеристик широкого круга образцов, требующее в общем случае использования как сложных методик, так и специфического набора инструментов, упрощается при реализации техник, основанных на применении синхротронного излучения. Методы исследования объекта синхротронным излучением можно условно разделить на три основных направления: дифракция (в том числе рассеяние), спектроскопия и визуализация (к примеру, рентгенография).

Дифракция и рассеяние рентгеновских лучей. Наиболее известным дифракционным методом является дифракция рентгеновского излучения. Он основан на последовательном отражении лучей рентгеновского излучения по мере его прохождения вглубь кристалла от регулярно расположенных атомных плоскостей, образующих кристалл. Далее отраженные лучи фиксируются детектором и формируется дифракционная картина, которая, в свою очередь, может быть использована для определения атомной структуры вещества. Дифракционные методы позволяют получить ответ на вопрос о структуре композитных материалов или химических соединений. Метод успешно применяется для исследования материалов с упорядоченной внутренней структурой, а именно керамик, минералов, электронных и магнитных материалов, а также биологических образцов. В средах, не обладающих дальним параметром порядка, что характерно для биологических объектов и сложных материалов (коллоиды и полимеры), информацию о внутренней структуре и динамике можно получить методом рассеяния рентгеновского излучения.

Спектроскопия. Еще одна уникальная техника из набора методов синхротронного излучения – это спектроскопия. Она позволяет выявлять целый ряд свойств как неорганических, так и органических систем, начиная с элементарного состава и химического строения и заканчивая физическими свойствами исследуемого материала. Варьируя энергию пучка исходящих фотонов, можно получить данные о поглощающих, отражающих и флюоресцирующих свойствах образца. В рентгеновской области спектра все атомы демонстрируют резкое увеличение поглощения излучения на определенных,

характерных для них длинах волн (так называемых краях полосы поглощения). Используя это свойство, можно, пропуская через образец заранее известное рентгеновское излучение и регистрируя его спектр после прохождения образца, получить информацию об элементном составе образца по отсутствию ряда длин волн в окончательной спектральной картине. В инфракрасном диапазоне длин волн излучение возбуждает соответствующие по энергии колебательные моды в твердых телах или биологических образцах. Таким образом удается получить молекулярную структуру объекта. Используя микроскоп, можно создать двухмерное изображение структуры. В спектроскопии помимо рентгеновских и инфракрасных лучей для выявления ряда свойств образцов из широкого спектра биомедицинских, инженерных, магнитных материалов и твердых тел применяют видимый и ультрафиолетовый свет.

Визуализация и микроскопия. Синхротронное излучение широко применяется для визуализации, то есть для записи набора изображений исследуемого объекта. Изображения, полученные с помощью синхротронного излучения, ввиду уникальной природы света, генерируемого синхротронами, значительно отличаются от фиксируемых человеческим глазом или фотокамерой. К примеру, контрастно-абсорбционная визуализация используется так же, как и рентгеновские аппараты в больницах. В последнем случае при облучении тела человека рентгеновские лучи легче проходят через материалы более высокой плотности (например, кости), чем через окружающие ткани. Из-за неоднородности плотности формируется рентгеновский снимок, по которому можно судить о распределении плотности в исследуемой области. Аналогично используют контрастно-абсорбционную визуализацию. Рентгеновские лучи попадают на образец, а детектор, расположенный за образцом, измеряет остаточное рентгеновское излучение. Таким образом опять получают рентгеновский снимок, отличающийся тем, что излучение в 100 миллиардов раз сильнее, чем у стандартного рентгеновского аппарата для больниц, а на снимке отражается намного больше деталей. Метод контрастно-абсорбционной визуализации находит применение в самых различных областях – в материаловедении, технологии, биомедицине, археологии и экологии. Для выбора частоты синхротронного излучения при получении изображений в различных спектрах используют широкие возможности микроскопии. Таким образом можно оперировать диапазоном частот синхротронного излучения, которые будут взаимодействовать с каждым элементом в образце согласно его частоте поглощения. Результат сканирования образца с помощью микроскопии – одновременная информация как о визуализации структуры поверхности в нанометровом масштабе, так и об элементном составе. Это позволяет исследователю иметь более полное представление о связи особенностей отдельных участков образца с их строением. Микроскопия может быть применена для изучения строения нано– и микрообъектов.

Томография. Это расширение стандартных двухмерных рентгеновских техник в трехмерное пространство. Томограмму получают из множества двухмерных изображений образца, взятых при нескольких различных ориентациях. Такая технология аналогична компьютерной томографии, используемой в больницах: тело пациента сканируют при разных углах для создания трехмерного изображения. Если параллельно со сканированием собирать данные о «показателе преломления» образца (насколько рентгеновские лучи отклоняются при прохождении через объект), то томография может быть использована для построения внутренней структуры объекта. Иными словами, томография дает возможность рассмотреть различные срезы образца, не разрезая его физически. Такая не разрушающая материал природа метода позволяет широко применять его в биомедицине, материаловедении и инженерии.

К примеру, томография способна определять внутренние напряжения и трещины внутри деталей, в частности внутри крыльев самолета. Кроме того, рентгеновскую томографию наряду с медицинской компьютерной томографией используют для определения внутренней структуры биологических тканей.

Применение синхротрона в физическом материаловедении

С конца XX века все большее внимание привлекают частично разупорядоченные материалы. Именно к этой группе относятся высокотемпературные сверхпроводники, соединения с колоссальным магнетосопротивлением, сегнетоэлектрики. Перспектива создания новых мультиферроиков также связана с соединениями, в которых наблюдается фазовое и зарядовое расслоение, приводящее к возникновению структурной неоднородности на мезоскопических масштабах. Нанонеоднородные материалы могут применяться в различных областях науки и техники. В частности, в настоящее время почти все пьезо– и сегнетокерамики изготавливаются из смешанных перовскитоподобных материалов, в которых наблюдаются два типа мезоскопического ближнего порядка: композиционный, связанный с самоорганизованным химическим упорядочением, и структурный, связанный с ионными смещениями и возникающий, например, при фазовых переходах в таких материалах. Последний может проявляться в формировании полярных нанообластей и нанодоменов. Подобный мезоскопический ближний порядок существует в материалах с колоссальным магнетосопротивлением и в мультиферроиках сложного состава. На сегодняшний день микроскопический механизм процессов, происходящих в указанных системах, далеко не полностью изучен. Существующие пробелы, затрудняющие понимание физических свойств нанонеоднородных материалов, связаны с отсутствием систематической информации об их структуре, в том числе о композиционном (включая зарядовое) упорядочении, о пространственном распределении параметра порядка (поляризации, деформации, намагниченности), о влиянии внешних условий (температура, внешнее поле) на эти характеристики. В связи с особенностями физико-химических свойств наноструктурированных материалов очевидно, что классические методы диагностики твердого тела, в частности поверхностно-чувствительные, обладают принципиальными ограничениями диагностируемой области. Одним из направлений исследования наноструктурированных материалов является переход от эмиссионных методов к методам рассеяния [1,2].

Особенности структурных экспериментов с использованием синхротронного излучения

Появление новых ярких источников рентгеновского излучения – синхротронов и лазеров на свободных электронах – вместе с разработкой быстрых и эффективных двухмерных детекторов открыло новые возможности экспериментов, основанных на рассеянии проникающего излучения. В настоящее время различные спектроскопические методы, томография, когерентное рассеяние, а также традиционные техники монокристальной и порошковой дифракции, малоуглового рассеяния и рассеяния с поверхности можно осуществлять с помощью источников синхротронного излучения. Эффективность дифракционных методов обусловлена особыми преимуществами синхротронного излучения. Высокая яркость и интенсивность, на много порядков большая, чем в лабораторных источниках, делают возможным изучать структуру слабо рассеивающих веществ и исследовать структурные процессы во времени. Возможность фокусировать излучение в пятно размером от десятков микрометров до десятков нанометров позволяет картировать неоднородные образцы с высоким пространственным разрешением. В дифракционном эксперименте высокая коллимация и низкая расходимость излучения вместе с высокой степенью монохроматизации помогают достичь рекордного углового разрешения ($\Delta Q/Q \sim 10^{-4}$–10^{-5}). Быстро работающие двухмерные детекторы с большим динамическим диапазоном, точная механика позиционирования образцов, прецизионная гониометрия обеспечивают короткое время сбора высококачественных данных и открывают возможности для детального исследования кинетики структурных процессов. Для традиционных рентгеноструктурных экспериментов главные преимущества синхротронного излучения – возможность менять энергию излучения и его высокая интенсивность. Способность настраивать энергию синхротронного излуче-

ния является необходимым условием контроля глубины проникновения излучения в образец, еще одно преимущество – возможность контроля резонансного рассеяния.

---

1. Чернышов, Д.Ю. Структурные исследования функциональных материалов методами рассеяния синхротронного излучения: учебное пособие / Д.Ю. Чернышов, С.Б. Вахрушев, А.В. Филимонов. –СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2020. – 111 с.

2. Филимонов, А.В. Специальные вопросы микро- и нанотехнологий. учебн. пособие / А.В. Филимонов, А.Н. Андронов, А.Б. Устинов. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2019. – 236 с.

Секция 4
Оптика и лазерная физика

УДК 535.214; 544.77

ОСАЖДЕНИЕ ПОЛИДИСПЕРСНОЙ СУСПЕНЗИИ В ПОЛЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В.И. Иванов, С.А. Пячин, И.С. Зиссер, И.Н. Егоршин
Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
valivi@mail.ru

Приведен обзор оптических способов перемещения микро- и наночастиц в поле лазерного излучения. Предложен метод оптической сепарации наносуспензии по размерам наночастиц. Данный подход перспективен для контролируемого осаждения субмикронных частиц в дисперсных системах.

POLYDISPERSE SUSPENSION DEPOSITION IN THE FIELD OF LASER RADIATION

V.I. Ivanov, S.A. Pyachin, I.S. Zisser, I.N. Egorshin
Far Eastern State Transport University (Khabarovsk)
valivi@mail.ru

Optical methods of moving microparticles and nanoparticles in the field of laser radiation are reviewed. The method of optical separation of nanosuspension by the size of nanoparticles is proposed. This approach is promising for the controlled deposition of submicron particles in dispersed systems.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.101-104

Необходимость прецизионно перемещать микро- и наночастицы возникает в биологии и медицине, при сборке микроустройств, анализе газообразных и жидких проб, химическом синтезе и т.д. Существующие методы транспортировки молекул, ионов и частиц в средах основаны на воздействии внешних полей различной природы: постоянных и переменных электрических полей; электромагнитных полей – световых волн (лазерного излучения); акустических и магнитных полей. Оптический способ захватывания и контролируемого передвижения частиц впервые предложил Артур Ашкин в 1970 г. [1]. Его метод, названный оптическим (лазерным) захватом, основан на том, что сфокусированный лазерный луч создает силы для захвата отдельных частиц, находящихся в жидкости. Его соавтор Стивен Чу, лауреат Нобелевской премии по физике в 1997 г., предложил схему удержания частиц за счет фокусирования лазерного луча при помощи короткофокусной линзы с большой числовой апертурой [2]. Значительный градиент интенсивности света в фокальной области этой линзы обеспечивал стабильный захват в растворе полистирольной частицы с размерами порядка 25 мкм. Термин «лазерный пинцет» («optical tweezers») был введен для описания этой однолучевой схемы. При помощи лазерного пинцета возможен неразрушающий захват биологических объектов [3]. Если диаметр диэлектрической частицы меньше, чем длина волны лазерного излучения, то она может быть

захвачена сфокусированным лучом в результате поляризации в неоднородном электрическом поле светового потока. Захваченная частица сдвигается в сторону максимальной напряженности поля, т.е. к оси лазерного луча.

В современных оптических ловушках применяют бесселев пучок, который состоит из светлого пятна и окружающих его колец. Мощность лазерного луча, способного захватить частицы, должна быть от 10 мВт до 1 Вт. С помощью таких оптических ловушек можно передвигать несколько частиц, которые удалены друг от друга на расстояние 3 мм [4]. Чтобы захватывать и перемещать биологические микрообъекты, лазерное излучение должно быть непрерывным. Применение импульсного режима работы лазера может привести к разрушению передвигаемой частицы.

Несмотря на явные преимущества оптические способы манипуляции обладают рядом недостатков. Из-за высокой плотности энергии лазерного излучения захватываемый микрообъект может быть деформирован [5]. Сфокусированным лазерным лучом можно удерживать частицу лишь в малой области пространства, поэтому ее перемещение по заданной траектории и с определённой скоростью связано с большими техническими трудностями. Помимо этого, жидкая среда, в которую помещены частицы, должна обладать высокой степенью прозрачности, что достигается при малой концентрации частиц в растворе. Поэтому дальнейшее усовершенствование методов оптической манипуляции наночастицами остается актуальной задачей мирового уровня.

Цель работы заключается в исследовании возможности сепарации и осаждении частиц с размерами микро-нанометрового диапазона в дисперсионной жидкой среде в результате диффузии, стимулированной лазерным облучением.

В работе разработана математическая модель сепарации наночастиц по размерам при освещении прозрачной коллоидной системы потоком лазерного излучения интенсивностью I_0 [6-10]. Приобретаемая частицами скорость определяется радиусом наночастиц a, вязкостью жидкости η, длиной волны излучения λ, показателями преломления дисперсионной и дисперсной среды n_1 и n_2 соответственно, скоростью света c

$$v = \frac{64}{9}\frac{a^5\pi^4}{\eta c\lambda^4}\frac{n_1(n_2^2-n_1^2)}{(n_2^2+2n_1^2)}I_0. \quad (1)$$

Одномерное уравнение диффузии, описывающее изменение концентрации наночастиц в суспензии под действием светового давления, выглядит как

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v\frac{\partial C}{\partial z}, \quad (2)$$

где $D = \frac{kT}{6\pi a\eta}$ – коэффициент диффузии; k – постоянная Больцмана; T – температура дисперсионной среды. Начальные условия: концентрация частиц во всем объеме кюветы при $t = 0$ равна $C = C_0$. Граничные условия для верхней и нижней поверхностей кюветы глубиной l, заполненной жидкостью с наночастицами, представляют третью краевую задачу

$$\frac{\partial C}{\partial z} = \frac{v}{D}C. \quad (3)$$

Из точного решения задачи фотоиндуцированного массопереноса в дисперсной системе вытекает, что скорость осаждения, стимулированного светом, характеризуется резкой зависимостью от радиуса частицы.

Стационарное решение уравнения (2) позволяет определить концентрацию наночастиц на разной глубине кюветы

$$C(z) = C_0\frac{vl}{D}\frac{\exp\left(\frac{v}{D}z\right)}{exp\left(\frac{v}{D}l\right)-1}. \quad (4)$$

Отношение скорости движения частиц в суспензии к коэффициенту диффузии равно

$$\frac{v}{D} = \frac{128}{3}\frac{a^6\pi^5}{kTc\lambda^4}\frac{n_1(n_2^2-n_1^2)}{(n_2^2+2n_1^2)}I_0 = Ba^6I_o, \quad (5)$$

где коэффициент $B = \frac{128}{3}\frac{\pi^5}{kTc\lambda^4}\frac{n_1(n_2^2-n_1^2)}{(n_2^2+2n_1^2)}$. Подставляя выражение (5) в (4), получаем

$$C(z) = C_0 B a^6 I_o l \frac{\exp(Ba^6 I_o z)}{exp(Ba^6 I_o l)-1}.$$

Поскольку распределение наночастиц по глубине очень сильно зависит от их радиуса, то, воздействуя на дисперсную среду лазерным излучением, возможно эффективно разделить полидисперсную смесь.

На рис. 1 показаны примеры распределения концентрации наночастиц диоксида кремния разного радиуса в воде в кювете глубиной l = 10 мм при воздействии лазерного излучения интенсивностью $I_0 = 2\cdot10^4$ Вт/м^2 с длиной волны λ = 630 нм при комнатной температуре T = 293 К. Начальная объемная концентрация частиц – $C_0 = 1\cdot10^8$ м$^{-3}$. Видно, что наночастицы радиусом более 100 нм осаждаются на дно кюветы, а более мелкие частицы остаются взвешенными в жидкости.

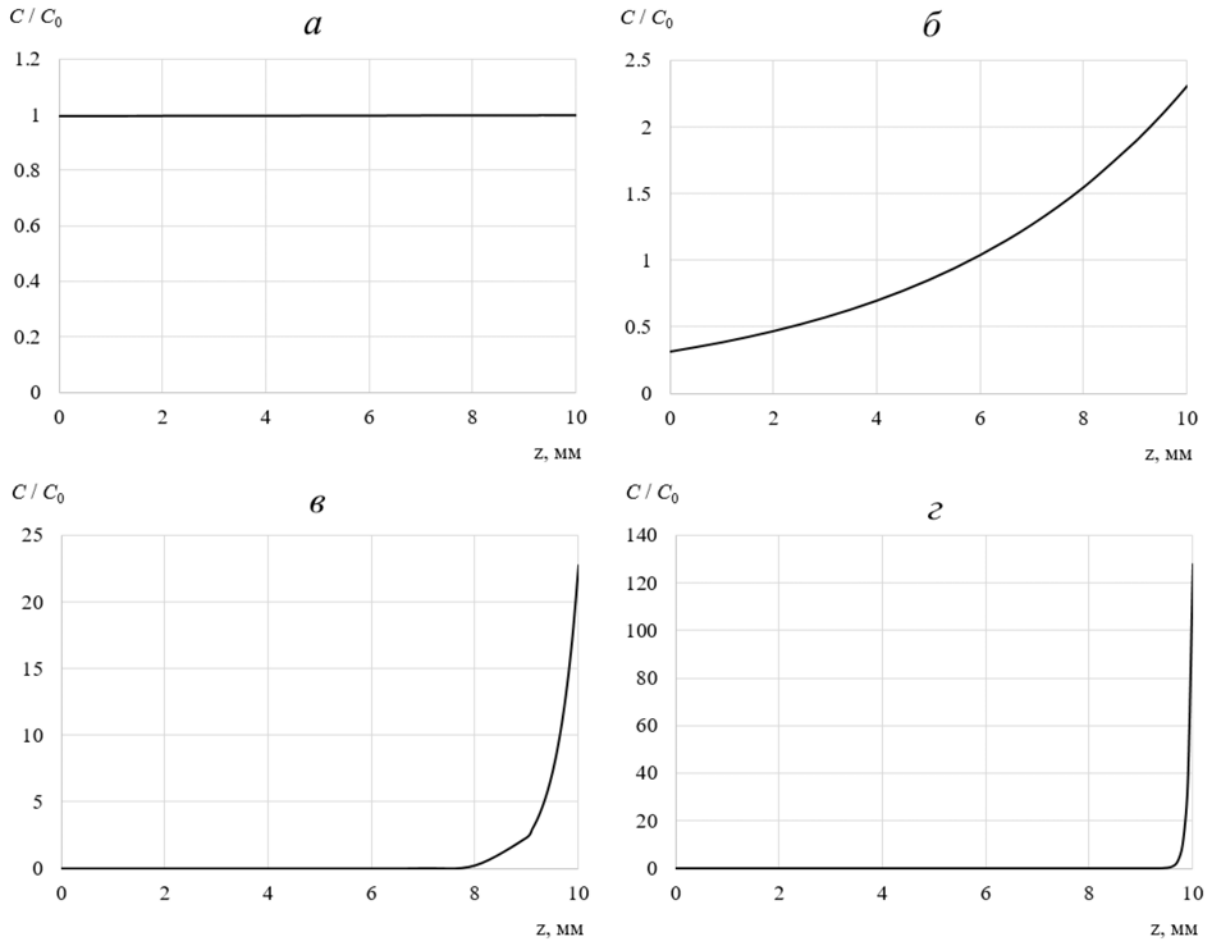


Рис.1. Индуцированное лазерным излучением распределение в воде наночастиц SiO_2 радиусом: а) 10 нм; б) 100 нм; в) 150 нм; г) 200 нм.

Данный подход представляется весьма перспективным для контролируемого осаждения субмикронных частиц в дисперсных системах и получения нанопленок из кол лоидных растворов.

1. Ashkin A. Acceleration and trapping of particles by radiation pressure // Phys. Rev. Lett. – 1970. – V. 24(4). – P. 156–159.

2. Ashkin, A., Dziedzic, J.M. Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles // Opt. Lett. – 1986. – V. 11(5). – P. 288–291.

3. Ashkin, A., Dziedzic, J.M. Optical Trapping and Manipulation of Viruses and Bacteria // Science. – 1987. – V. 235. – P. 1517–1520.

4. Соколовский, Г.С., Лосев, С.Н., Соболева, К.К., Дюделев, В.В., Дерягин, А.Г., Сиббет, В., Кучинский, В.И., Рафаилов, Э.У. Манипулирование микрочастицами при помощи бесселевых пучков, полученных от полупроводниковых лазеров // Письма в ЖТФ. – 2014. – Т. 40. - Вып. 11. - С. 53-59.

5. Минин, И.В., Минин, О.В. Оптические и акустические ловушки // Вестник СГУГиТ. - 2017. - Т. 22. - № 3. – С. 194–214.

6. Иванов, В.И., Иванова, Г.Д., Крылов, В.И., Хе, В.К. Осаждение наночастиц под действием сил светового давления в жидких средах // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. - 2018. - № 10. - С. 286–290.

7. Иванов, В.И., Иванова, Г.Д. Светоиндуцированная термодиффузия наночастиц // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. - 2016. - № 18. - С. 135–138.

8. 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.

9. Ivanov, V.I., Khe, V.K., Krylov, V.I., Syrnikov, D.A. Optical Method for Formation of Nanostructure in Nanosuspension // Diffusion and Defect Data. Pt A Defect and Diffusion Forum. - 2018. - V. 386 DDF. - P. 219-223.

10. Ivanova, G., Khe, V., Ivanov, V. Optical Method for Formation of Crystals In Nanosuspension // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. - 2019. - P. 012007.

Секция 5
Техническая физика

УДК 539.14

ЭКСТРАПОЛЯЦИЯ ВАРИАЦИОННЫХ РАСЧЕТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

А.О. Белозеров, А.И. Мазур
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
aobelozerov@gmail.com

Предложен новый метод экстраполяции вариационных расчетов на случай бесконечно больших модельных пространств, основанный на алгоритмах машинного обучения. Метод применен для анализа основного состояния ядра ^{4}He в модели оболочек без инертного кора с реалистическим NN-потенциалом Daejeon16. Теоретическое предсказание для энергии основного состояния, согласуется с экспериментальным значением. Достоинством метода является возможность оценки точности предсказаний. Мы планируем применять метод для решения других подобных задач.

EXTRAPOLATION OF VARIATION CALCULATIONS USING MACHINE LEARNING METHODS

A.O. Belozerov, A.I. Mazur
Pacific National University (Khabarovsk)
aobelozerov@gmail.com

A new method is suggested for extrapolating variational calculations to the case of infinitely large model spaces, based on machine learning algorithms. The method was applied to analyze the ^{4}He nucleus ground state in no-core shell model with a realistic NN potential Daejeon16. The theoretical prediction for the ground state energy is in agreement with the experimental value. The method allows us to evaluate the accuracy of predictions. We plan to use this method to solve other similar problems.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.105-108

В настоящее время для анализа самых разнообразных процессов и явлений используются методы машинного обучения [1]. Методы машинного обучения универсальны, так как при их использовании интересующий нас ответ дается не из непосредственных вычислений, а с помощью модели, аналогичной по архитектуре нейронной сети, обученной на наборе схожих данных.

Модель оболочек без инертного кора (МОБИК) [2] на данный момент является одним из основных методов описания атомных ядер. Этот подход называется безмодельным, так как в качестве входной информации используется только реалистическое нуклон-нуклонное взаимодействие (различные виды реалистических потенциалов рассматриваются в работах [3 – 6]). В МОБИК все нуклоны являются спектроскопически активными, то есть учитываются все возможные способы возбуждения ядра, удовлетворяющие принципу Паули.

Результаты расчетов в модели оболочек зависят от двух параметров: размеров модельного пространства базисных функций, которое определяется максимальным числом осцилляторных квантов N_{max}, и значением осцилляторной энергии $\hbar\Omega$. Наиболее трудоемкими и затратными в проведении оболочечных расчетов являются вычисление матричных элементов гамильтониана взаимодействия в обкладках многочастичных базисных функций и последующая диагонализация матрицы построенного гамильтониана.

Результатами расчетов в МОБИК являются различные характеристики ядерной системы: энергии основного и возбужденных состояний, среднеквадратичный, нейтронный и протонный радиусы ядра, вероятности электромагнитных переходов и др. В данной работе нас будет интересовать энергия основного состояния E_{gs}.

В МОБИК [2] волновая функция системы раскладывается в ряд по многочастичному осцилляторному базису. Энергия основного состояния E_{gs} является функцией максимального количества осцилляторных квантов N_{max} и параметра осцилляторной функции $\hbar\Omega$. Размер многочастичного базиса с ростом N_{max} увеличивается экспоненциально. Вследствие этого современные суперкомпьютеры позволяют производить расчеты в МОБИК с $N_{max} \leq 20$ только для легчайших ядер. Рассчитать характеристики ядер середины *p*-оболочки можно только в пространствах $N_{max} \leq 12$.

На рис. 1 представлены результаты расчетов энергии связанного состояния E_{gs} ядра атома гелия ^{4}He в МОБИК с реалистическим взаимодействием Daejeon16 [6] для некоторых из значений N_{max}. Сами расчеты проводились в модельных пространствах $N_{max} = 2 \div 18$ при $\hbar\Omega = 8, 9, 10$ МэВ и далее с шагом по $\hbar\Omega$ в 2.5 МэВ вплоть до 50 МэВ.

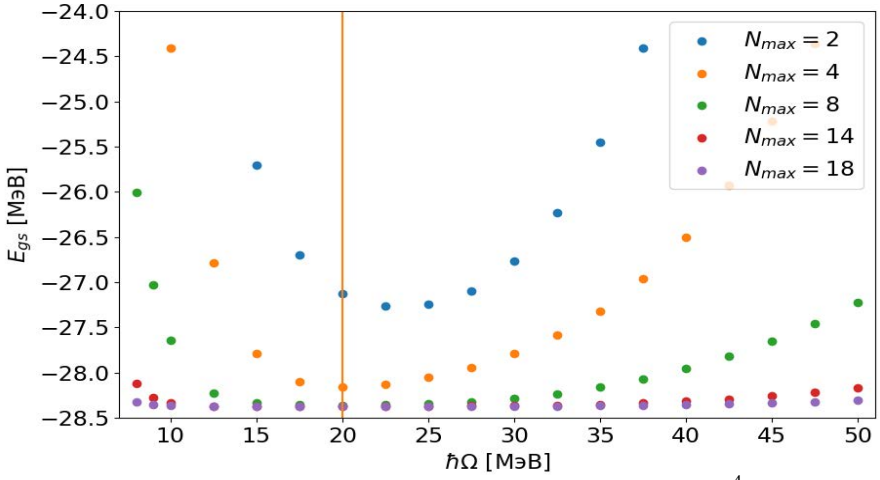


Рис. 1. Результаты расчетов энергии связанного состояния E_{gs} ядра ^{4}He в МОБИК с реалистическим взаимодействием Daejeon16.

Из приведенного рисунка видно, что точки, находящиеся левее минимума ($\hbar\Omega \sim 20$ МэВ, показан оранжевой линией), ведут себя нерегулярно. В работе [7] было показано, что для улучшения предсказаний энергии связанных состояний в методе SS-HORSE эти точки необходимо отбросить. В работе [8] мы получили, что аналогичный отсев входных данных позволяет улучшить точность предсказаний алгоритмов, использующих машинное обучение. Исходя из этого, при обучении искусственных нейронных сетей (ИНС) будут использоваться данные с $\hbar\Omega > 20$.

Методы машинного обучения, как и любые другие статистические методы, работают наилучшим образом, если обучение проходит на достаточно большом количестве данных (от тысячи и больше). Кроме того, обычно они применяются для задач интерполяции. В нашем же случае эти условия не выполняются.

Нехватку данных можно скомпенсировать одновременным обучением совокупности ИНС. Оказывается, что этот же прием позволяет применять методы машинного обучения и для задач экс-

траполяции. Ниже будет рассмотрен разработанный алгоритм применения машинного обучения в подобных задачах.

При решении задач методом машинного обучения важную роль играют начальные значения весовых коэффициентов в нейронах. Поэтому, чтобы избежать случайности в предсказаниях, обучается большое число ИНС, имеющих одинаковые гиперпараметры (в число гиперпараметров входят: размер пакета B_S, скорость обучения γ, архитектура ИНС), но различные начальные значения весовых коэффициентов. Чем большее число ИНС обучается, тем точнее будут предсказания, однако, время работы алгоритма также увеличивается.

Поскольку не все построенные ИНС будут давать корректные предсказания, нами используются два критерия для отсева заведомо неправильно обученных нейросетей. Для начала весь набор ИНС проверяется на соответствие их предсказаний локальному вариационному принципу: энергия основного состояния E_{gs}^{pr}, предсказанная для разных модельных пространств, должна убывать по мере роста N_{max} при фиксированном значении $\hbar\Omega$. Для дальнейшей фильтрации, в соответствии с работой [9], отбирается 50 ИНС, обладающих наименьшим значением среднеквадратичного отклонения (MSE) предсказанных значений от истинных. Среднее значение энергии, предсказанной оставшимися ИНС, принимается нами за предсказание метода, а среднеквадратичное отклонение их предсказаний за его погрешность ΔE_{gs}.

Алгоритм реализован на языке Python с использованием открытой библиотеки Keras [10].

Для подбора оптимальных параметров машинного обучения был использован поиск по сетке. Оптимальными оказались следующие значения: скорость обучения $\gamma = 0.1$, размер пакета (batch size) $B_S = 16$. Оптимальная архитектура состояла из 5 скрытых слоев, содержащих по 10 нейронов в каждом. Активирующая функция каждого из скрытых слоев сигмоидальная [10], за исключением последнего слоя, в котором выбрана линейная [10] активирующая функция.

Нами была рассмотрена зависимость результатов от количества данных, используемых для обучения (рис. 2). В процессе обучения использовались данные вплоть до $N_{max} = 10, 12, 14, 16, 18$. Синими точками обозначены предсказанная энергия основного состояния E_{gs}, синими линиями – погрешности предсказаний ΔE_{gs}. Например, для $N_{max} = 10$ $E_{gs} = -28.368 \pm 0.043$ МэВ, для $N_{max} = 18$ – $E_{gs} = -28.366 \pm 0.015$ МэВ. Черная линия соответствует теоретическим результатам [6] $E_{gs}^{t} = -28.372$ МэВ, полученным с тем же -взаимодействием Daejeon16. Из рисунка видно, что оно попадает в предсказанные интервалы во всех случаях.

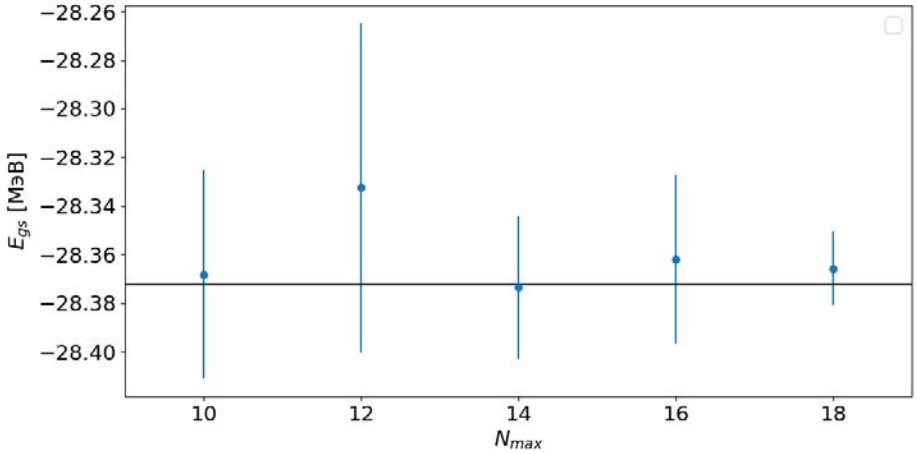


Рис. 2. Результаты работы алгоритма при различном количестве данных.

В заключение сформулируем основные результаты.

Предложен новый метод экстраполяции вариационных расчетов в ядерной модели оболочек с осцилляторным базисом на случай бесконечно больших модельных пространств. Метод основан на

машинном обучении ИНС и позволяет предсказывать значения энергии связанных состояний на основе результатов, полученных в ограниченном числе модельных пространств N_{max} с различными значениями осцилляторного параметра $\hbar\Omega$.

Метод позволяет оценить точность предсказаний. К достоинствам метода относится также его универсальность: его можно использовать не только для анализа энергий связи, но и других характеристик ядер.

С помощью метода на основе расчетов в модели оболочек без инертного кора с реалистическим *NN*-взаимодействием Daejeon16 определена энергия основного состояния ядра гелия ^{4}He. Предсказанные методом диапазоны содержат в себе значение энергии, полученное в [6], $E_{gs}^{t} = -28.372$ МэВ. Расхождение с экспериментальным значением $E_{gs}^{ex} = -28.296$ МэВ обусловлено выбором реалистического потенциала и не связано с работой самого метода.

Разработанный алгоритм работает даже при малом количестве данных. Так, при $N_{max} = 10$ для обучения используется всего 50 примеров, что является очень малым значением, по сравнению с объемами данных, необходимых для корректной работы других алгоритмов, использующих машинное обучение.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005) с использованием ресурсов ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

---

1. Müller, A. Introduction to Machine Learning with Python. – O'Reilly Media, 2016. – 285 p.
2. Barrett, B.R. Ab initio no core shell model / B.R. Barrett, P. Navrátil, J.P. Vary // Progress in Particle and Nuclear Physics. – 2013. – V. 69. – P. 131-181.
3. Machleidt, R. High-precision, charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential // Phys. Rev. C. – 2001. – № 63. – 024001.
4. Wiringa, R.B. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking / R. B. Wiringa, V.G.J. Stoks, R. Schiavilla // Phys. Rev. C. – 1995. –№ 51. – P. 38-51.
5. Stoks, V.G.J. Construction of high-quality NN potential models / V.G.J. Stoks [et. al] // Phys. Rev. C. – 1994. – № 49. – P. 2950-2963.
6. Shirokov, A.M. N3LO NN-interaction adjusted to light nuclei in ab exitu approach / A.M. Shirokov [et. al] // Phys. Lett. B. – 2016. – Vol. 761. – P. 87-91.
7. Широков, А.М. О сходимости расчетов в осцилляторном базисе / А. М. Широков, А. И. Мазур, В. А. Куликов // ЯФ. – 2021. – Т. 84, № 2. – С. 111-123.
8. Белозеров, А.О. Методы машинного обучения в задачах ядерной физики / А.О. Белозеров, А.И. Мазур // Материалы XVIII региональной научной конф. «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование» (г. Хабаровск, 10-12 ноября 2020 г.). – Хабаровск, 2020. – С. 58-61.
9. Deep learning: Extrapolation tool for ab initio nuclear theory / G. A. Negoita [et. al] // Phys. Rev. C. – 2019. – № 99. – 054308.
10. Keras: The Python Deep Learning library. – Режим доступа: https://keras.io/ (дата обращения 14.05.2021).

УДК 539.37

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИЛАКТИДА ПРИМЕНИТЕЛЬНО К FDM-ТЕХНОЛОГИИ

К.А. Драчёв, О.А. Одинокова
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
kirill@pnu.edu.ru

Проведены испытания образцов из полилактида на растяжение-сжатие в режимах ползучести при различных способах укладки слоев пластика методом FDM-печати. Показано влияние направления приложения нагрузки относительно слоев на физико-механические свойства образцов.

STUDY OF THE PHYSICAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLILACTIDE AS APPLIED TO FDM TECHNOLOGY

K.A. Drachev, O.A. Odinokova
Pacific National University (Khabarovsk)
kirill@pnu.edu.ru

Tensile-compression tests of polylactide specimens in creep at different ways of laying of plastic layers by FDM-printing have been carried out. Influence of direction of load application in relation to layers on physical and mechanical properties of samples is shown.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.109-112

В настоящее время для получения изделий из полимерных материалов все большую популярность набирает так называемое аддитивное производство, или 3D-печать. Благодаря аддитивным технологиям стало возможным получать объекты любой степени сложности и геометрии, при этом в разы сократить промежуток времени от идеи до конкретного изделия и существенно сократить трудоемкость, материалоемкость и энергоемкость, а также обеспечить экологически чистое производство. Исследовательская работа в области особенностей применения полимерных материалов в аддитивных технологиях остается весьма ограниченной и касается в основном АБС-пластика, изделия из которых используются в качестве демонстрационных образцов, а не в качестве функциональных рабочих изделий. В связи с этим исследование новых полимерных, в том числе композитных материалов, является актуальной задачей как в научном, так и в прикладном аспектах.

Рис. 1. 3D-принтер Creality Ender 3 Pro.

Для проведения исследований использовался 3D-принтер Creality Ender 3 Pro [1] (рис. 1). Подающий механизм принтера выполнен по технологии «Direct», при которой материал подается напрямую в нагревательный блок, что позволяет печатать широким спектром термопластиков. Формообразование из легкоплавких материалов по методу FDM заключается в том, что прутковый материал в специальной камере нагревают до температуры размягчения и продавливают через печатающее сопло необходимого диаметра (в нашем случае – 0,4 мм). Печа-

тающая головка перемещается в горизонтальной плоскости по заданной программе, нанося слои материала на предыдущие слои.

Математическая модель образцов создавалась в системе CAD и записывалась в формат STL, после чего передавалась в программное обеспечение Ultimaker CURA [2], преобразующее созданную ранее трехмерную модель в управляющий машинный код (G-code), позволяющий принтеру изготовить деталь. Программа CURA ориентирует изделие, разбивает ее на горизонтальные сечения (слои) и рассчитывает пути перемещения печатающей головки.

В качестве материала для исследования и последующего изготовления образцов использовался PLA-пластик (полилактид) от Bestfilament, являющийся биоразлагаемым, биосовместимым, термопластичным алифатическим полиэфиром, структурная единица которого – молочная кислота.

Необходимость проведения сравнительного анализа механических свойств полимерных материалов при растяжении и сжатии, особенно в области малых деформаций, ограниченных применением линейной суперпозиции, требует очень тщательной постановки эксперимента. Чтобы получить результаты требуемой точности, необходимо создать одинаковые условия при проведении механических испытаний на растяжение и сжатие. Следует отметить, что для правильного понимания явления ползучести в пластмассах испытания при сжатии не менее важны, чем при растяжении.

Рис. 2. Установка для испытания на ползучесть в условиях растяжения – сжатия.

Для выявления физико-механических свойств термопластов на основе полилактида проведены испытания образцов на растяжение и сжатие в режимах ползучести. С этой целью использовалась установка с переключаемым реверсивным устройством, которое позволяет исследовать деформационные свойства при растяжении и сжатии на одном и том же образце в любой последовательности и без переустановок испытываемого образца и контрольно-измерительных приборов (рис. 2).

Образцы для испытаний были изготовлены из полилактида со стопроцентным заполнением и различались направлением укладки слоев при печати (рис. 3). Испытаны образцы силой F = 10 Н в установке, содержащей реверсор специальной конструкции [3], создающий идентичные условия при испытаниях на растяжение и сжатие. Температура испытаний 20ºС. Установленный в захватах реверсора образец плавно нагружался и производился последующий отсчет величины возникающей деформации.

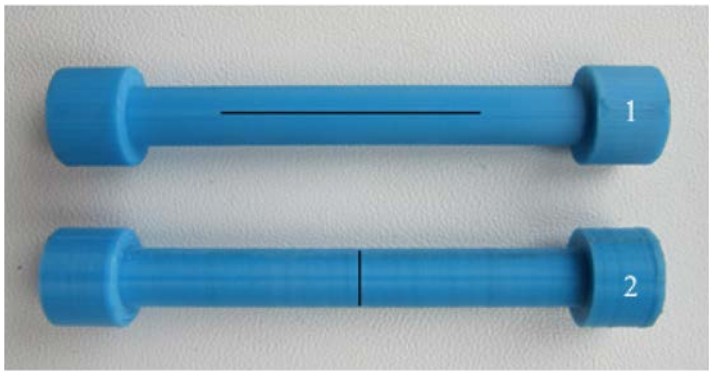


Рис. 3. Образцы для испытания на ползучесть
(линия указывает на направление укладки слоев при печати образцов).

Интервалы времени для записи удлинения должны выбираться таким образом, чтобы в процессе испытания можно было полностью установить характер изменения удлинений. В наших исследованиях были приняты следующие временные интервалы измерения деформаций в минутах: 0,25; 0,5; 1; 2; 4; 8; 16. По результатам испытаний были построены кривые ползучести в координатах «деформация ε – время t» при растяжении и сжатии (рис. 4).

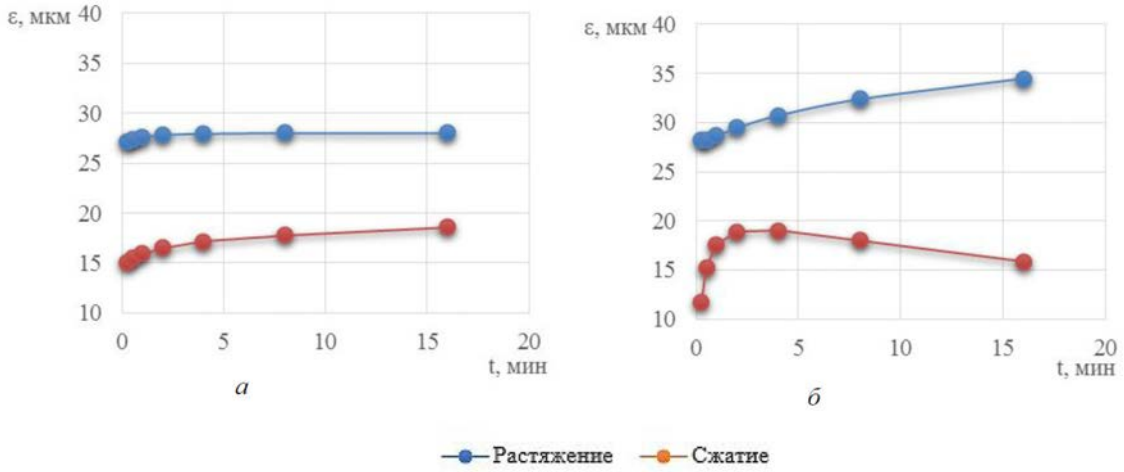


Рис. 4. Кривые ползучести: *а* – образец 1 с продольным расположением нитей; *б* – образец 2 с поперечным расположением нитей.

На основе проведенных испытаний на ползучесть можно сделать следующие выводы: кривые ползучести полилактида при растяжении и сжатии носят монотонный характер; функция разномодульности как при продольной ориентации нитей, так и при поперечной вы выбранных значениях напряжения (σ = 0,1 МПа), времени (t = 8 мин.) и температуры (T = 293 K) также плавно возрастают (рис. 5). Отсутствие на кривых разномодульности обоих образцов аномальных точек (максимумов или перегибов) свидетельствует об отсутствии опасного сточки зрения прочности напряжения. При увеличении значения времени, напряжения или температуры на функции разномодульности может возникнуть точка экстремума (предельное напряжение при сжатии) или точка перегиба (предельное значение напряжения при растяжении) [4].

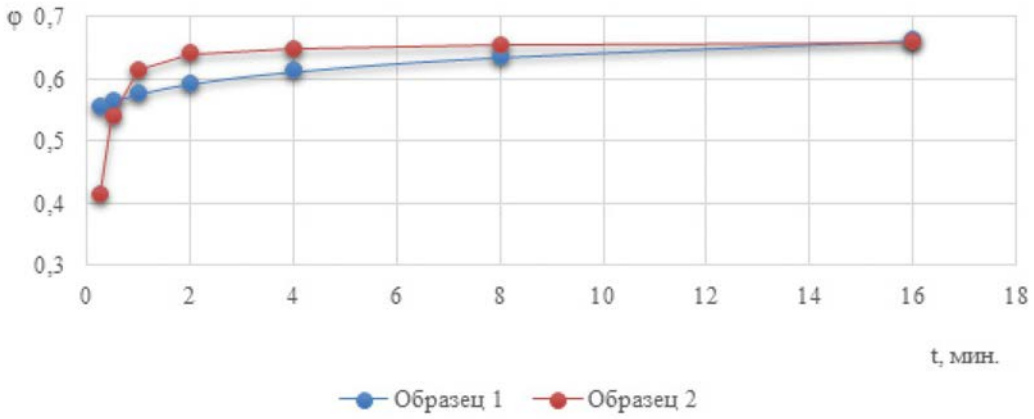


Рис. 5. Функции разномодульности: а). образец 1 с продольным расположением нитей; б). образец 2 с поперечным расположением нитей.

Таким образом, можно сделать вывод, что для безопасного использования необходимо производить исследования как прочностных, так и деформационных свойств данного материала в условиях ползучести. Кроме того, необходимо произвести испытания на старение материала под воздействием атмосферных факторов. Также следует отметить, что, несмотря на использование одного пластика

при изготовлении всех образцов, готовые изделия (образцы) получились с совершенно разными физико-механическими свойствами в зависимости от ориентации образующих их волокон.

1. Обзор 3D-принтера CREALITY Ender 3 Pro. – URL: https://top3dshop.ru/blog/3d-printer-creality-ender-3-pro-review.html.

2. Ultimaker Cura: Powerful, easy-to-use 3D printing software. – URL: https://ultimaker.com/software/ultimaker-cura.

3. А. с. 356511 СССР, МКИ G 01 N 3/02. Универсальный реверсор для испытаний на растяжение – сжатие / О.А. Одинокова, В.В. Одиноков, П.В. Мелентьев (СССР). 1972. Бюл. № 32. 3 с.

4. А. с. 890132 СССР, МКИ G 01 N 3/08. Способ определения характеристик ползучести образцов материалов / О. А. Одинокова, Ю. М. Даниловский (СССР). 1981. Бюл. № 46. 2 с.

УДК 621.03

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ВАКУУМНОЙ КАМЕРЫ ДЛЯ ИСПЫТАНИЯ МАЛЫХ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ

А.А. Комарова, Д.В. Фомин

Амурский государственный университет (г. Благовещенск)

alena-komarova-2019@inbox.ru

В работе представлены результаты расчета основных параметров вакуумной камеры для испытания малых космических аппаратов формата CubeSat (заявка на изобретение № 2021117193 от 15.06.2021). Построена трехмерная модель камеры в системе моделирования КОМПАС-3D. Показано, что для испытания спутников формата CubeSat 12 U оптимальный объем камеры составляет 0,067 м^3. Определены размеры фланцев камеры, согласно международным стандартам. Рассчитано время достижения в камере давления 10^{-5} Па, при использовании откачного поста марки HiCube 80 Eco, составившее 2,3 часа.

CALCULATION OF THE PARAMETERS OF THE VACUUM CHAMBER FOR TESTING SMALL SPACECRAFT

A.A. Komarova, D.V. Fomin

Amur State University (Blagoveshchensk)

alena-komarova-2019@inbox.ru

The paper presents the results of calculating the main parameters of a vacuum chamber for testing small CubeSat spacecraft (application for invention No. 2021117193 from 15.06.2021). A three-dimensional model of the camera is constructed in the COMPASS-3D modeling system. It is shown that for testing CubeSat 12 U format satellites, the optimal chamber volume is 0.067 m^3. The dimensions of the chamber flanges are determined, according to international standards. The time of reaching a pressure of 10^{-5} Pa in the chamber, when using a pumping station of the HiCube 80 Eco brand, was calculated, which was 2.3 hours.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.112-115

Проведение вакуумных испытаний студенческих спутников в Амурском государственном университете планируется осуществлять в научно-образовательном центре университета. На базе

центра студенты университета уже получили положительный опыт проектирования спутников формата CubeSat, полезных модулей к ним и вспомогательных устройств, а также моделирования основных параметров этих устройств [1, 2 и др.].

Процесс тестирования космических аппаратов (КА) в вакуумных камерах осуществляется в условиях имитирования космической среды, которая будет воздействовать на малый космический аппарат в реальных условиях. Это необходимо для определения успешности или неудачи космической миссии КА в будущем. Обязательным условием тестирования является создание в испытательной камере давления, при котором отсутствует конвективный теплообмен, поскольку в космическом пространстве практически отсутствует свободная конвекция и это может привести к выходу из строя, как отдельных элементов, так и целых узлов космического аппарата [3]. Как правило, тестовые вакуумные камеры рассчитываются на базовое давление 10^{-3} – 10^{-5} Па [4].

При разработке космического аппарата или связанного с ним оборудования важна тщательная отработка технической документации. Для этого подходит САПР «КОМПАС», представляющий собой профессиональную систему трехмерного моделирования, получившую широкое применение для множества промышленных предприятий и способную решить большинство основных задач проектировщика [5-7]. Размеры фланцев для вакуумных камер стандартизированы и широко представлены на сайтах компаний изготовителей вакуумной техники [8 и др.].

На первом этапе работы в системе трехмерного моделирования КОМПАС-3D была построена трехмерная модель вакуумной камеры для испытания малых космических аппаратов формата CubeSat (заявка на изобретение №2021117193 от 15.06.2021), представленная на рис. 1.

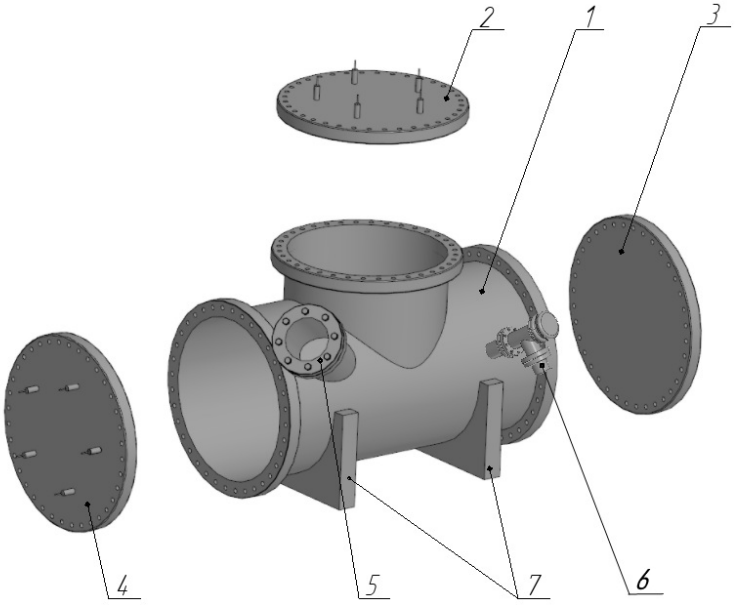


Рис. 1. 3D-модель вакуумной камеры для испытания малых космических аппаратов формата CubeSat, выполненная в системе трехмерного моделирования КОМПАС-3D.

Камера состоит из следующих компонентов: основания 1, верхнего фланца 2 с гермовводами, фланца-заглушки 3, вертикального фланца 4 с гермовводами, фланца 5 со смотровым окном, быстроразъемного фланца 6 с вентилем для подключения гофры откачного поста, поддерживающих опор 7. Материалом камеры и фланцев является нержавеющая сталь. Уплотнители, обеспечивающие герметичность соединений (на рисунке не показаны), выполняются из меди.

Учитывая стандартные габаритные размеры спутника формата CubeSat 12U (226,3x226,3x x340,5 мм) [9], крепление, стандарты на фланцы, был определен оптимальный внутренний диаметр вакуумной камеры – 350 мм и ее объем – 0,067 м^3. В таблице представлены типы фланцев, выбранные для проектируемого устройства.

Фланцы вакуумной камеры

Тип фланца	Назначение
FB – CF350	фланец-заглушка, фланец вертикальный
VP-CF300-SS/G7056	фланец верхний
VP-CF200-SS/G7056	фланец смотрового окна
FB – CF63	фланец для подключения откачного поста

На втором этапе был произведен расчет времени откачки спроектированной вакуумной камеры откачным постом HiCube 80 Eco до давления 10^{-5} Па.

Для этого использовались представленные формулы (1)-(3) [10].

Производительность или пропускная способность Q (Па лс$^{-1}$) определялась как:

$$Q = p \times \frac{dV}{dt}, \quad (1)$$

где p – требуемое давление, Па; dV/dt – объем, проходящий за единицу времени.

Скорость откачки υ (лс$^{-1}$):

$$\upsilon = \frac{Q}{p}, \quad (2)$$

где p – требуемое давление, Па; Q – производительность или пропускная способность, Па лс$^{-1}$.

Время, необходимое для откачки вакуумного объема от давления p_1 до давления p_2:

$$t = \left(\frac{V}{S}\right) \times ln\left(\frac{p_1}{p_2}\right), \quad (3)$$

где V – объем вакуумной камеры, м^3; S – быстрота действия вакуумного насоса, м^3/с; p_1 – начальное давление в вакуумной камере, Па; p_2 – конечное давление в вакуумной камере, Па.

Из проведенных вычислений следует, что для достижения давления 10^{-5} Па в вакуумной камере потребуется 2,3 часа.

Таким образом, расчет основных параметров вакуумной камеры для испытания малых космических аппаратов, спроектированной в системе трехмерного моделирования КОМПАС-3D (заявка на изобретение №2021117193 от 15.06.2021) показал, что для испытания спутников формата CubeSat 12 U оптимальный объем камеры составляет 0,067 м^3. Определены размеры фланцев камеры, согласно международным стандартам. При использовании откачного поста марки HiCube 80 Eco, время достижения давления 10^{-5} Па в вакуумной камере составит 2,3 часа.

---

1. Modeling of three dimensional inhomogeneous thermal fields of nanosatellite electronic boards electronic / M.A. Barulina, A.V. Golikov, D.V. Fomin, D.O. Strukov // Information Systems. – 2018. – № 2 (17). – С. 22.

2. Модуль полезной нагрузки для слежения за пожарами на платформе спутника Cubesat 3U / Д.В. Фомин, А.С. Кизима, А.Е. Гладков [и др.] // «Орбита молодежи» и перспективы развития Российской космонавтики: Материалы VI Всероссийской молодежной научно-практ. конф., Пермь, 28–30 сентября 2020 г. – Пермь: Пермский национальный исследовательский политехн. ун-т, 2020. – С. 31-34.

3. Цаплин, С.В. «Теплообмен в космосе» / С.В. Цаплин, С.А. Болычев, А.Е. Романов ; Министерсво образования и науки Рос. Федерации, Самар. нац. исслед. ун-т им. С. П. Королева, Ин-т ракетно-косм. техники, Ин-т информатики, математики и электроник. – Самара: Изд-во Самар. ун-та, 2018. – On-line.

4. Патент на изобретение № 2564056 C1 Российская Федерация, МПК B64G 7/00. Способ тепловакуумных испытаний космического аппарата: № 2014121836.11: заявл.30.05.2014: опубл. 27.09.2015 / М.И. Гришко, А.С. Смирнов, В.М. Пожалов, М.С. Митрофанов; заявитель – Акционерное общество «Военно-промышленная корпорация "Научно- производственное объединение машиностроения"».

5. Особенности процесса создания трехмерной модели конструкции космического аппарата дистанционного зондирования / Журнал «САПР и графика». – URL: http://www.sapr.ru/ article.aspx? id=22132&iid=1013, режим доступа – свободный.

6. Афанасьев, А.Н. «Автоматизация структурно-параметрического анализа проектных решений и обучения проектировщика изделий машиностроения средствами САПР КОМПАС / А.Н. Афанасьев, С.И. Бригаднов // Автоматизация и моделирование в проектировании и управлении . – 2018. – № 2. – С. 26-33. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. – URL: https://e.lanbook.com/journal/issue/311266 (дата обращения: 28.06.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

7. Кравченко, А.М. Твердотельное 3d моделирование в задачах инженерного проектирования // Вестник Рязанского гос. агротехн. Ун-та им. П.А. Костычева. – 2014. – № 2(22). – С. 26-29. – Текст: электронный // Лань:

электронно-библиотечная система. – URL: https://e.lanbook.com/journal/issue/291659 (дата обращения: 28.06.2021). – Режим доступа: для авториз. пользователей.
8. Фланцы вакуумные. – Режим доступа: https://avacuum.ru/rus/armature/flanges/ (дата обращения 28.06.2021)
9. Спецификация конструкции CubeSat. – Режим доступа: https://dernasherbrezon.com/posts/cubespec (дата обращения 28.06.2021)
10. Экспериментальные методы физики твердого тела / Д.В. Фомин. – М.; Берлин: Директ-Медиа, 2014. – 186 с.

УДК 621.371/.372

ВЛИЯНИЕ ВНЕЗАПНЫХ ИОНОСФЕРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ НА *D*-ОБЛАСТЬ ИОНОСФЕРЫ

В.И. Нестеров
Тихоокеанский государственный университет (г.Хабаровск)
vinestor@mail.ru

Рассматривается задача прогнозирования условий распространения СДВ при возмущенных условиях, позволяющие производить перерасчет эффекта возмущенности с трассы на трассу. Представлено пороговое значение плотности потока рентгеновского излучения, при котором может наблюдаться изменение фазы принимаемого сигнала.

INFLUENCE OF SUDDEN IONOSPHERIC DISTURBANCES ON D REGION OF THE IONOSPHERE

V.I. Nesterov
Pacific National University (Khabarovsk)
vinestor@mail.ru

The problem of forecasting the conditions for the propagation of VLF under disturbed conditions is considered, which makes it possible to recalculate the effect of disturbance from track to track. The threshold value of the X-ray flux density at which a change in the phase of the received signal can be observed is presented.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.115-117

На ионизацию нижней ионосферы существенное воздействие оказывают галактические космические лучи. Галактические космические лучи – это поток заряженных ядер высокой энергии. Он проникает через всю толщу верхней атмосферы практически без потерь и является основным источником ионизации на высотах ниже 60 км. Верхняя ионосфера для галактических космических лучей прозрачна [1].

Задача прогнозирования условий распространения СДВ с учетом возмущенной ионосферы представляет собой важное практическое значение. Более оперативным и простым методом диагностики и определения параметров возмущенности, а также прогнозирования условий распространения представляет метод, основанный на текущем анализе СДВ-данных от сети контрольных трасс. Основой такого прогнозирования являются эмпирические модели возмущений, связывающие изменения эффективных характеристик нижней ионосферы с интенсивностью ионизирующих потоков и позволяющие производить перерасчет эффекта возмущенности с трассы на трассу [2].

Поскольку энергия вспышки распространяется со скоростью света, время возникновения вызываемых ею возмущений в ионосфере совпадает со временем начала вспышки, а вызываемые ею внезапные фазовые аномалии сильно коррелированы в значительно разнесенных точках освещенной полусферы. Исходя из этого трудно прогнозировать возникновение внезапных ионосферных возмущений (ВИВ) по измерениям фазы СДВ радиостанций.

В работе [3] указывается, что зарегистрировано сильное искажение фаз принимаемых СДВ сигналов, связанное с рентгеновским излучением солнечных вспышек. Также указывается, что проведенные модельные расчеты полей СДВ указывают на увеличение в 20 раз электронной концентрации во время вспышки и понижение ионосферы с образованием слоя *C* в средних широтах во время магнитной бури, что свидетельствует об инжекции электронов в ионосферу с энергиями десятки, а, возможно, и сотни кэВ.

В [4-5] приведены эмпирические модели при внезапной фазовой аномалии. В [4] приводятся результаты нормировки при анализе событий ВИВ:

$$\Delta\varphi_{расч} = \Delta\varphi_{конт}\frac{R_i f_k}{R_k f_i}\sqrt{\frac{\cos\chi_i}{\cos\chi_k}}, \quad (1)$$

где $\Delta\varphi_{\text{расч}}$ – величина измеренных фазовых аномалий на контрольной трассе; R_k, R_i – длина освещенной части контрольной и корректируемой трасс соответственно; f_i, f_k – принимаемые частоты на *i* трассе и контрольной; $\cos\chi_i$, $\cos\chi_k$ – среднее значение косинуса зенитного угла Солнца на корректируемой и контрольной трассах, соответственно.

Если отклонение текущих значений фазы $\varphi_m(t)$ кривой «спокойного» дня $\varphi_{mc}(t)$ на трассе

$$\Delta\varphi(t) = \varphi_m(t) - \varphi_{mc}(t). \quad (2)$$

превышает по абсолютной величине заданный порог обнаружения, делается вывод о наличии фазовой аномалии на трассе. Величина порога обнаружения устанавливается для каждой трассы опытным путем, с учетом величины случайных флуктуаций фазы в невозмущенных условиях. В нашем случае порог обнаружения устанавливается как 2σ, где σ – среднеквадратическое отклонение фазы от кривой «спокойного» дня $\varphi_{mc}(t)$. Если выполняется это условие, то рассчитывается ожидаемая величина отклонения фазы, оцененная по аномалиям на контрольной трассе. В качестве контрольной была выбрана трасса Австралия – Хабаровск. Такой выбор обусловлен следующими предпосылками: одномодовое распространение и незначительное изменение зенитного угла Солнца вдоль трассы.

Формула (1) не учитывает изменение фазы во время ВИВ в зависимости от плотности потока рентгеновского излучения *Г*. Ниже рассматриваются эмпирические соотношения между величиной внезапной фазовой аномалии (ВФА), зенитным углом Солнца χ и плотностью потока *Г* рентгеновского излучения в диапазоне длин волн 0.5-4Å для трасс различной протяженности и ориентации.

На рис. 1 показан пример выделенных аномалий фазы для четырех трасс РНС «Омега» при приеме в г. Хабаровске. В данном случае две трассы (Гавайи – Хабаровск и Ля Реюньон – Хабаровск) охватывают практически всю освещенную полусферу земного шара (150° з.д. – 50° в.д.). Начало возмущений на всех трассах характеризуется резким уменьшением фазы (15-30 мин.), а период восстановления может продолжаться несколько часов.

В качестве меры изменения эффективной высоты отражения сигналов Δh при ВИВ'ах выбрано выражение, определяемое из наблюдаемого на трассе уменьшения $\Delta\varphi$ СДВ-сигнала, которое не зависит от величины плотности потока *Г* рентгеновского излучения [6]:

$$\Delta h = \Delta\varphi\Big/\left[R_0\left(\frac{1.874\cdot 10^6}{f\cdot h^3} + 0.0156\cdot f\right)\right], \quad (3)$$

где $\Delta\varphi$ – изменение фазы в сотых долях фазового цикла (сц); R_0 – длина освещенной части трассы в Мм; f – частота СДВ-сигнала в кГц; h – высота ионосферы в км (h = 65 км).

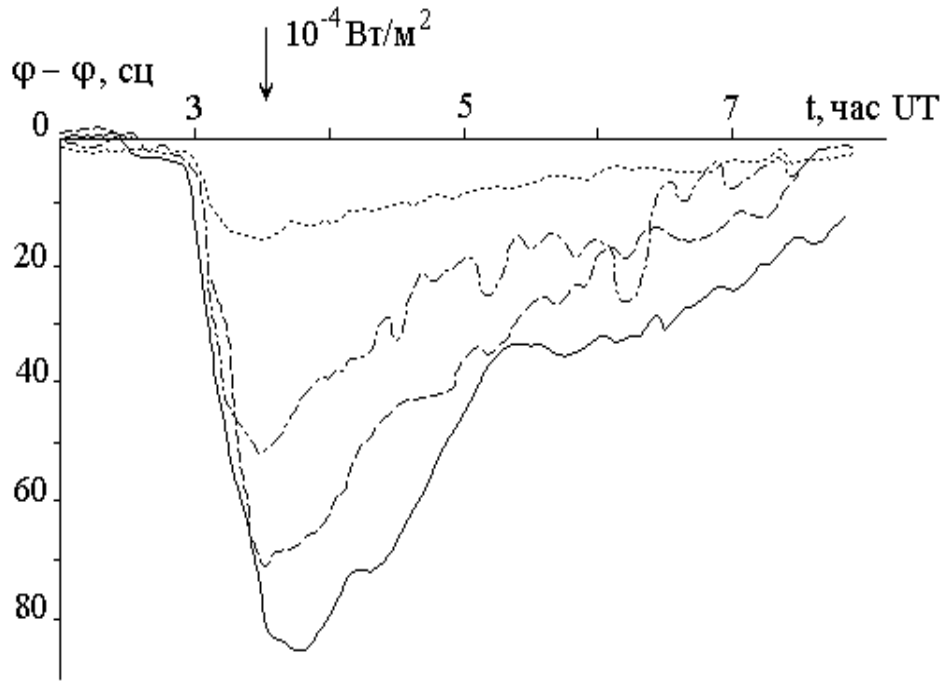


Рис. 1. Аномалии фазы для события 08.05.1983 г. (точки: трасса Япония – Хабаровск; штрих-пунктир: трасса Гавайи – Хабаровск; пунктир: трасса Австралия – Хабаровск; сплошная линия: трасса Ля Реюньон – Хабаровск).

Зависимость изменения высоты отражения ионосферы от величины потока рентгеновского излучения Γ и зенитного угла Солнца χ рассчитывалась по формуле [3]:

$$\Delta h = a \cdot ln(1 + b \cdot \Gamma) \cdot ln(c + \cos\chi), \quad (4)$$

где $\cos\chi$ – среднее по освещенной части трассы значение. Данные о максимальных потоках Γ взяты из [7]. Для определения параметров a, b, c использовано около 100 событий ВФА. Были получены следующие значения параметров: a =1.90 км, $b = 22.9 \cdot 10^6$ м$^2 \cdot$ Вт$^{-1}$, c = 1.08.

Используя формулы (3) и (4), с учетом найденных значений параметров *a, b, c,* было определено пороговое значение плотности потока $\Gamma_{\text{пор}}$ рентгеновского излучения. Было установлено, что пороговым значением плотности потока рентгеновского излучения является величина

$\Gamma_{\text{пор}} = (1 - 2) \cdot 10^{-7}$Вт $\cdot$ м$^{-2}$ (для длин волн 0,5 ÷ 4 Å).

Значение Γ выбиралось при 2σ.

---

1. Дорман, Л.И., Козин, И.Д. Космическое излучение в верхней атмосфере. – М.: Наука, 1983. – 152 с.

2. Прогнозирование СДВ-полей в глобальном масштабе / Г.И. Макаров, В.В. Новиков, А.Б. Орлов // XV Всесоюз. конф. по распространению радиоволн: тез. докл. – М.:Наука, 1987. – С.205-208.

3. Эффекты экстремальных магнитных бурь 29-31 октября 2003 г. в среднеширотной ионосфере / М.И. Беленький и [др.] // Геомагнетизм и аэрономия. – 2005. – Т. 45, № 1. – С. 92-105.

4. Проявления ВИВ на высокоширотных трассах / С.М. Демыкин, В.П. Кищук //VIII Межведомственный семинар по распространению километровых и более длинных волн: тез. докл. – Омск, 1982. – С.17-19.

5. Возможности прогноза вариаций СДВ-полей на высокоширотных трассах при вторжении СКЛ / С.М. Демыкин, В.П. Кищук, В.А. Колсанов, С.Н. Соколов // IX Межведомственный семинар по распространению километровых и более длинных радиоволн: тез. докл. – Хабаровск, 1983. – С.71-72.

6. Орлов, А.Б., Азарнин, Г.В. Основные закономерности распространения сигналов СДВ-диапазона в волноводном канале Земля – ионосфера // Проблемы дифракции и распространения волн: сборник научных статей. – Л.: Изд. ЛГУ, вып. X, 1970. – С.3-107.

7. Solar geophysical data, part II. – Boulder, Colo, USA.

УДК 534.521

РАСЧЕТ СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ КОЛЕБАНИЙ ИМИТАТОРА ТРАНСПОРТНО-ПУСКОВОГО КОНТЕЙНЕРА МКА

Д.В. Фомин, Д.С. Тарасов
Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
e-office@yandex.ru

Для разработанного в Научно-образовательном центре АмГУ имитатора транспортно-пускового контейнера малого космического аппарата (заявка на изобретение №2021107504 от 22.03.2021 г.), предназначенного для проведения вибро-динамических испытаний спутников формата CubeSat, в среде САПР SolidWorks создана его трехмерная модель и проведен расчет собственных частот колебаний в диапазоне от 479,49 до 2189,60 Гц. Анализ данных показал, что максимальная задействованная эффективная масса составляет 10% на 2 моде с частотой 793,08 Гц. Полученные результаты свидетельствуют, что рассматриваемая конструкция имитатора транспортно-пускового контейнера имеет достаточный запас прочности.

CALCULATION OF THE NATURAL VIBRATION FREQUENCIES OF THE SIMULATOR OF THE TRANSPORT AND LAUNCH CONTAINER SMALL SPACECRAFT

D.V. Fomin, D.S. Tarasov
Amur State University (Blagoveshchensk)
e-office@yandex.ru

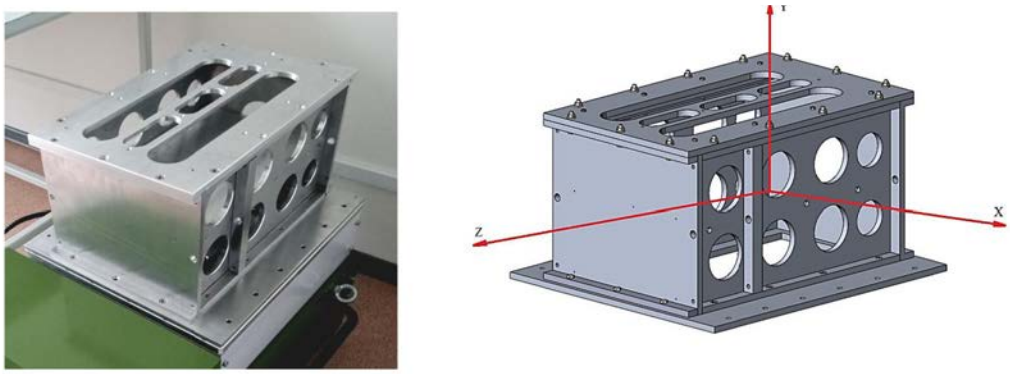
For the simulator of the transport and launch container of a small spacecraft developed in the Scientific and educational center of AmSU (application for invention No. 2021107504 of 22.03.2021), designed for conducting vibration-dynamic tests of CubeSat satellites, a three-dimensional model of it was created in the CAD environment of SolidWorks and the calculation of the natural frequencies of vibrations in the range from 479.49 to 2189.60 Hz was performed. Data analysis showed that the maximum effective mass involved is 10% at mode 2 with a frequency of 793.08 Hz. The obtained results indicate that the considered design the simulator of the transport and launch container of a small spacecraft developed has a sufficient margin of safety.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.118-121

Научно-образовательный центр (НОЦ) Амурского государственного университета (АмГУ) имеет практический опыт проектирования технических устройств для малых космических аппаратов (МКА) и в частности для спутников формата CubeSat [1 и др.]. При этом часто используются методы численного моделирования для исследования свойств спроектированных устройств [2 и др.]. Одной из последних разработок НОЦ АмГУ стал имитатор транспортно-пускового контейнера (ИТПК) для спутников формата CubeSat (заявка на изобретение № 2021107504 от 22.03.2021г.). ИТПК предназначен для удержания МКА на столе вибростенда при проведении вибро-динамических испытаний. Такой вид испытаний является обязательным для любого космического аппарата (КА), включая малые. Без его прохождения КА не будет допущен к запуску, поскольку при доставке ракетой-носителем полезная нагрузка испытывает серьезные вибро-динамические нагрузки, которые могут привести не только к выходу из строя самого КА, но и ракеты-носителя, на которой он установлен. Исходя из это-

го, представляется важным осуществлять расчет собственных частот колебаний, как КА, так и связанного с ним транспортно-пускового контейнера, а на момент испытаний – ИТПК. Для этого существуют различные методики расчета и используются различные системы автоматизированного проектирования (САПР) [3-5].

На рис. 1 представлен имитатор транспортно-пускового контейнера разработанный в НОЦ АмГУ (А) и его трехмерная модель (Б) построенная в среде САПР SolidWorks, включающая в себя: основание в виде плиты с отверстиями для крепления к столу вибростенда, вертикальные боковые стенки с угловыми направляющими для удержания корпуса спутника CubeSat, верхней горизонтальной крышки с отверстиями для установки датчиков виброметра на корпус спутника, а также вертикальных задней и передней крышек, при снятии, которых, спутник может помещаться в ИТПК, и, фиксаторы направляющих.



А) Б)

Рис. 1. Разработанный в Научно-образовательном центре АмГУ имитатор транспортно-пускового контейнера (А) и его трехмерная модель (Б).

Габаритные размеры ИТПК составляют 500,00x270,70x440,00 мм, масса 18,47 кг. Материал основания, стенок и крышек: алюминий марки АМг2М. В таблице 1 приведены размеры и масса составных частей ИТПК.

Таблица 1

Расчетные собственные частоты колебаний ИТПК

Составные части	Размеры, мм (д-ш-в)	Масса, кг
Основание	500,00x440,00x10,00	4,09
Правая вертикальная стенка	424,20x250,70x30,00	2,53
Левая вертикальная стенка	424,20x250,70x30,00	2,53
Вертикальная передняя крышка	310,70x250,70x10,00	2,1
Вертикальная задняя крышка	310,70x250,70x30,00	2,26
Верхняя горизонтальная крышка	310,70x484,50x10,00	2,57
Угловая направляющая	424,50x17,60x17,60	(0,32)*4=1,28
Фиксатор направляющих	230,70x20,00x20,00	(0,24)*2=0,48
Пластина фиксации	310,70x20,00x10,00	(0,17)*2=0,34

На рис. 2 представлен вид трехмерной модели имитатора транспортно-пускового контейнера в САПР SolidWorks при анализе собственных частот колебаний, а также фрагмент сетки на 3D-модели в виде равнобедренных треугольников для описания объемной поверхности.

Первой и основной процедурой механического анализа является модальный анализ, который предназначен для определения собственных частот и форм колебаний элементов конструкции. Знание собственных частот необходимо при конструировании деталей и узлов, чтобы избежать их возбуждения на одной из собственных частот в процессе эксплуатации [6].

Модальный анализ проводился для ИТПК в сборе. В табл. 2 приведены 18 мод собственных частотных колебаний ИТПК и соответствующие им величины расчетных значений в диапазоне от 479,49 до 2189,60 Гц. Крепление ИТПК осуществлялось через основание.

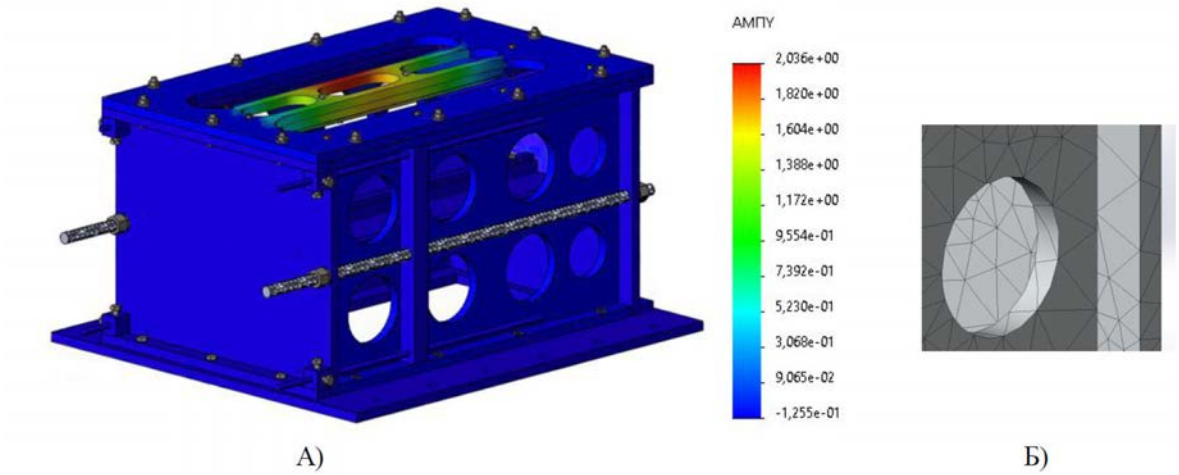


Рис. 2. Вид трехмерной модели имитатора транспортно-пускового контейнера в САПР SolidWorks, при анализе собственных частот колебаний (А) и фрагмента сетки на 3D-модели (Б).

Таблица 2

Расчетные собственные частоты колебаний ИТПК

Режим №	Частота, Гц	Задействованная масса в направлении оси Y, %
1	479,49	2,3022
2	793,08	10,7400
3	845,39	0,0018
4	914,11	0,0228
5	942,05	0,1515
6	1153,50	0,2950
7	1168,40	0,0665
8	1190,00	0,0088
9	1403,40	0,0018
10	1429,80	0,0036
11	1600,00	0,0078
12	1648,10	0,0339
13	1801,20	0,0838
14	1895,90	0,0141
15	1930,60	0,1197
16	2049,70	0,6574
17	2100,90	0,1447
18	2189,60	0,0837

Данные в табл. 2 представлены для направления вдоль оси Y, так как направление вынуждающей силы, создаваемой вибростендом используемом в лаборатории НОЦ АмГУ при проведении вибродинамических испытаний МКА – вертикальное.

Таким образом, в ходе выполнения работы в среде САПР SolidWorks была построена 3D-модель ИТПК и проведен расчет его собственных частот колебаний в диапазоне от 479,49 до 2189,60 Гц. Анализ данных показал, что максимальная задействованная эффективная масса составляет 10% на 2 моде с частотой 793,08 Гц. Полученные результаты свидетельствуют, что рассматриваемая конструкция ИТПК имеет достаточный запас прочности.

---

1. Патент на полезную модель № 201712 U1 Российская Федерация, МПК B64G 1/28. Многофункциональный блок полезной нагрузки наноспутника формата CubeSat 3U: № 2020116900: заявл. 12.05.2020: опубл. 29.12.2020 / Д.В. Фомин, Д.О. Струков, Р.А. Бузиков; заявитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Амурский государственный университет».

2. Modeling of three dimensional inhomogeneous thermal fields of nanosatellite electronic boards electronic / M.A. Barulina, A.V. Golikov, D.V. Fomin, D.O. Strukov // Information Systems. – 2018. – № 2 (17). – С. 22.

3. Методика расчета собственных форм и частот космического аппарата / И.Е. Глазков, А.Г. Филипов, В.А. Филатов, А.А. Соболев // Современные научные исследования и разработки. – 2018. – № 12(29). – С. 234-239.
4. Расчет собственных частот и форм колебаний конструкций в среде T-FLEX Анализ / А. Сущих, П. Ануфриков //САПР и графика. – 2004. – № 11.
5. Исследование величины деформации, напряжений и собственных частотных колебаний звездного датчика при эквивалентном инерционном нагружении / Р.В. Федорцев, Е.Ю. Рогожинский, К.В. Баркин, Д. В. Черенко // Приборы и методы измерений. – 2011. – № 2(3).
6. Дмитриев, В.С. Механический анализ исполнительного органа космического аппарата / В.С. Дмитриев, Т.Г. Костюченко, В.А. Скрипняк // Сборник трудов Томского политехн. Ун-та. – 2009.– С.135-139.

УДК 533: 612.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЫХАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

В.Ф. Ульянычева[1], Н.В. Ульянычев[2]
[1]Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
[2]Дальневосточный научный центр физиологии и патологии дыхания (г. Благовещенск)
nikolaj287@gmail.com

В рамках данной работы разрабатывается модель системы внешнего дыхания человека, которая позволила бы установить пробелы в физиологических знаниях, очертить связанный с ними круг проблем и предложить программу исследований и экспериментов, необходимых для устранения существующих пробелов.

RESPIRATORY MODELING

V.F. Ulyanycheva[1], N.V. Ulyanychev[2]
[1]Amur State University (Blagoveshchensk)
[2]Far Eastern Scientific Center of Physiology and Pathology of Respiration (Blagoveschensk)
nikolaj287@gmail.com

Within the framework of this work, a model of the human external respiration system is being developed, which would make it possible to identify gaps in physiological knowledge, outline the range of problems associated with them and propose a program of research and experiments necessary to eliminate the existing gaps.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.121-124

Математическое моделирование – важный этап на пути научного познания, касающегося сложной системы. Оно дает направление экспериментам, призванным выяснить истинные количественные зависимости, требует исправления исходных гипотез и таким путем должно привести к достаточно полной реальной модели, которая является теорией системы объекта. Иначе говоря, математическое моделирование изучаемых объектов является одним из наиболее важных и продуктивных инструментов системного анализа [1].

В соответствии с системным подходом функциональные системы представляют собой саморегулирующиеся организации, динамически и избирательно объединяющие центральную нервную систему и периферические органы и ткани на основе нервных и гуморальных регуляций для достижения полезных системе и организму в целом приспособительных результатов. Полезным для организма адаптивным результатом является в первую очередь поддержание гомеостаза.

Согласно этим определениям дыхательная система представляет собой функциональную систему, обеспечивающую газовый гомеостаз организма. Чрезвычайная сложность иерархической организации, многокомпонентность и многоконтурный характер регулирования ее работы определяют значительные трудности в анализе функциональных взаимосвязей отдельных подсистем, выявлении патофизиологических нарушений и их прогнозировании.

Первым этапом построения модели является формирование ее цели: что она должна отразить и для чего она (полная, частичная, для познания, прогнозирования, обучения, управления, реконструкции объекта).

Основной целью настоящей работы является построение такой модели системы внешнего дыхания человека, которая позволила бы установить пробелы в физиологических знаниях, очертить связанный с ними круг проблем и предложить программу исследований и экспериментов, необходимых для устранения существующих пробелов. Иначе говоря, главной задачей этой работы будет построение модели для изучения системы внешнего дыхания человека.

Исходя из самых общих представлений, систему внешнего дыхания будем рассматривать как совокупность трех взаимосвязанных подсистем: регуляции, газообмена, механики дыхания, объединенных одной общей задачей – поддержания нормальных значений парциальных давлений кислорода и углекислого газа в артериальной крови (рис. 1). Не детализируя пока места и роли каждой из этих подсистем и взаимосвязей между ними, перейдем непосредственно к их анализу. Вначале рассмотрим модель механики дыхания.

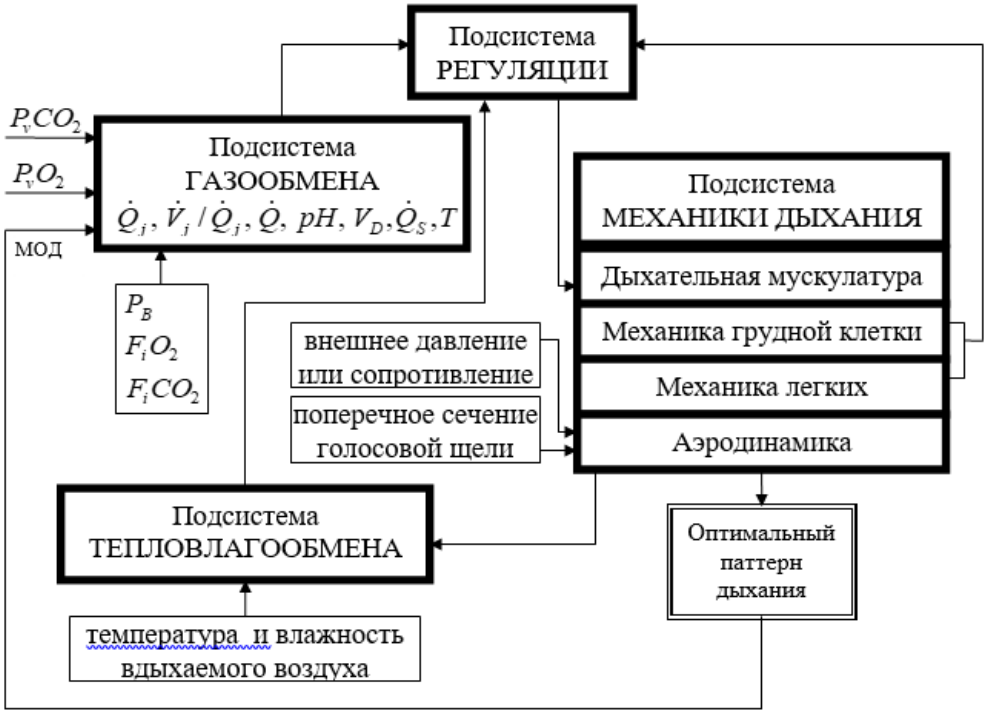


Рис. 1. Функциональная блок-схема внешнего дыхания человека.

Модель механики дыхания

Подсистема механики дыхания включает в себя два типа движения: первое – это движение грудной клетки, легких и абдоминальных структур под действием дыхательных мышц и второе – это движение воздуха по воздухоносным путям вследствие разницы между атмосферным и альвеолярным давлением, созданной в результате первого движения. Аэродинамическая задача о движении воздуха играет здесь подчиненную роль, поэтому решим ее первой.

Рассмотрим массу газа, которая в момент времени t занимает объем V, окруженный произвольной поверхностью S. Движение этой массы описывается уравнением (1):

$$\frac{d\vec{I}}{dt} = \int_V \vec{K} dV + \int_S \vec{T} dS \,, \tag{1}$$

где $\vec{I}$ – импульс газа как целого; $\vec{K}$ – объемные силы; $\vec{T}$ – поверхностные силы. Учитывая малость поверхностных диссипативных сил, можно считать, что

$$\int_S \vec{T} dS = \int_S P\vec{N} dS \,, \quad \int_V \vec{K} dV = -\vec{F}_{tr} \,, \tag{2}$$

где P – давление на S; $\vec{N}$ – внешняя нормаль к S; $\vec{F}_{tr}$ – суммарная сила трения в системе.

Подстановка в это уравнение полученных выражений дает вид:

$$\rho L \frac{dQ}{dt} + \frac{\rho Q^2}{S_o} = P_A S_o - 8\pi\eta Q A k - 0.3\sqrt[4]{v} \cdot \rho B \cdot \frac{\sqrt[4]{Q^7}}{\sqrt{S_1^3}} \,. \tag{3}$$

В терминах аэродинамических сопротивлений оно выглядит следующим образом:

$$\frac{\rho L}{S_o} \cdot \frac{dQ}{dt} + rQ = P_A \,, \tag{4}$$

где

$$r = \frac{\rho Q}{S_o{}^2} + \frac{8\pi\eta A k}{S_o} + \frac{0.3\sqrt[4]{v} \cdot \rho B \cdot \sqrt[4]{Q^3}}{S_o \cdot \sqrt{S_1{}^3}} \,. \tag{5}$$

В этом выражении первое слагаемое – сопротивление, связанное с необходимостью ускорения внешнего воздуха, второе – сопротивление ламинарному потоку, третье – сопротивление турбулентному потоку. Параметр S_o – поперечное сечение голосовой щели (для сопоставления с экспериментом все расчеты проводились при дыхании через пневмотахографическую трубку, т.е. через рот); A – величина обратная поперечному сечению мелких дыхательных путей; S_1 – поперечное сечение крупных дыхательных путей. В общем случае за S_o следует принимать суммарное поперечное сечение того участка дыхательных путей, где оно принимает наименьшее значение.

Полученные уравнения позволяют решать широкий круг физиологических задач в области механики дыхания. В частности, до настоящего времени значительные трудности представляет интерпретация кривых поток-давление. В соответствии с разработанной моделью основной физиологический механизм, обуславливающий характерную форму кривых, – это изменение размеров дыхательных путей во время выдоха. Исходные данные для расчетов возьмем согласно [2]:

$L = 0.3$ м, $A = 4 \cdot 10^3$ м$^{-2}$, $B = 0{,}08\ м \cdot м^{1/4}$, $S_1 = 3 \cdot 10^{-4}$ м^2.

Рассчитана зависимость между альвеолярным давлением и скоростью потока при форсированном выдохе и постоянных размерах дыхательных путей. Незначительно уменьшаются только поперечные сечения альвеолярных ходов в конце выдоха. Получено, что петля поток – давление имеет исчезающее малую ширину, что противоречит экспериментальным данным.

Данные, рассчитанные для случая, когда во время форсированного выдоха в семь раз уменьшается среднее суммарное поперечное сечение на уровне трахеи и трех первых генераций бронхов. Петля поток – давление расширяется, но не настолько, чтобы объяснить упомянутые экспериментальные данные. На рис. 2 изображена петля, рассчитанная для сужающейся во время форсированного выдоха голосовой щели. Размер ее поперечного сечения уменьшается в 5 раз, от 2 см до 0.4 см за время, равное 3/2 времени достижения максимального альвеолярного давления. Остальные размеры дыхательных путей во время маневра не меняются. Из рисунка видно, что петля приближается по форме к регистрируемым в эксперименте, причем максимум потока опережает по времени максимум давления.

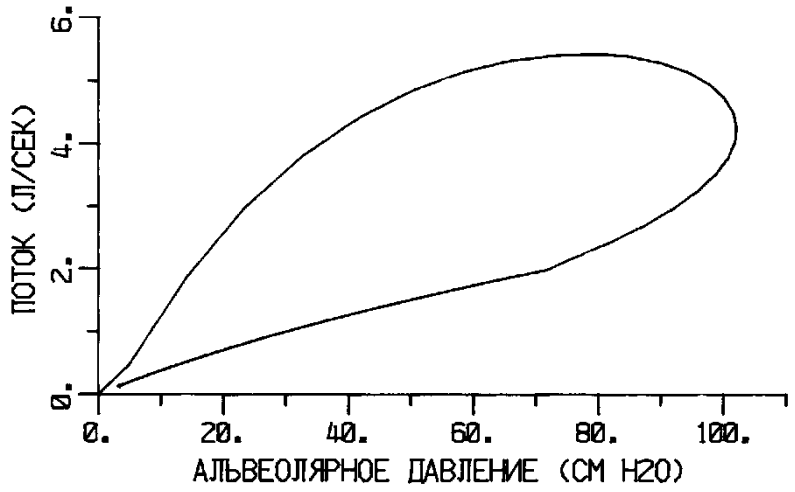


Рис. 2. Зависимость скорости потока от альвеолярного давления в случае, когда во время форсированного выдоха в пять раз уменьшается поперечное сечение голосовой щели при постоянных размерах внутригрудных дыхательных путей.

Влияние контрактации трахеи и крупных, а тем более мелких бронхов на размер и форму петли практически отсутствует. Однако, если мы по тем же исходным данным построим зависимость сопротивления от времени, то обнаружим, что ее форма не соответствует экспериментальным данным. Введя в расчет контрактацию трахеи и крупных бронхов, получим согласие с экспериментом и по поведению кривой аэродинамического сопротивления

Таким образом, мы показали, что определяющее влияние на форму кривой поток – давление оказывает сужение голосовой щели в начале форсированного выдоха. Чем значительнее это сужение и чем дольше длится, тем шире петля и тем более выражено запаздывание максимума давления по отношению к максимуму потока. Все это безусловно верно и для спокойного дыхания. На основе изложенного можно предположить, что определяющим механизмом изменения формы кривой поток-объем форсированного выдоха является не изменение размеров дыхательных путей, а рефлекторное изменение поведения голосовой щели.

Разработанная модель может оказаться полезной при анализе не только форсированного выдоха, но и спокойного дыхания, в том числе газами различной плотности, а также лечь в основу построения диагностических критериев и алгоритмов.

---

1. Ульянычев, Н.В. Системность научных исследований в медицине. – Saarbrücken: Lap Lambert Academic Publishing, 2014. – 140 с.

2. Вейбель, Э.Р. Морфометрия легких человека. – М.: Медицина, 1970. – 174 с.

УДК 534.6.08

ПРИМЕНЕНИЕ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ И ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ АКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

Р.Э. Шарыпов, В.И. Римлянд
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
2017104939@pnu.edu.ru

Разработан алгоритм автоматической обработки акустических сигналов с помощью автокорреляционной функции и вейвлет-преобразования. Алгоритм протестирован осциллограммах, полученных на эталонной установке 1-го разряда. Получены значения скорости распространения и коэффициента затухания продольных ультразвуковых волн в эталонном образце.

AUTOMATIC ACOUSTIC SIGNAL PROCESSING USING AUTOCORRELATION FUNCTION AND WAVELET TRANSFORM

R.E. Sharypov, V.I. Rimlyand
Pacific National University (Khabarovsk)
2017104939@pnu.edu.ru

An algorithm for automatic processing of acoustic signals using the autocorrelation function and wavelet transform has been developed. The algorithm is tested using oscillograms obtained on a state primary standard setup. The values of the velocity the attenuation coefficient of ultrasonic longitudinal waves in a reference sample are obtained.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.125-128

Акустические измерения в твердых средах находят широкое применение. В физике твердого тела с их помощью изучают фундаментальные свойства твердых тел: ангармонизм межатомного взаимодействия, структуру и свойства различных дефектов решетки, фазовые переходы, сверхпроводимость, магнитоупругие и акустоэлектрические эффекты и многое другое [1]. В технических приложениях наиболее обширная область применения акустических измерений относится к неразрушающему контролю [2].

Методы измерения скорости звука и коэффициента разнообразны и зависят от вещества, диапазона частот. Из всех распространенных методов импульсный [2] является наиболее точным и универсальным. Он позволяет весьма точно определять как скорость ультразвуковых волн, так и коэффициент затухания. Суть метода состоит в том, что в образце перпендикулярно его плоскопараллельным граням вводится ультразвуковой импульс (УЗИ). Наблюдая многократные отражения этого импульса от параллельных торцов образца, можно судить, как быстро в зависимости от времени и пройденного расстояния последовательно отражающиеся импульсы затухают по амплитуде.

Установка ИЗУ [3], уставленная в Дальневосточном филиале ФГУП ВНИИФТРИ предназначена для прецизионных измерений скорости распространения C_L и коэффициента затухания α продольных ультразвуковых волн в твердых средах эхо-импульсным и резонансным методами. Установка является государственным первичным эталоном [4], предназначенным для хранения и передачи единицы скорости распространения продольных УЗ волн в твердых средах рабочим эталонам и средствам измерений.

Блок-схема установки при работе в эхо-импульсном режиме показана на рис. 1. Радиоимпульс, формируемый генератором радиоимпульсов, с помощью возбуждающего емкостного преобразователя преобразуется в акустические колебания среды-образца. Переотраженные в образце ультразвуковые импульсы регистрируются приемным емкостным преобразователем. Сигнал с приемного емкостного преобразователя через предусилитель и полосовой усилитель подается на вход цифрового запоминающего осциллографа (ЦЗО) – LeCroy WaveSurfer 422 [5]. На емкостные преобразователи подается постоянное поляризующее напряжение.

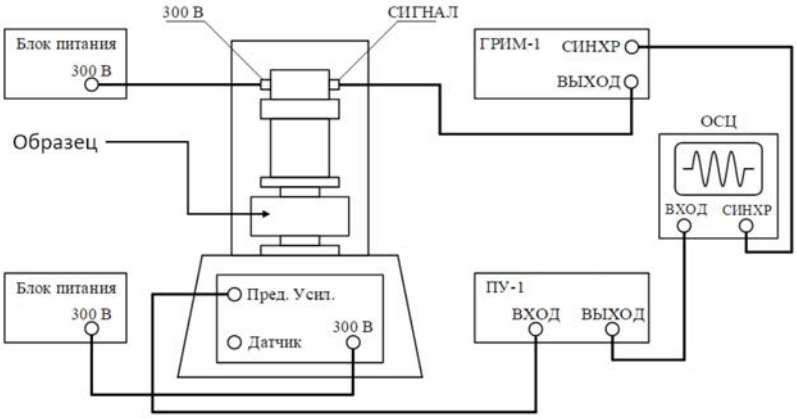


Рис. 1. Блок-схема установки ИЗУ.

С помощью ЦЗО производится контроль амплитудно-временных параметров УЗИ и измерения временных интервалов t_{nm} между УЗ импульсами и отношения амплитуд импульсов A_{nm}. Запуск ждущей развертки ЦЗО синхронизован с выходным сигналом генератором радиоимпульсов. Переотраженные УЗ импульсы регистрируются в режиме работы ЦЗО «усреднение», которое существенно повышает отношение сигнал-шум.

При измерениях t_{nm} и A_{nm} с помощью осциллографа используется метод совмещения импульсов на экране ЦЗО, при этом оператор установки вносит неконтролируемую погрешность в измерения, и поэтому такой метод сложно назвать объективным.

Скорость распространения продольных волн C_L вычисляется по формуле

$$C_L = \frac{2d(m-n)}{t_{nm}} + \Delta C_{\text{диф}}, \quad (1)$$

где d – толщина образца; n, m – номера импульсов; $\Delta C_{\text{диф}}$ – дифракционная поправка.

Коэффициент затухания продольных ультразвуковых волн с вычисляется по формуле:

$$\alpha_L = \frac{A_{nm} - \Delta A_{\text{диф}}}{2d(m-n)}, \quad (2)$$

где $A_{nm} = 20 \lg \frac{A_n}{A_m}$ – ослабление импульсов с номерами n и m; $\Delta A_{\text{диф}}$ – дифракционная поправка.

Для тестирования алгоритма было собрано 48 осциллограмм для одного образца из алюминиевого сплава Д16 на частотах заполнения радиоимпульса 2,5 – 32 МГц с частотой следования 100 Гц.

Типичная осциллограмма акустического сигнала приведена рис. 2.

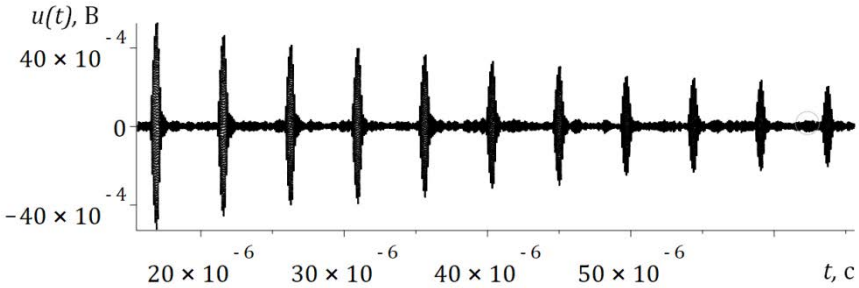


Рис. 2. Осциллограмма при $f = 10$ МГц.

Представлен сигнал, полученный при частоте радиоимпульса $f = 10$ МГц. По вертикальной оси – напряжение в вольтах, по горизонтальной – время в сек. Продолжительность сигнала – 50 мкс, время дискретизации аналого-цифрового преобразователя осциллографа – 0,5 нс.

Первый способ автоматизации измерений основывается на вычислении автокорреляционной функции. Считая экспериментальный сигнал $u(t) \in \mathbb{R}$, получаем аналитическую формулу для вычисления автокорреляционной функции $R_{uu}(\tau)$ сигнала [6]:

$$R_{uu}(\tau) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T u(t)u(t+\tau)\mathrm{d}t\,. \quad (3)$$

Опираясь на математические свойства автокорреляционной функции, можно вычислить интервал t_{nm} между импульсами путем непосредственного анализа R_{uu}, откуда по формуле (1) вычисляется скорость звука. Однако для вычисления A_{nm}, и, следовательно, коэффициента затухания, необходима информация об амплитудах в исходном сигнале, которая теряется при интегрировании. Чтобы эту проблему обойти, исходный сигнал специальным образом «сопоставляется» с его автокорреляционной функцией.

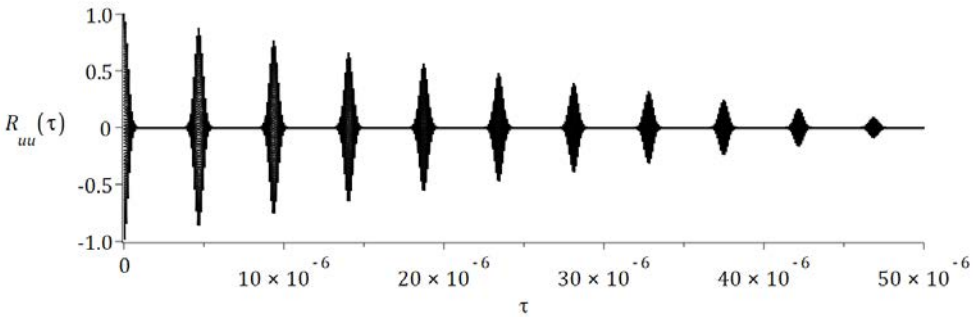


Рис. 3. Автокорреляционная функция сигнала, изображенного на рис. 2

Второй способ автоматизации основывается на вейвлет-преобразовании [7] сигнала $u(t)$:

$$W(a,b) = w(a)\int_{-\infty}^{\infty} u(t)\psi^*\left(\frac{t-b}{a}\right)\mathrm{d}t, \quad a,b \in \mathbb{R}, a \neq 0, \quad (4)$$

где $w(a)$ – весовая функция; $\psi(\frac{t-b}{a})$ – материнский вейвлет. В качестве материнского вейвлета был выбран вейвлет Морле [8], который задается следующей формулой

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{t^2}{\alpha^2}\right)\exp(i\omega t) = \exp\left(-\frac{t^2}{\alpha^2} + i\omega t\right), \quad (5)$$

где α – пропускная способность; ω – центральная частота. Временной интервал между импульсами определяется путем анализа действительной части $W(a,b)$ – локальный максимум вейвлет-преобразования соответствует положению импульса. Для получения ослабления A_{nm} также необходимо «сопоставить» исходный сигнал и его вейвлет-преобразование.

На основе разработанных алгоритмов создано на языке C++ программное обеспечение, позволяющее на основе цифровых осциллограмм рассчитывать C_L и α.

В таблице приведены результаты расчетов для обоих методов для различных частот f, из которой видно, что методы дают схожие результаты. В качестве погрешности выступает стандартное отклонение при обработке пакета осциллограмм. Значения C_L и α при этом для обоих методов лежат в пределах погрешности.

Таким образом, разработанный алгоритм позволяет находить C_L и α как при помощи автокорреляционного метода, так и при помощи вейвлет-преобразования. Оба предложенных метода дают близкие значения исследуемых величин с сопоставимыми величинами стандартного отклонения. Главным преимуществом такого подхода является объективность – зная внешние экспериментальные параметры, всегда можно получить скорость и коэффициент затухания по зафиксированному сигналу.

Сравнение методов расчета C_L и α

f, МГц	Автокорреляционный метод				Метод вейвлет-преобразования			
	C_L, м/с	ΔC_L, м/с	α, дБ/м	$\Delta\alpha$	C_L, м/с	ΔC_L, м/с	α, дБ/м	$\Delta\alpha$
2.5	6411.94	0.34	15.2	0.2	6412.21	0.23	15.1	0.2
5	6416.08	0.86	14.0	0.4	6416.08	0.88	14.0	0.5
10	6416.14	0.20	22.5	1.1	6416.03	0.30	22.9	1.1
16	6419.09	0.24	37.4	1.2	6418.10	0.95	37.6	1.1
20	6417.85	0.56	53.5	1.7	6415.21	2.22	51.0	2.6
32	6407.93	9.11	127.3	11.5	6406.59	4.08	109.1	9.3

1. Труэл, Р. Ультразвуковые методы в физике твердого тела / Р. Труэл, Ч. Эльбаум, Б. Чик. – М.: Мир, 1978.

2. Неразрушающий контроль. Справочник: В 7 т. / под общ. ред. В.В. Клюева. – Т. 3. Ультразвуковой контроль / И.Н. Ермолов, Ю.В. Ланге – М.: Машиностроение, 2004. – 864 с.

3. ВНИИФТРИ. Руководство по эксплуатации. Установка для измерения скорости распространения и коэффициента затухания продольных ультразвуковых волн в твердых средах ИЗУ-3. – Хабаровск, 2017.

4. ГЭТ 189-2014. Государственный первичный эталон единиц скоростей распространения и коэффициента затухания ультразвуковых волн в твердых средах: сайт ин-та ВНИИФТРИ. – Режим доступа: https://www.vniiftri.ru/standards/vibroakusticheskie-izmereniya-izmereniya-akusticheskikh-i-gidroakus ticheskikh-velichin/get-189-2014-gosudarstvennyy-pervichnyy-etalon-edinits-skorostey-rasprostraneniya-i-koeffitsienta-za (дата обращения: 20.05.2021).

5. LeCroy. WaveSurfer Oscilloscope Operator's Manual: руководство по эксплуатации. – Режим доступа: http://cdn.teledynelecroy.com/files/manuals/ws-om-e_rev_b.pdf (дата обращения: 20.05.2021).

6. Aussel, J.-D. Precision laser-ultrasonic velocity measurement and elastic constant determination / J.-D Aussel, J.-P. Monchalin // Ultrasonics. – 1989. – V. 27(3). – P. 165-177.

7. Addison, P.S. The illustrated wavelet transform handbook: introductory theory and applications in science, engineering, medicine and finance // CRC press – 2017.

8. Kronland-Martinet, R. Analysis of sound patterns through wavelet transforms / R. Kronland-Martinet, J. Morlet, A. Grossmann // International Journal of Pattern Recognition and Artificial Intelligence – 1987. – № 01(02). – P. 273-302.

Секция 6

Физическое образование

УДК 378

ИГРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ОБУЧЕНИИ ФИЗИКЕ НА ПРИМЕРЕ ПРОСТОЙ ИГРЫ «BURST IT» ПО ТЕМЕ «ОТРАЖЕНИЕ И ПРЕЛОМЛЕНИЯ СВЕТА НА ГРАНИЦЕ СРЕДЫ» С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИГРОВОГО ДВИЖКА UNITY

В.Л. Дубов, О.В. Ефимова
ФГБОУ ВО Амурский государственный университет (Благовещенск)
7dubov7@mail.ru

Представлен простой пример построения занятия по теме «Отражение и преломления света на границе среды» с использованием игровых технологий. Показана возможность создания курса «Геометрическая оптика» на основе разрабатываемой игры «BURST IT» с помощью игрового движка Unity.

GAME TECHNOLOGIES IN LEARNING PHYSICS ON THE EXAMPLE OF SIMPLE GAME "BURST IT" ON THE TOPIC "REFLECTION AND REFRACTING OF LIGHT AT BOUNDARY OF ENVIRONMENT" USING UNITY GAME ENGINE.

V.L. Dubov, O.V. Efimova
Amur State University (Blagoveshchensk)
7dubov7@mail.ru

The simple example of constructing the lesson on topic «Reflection and Refraction of Light at Border of Environment» using game technologies is presented. The possibility of creating a course «Geometric Optics» based on developed game "BURST IT" using the Unity game engine is shown.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.129-131

С бурным развитием технологий в жизнь школьников и студентов активно вошли гаджеты. Чаше всего наличие телефонов и планшетов у учащихся во время образовательного процесса сказывается отрицательно на качестве знаний и успеваемости. Поэтому большинство преподавателей требуют, чтобы учащиеся отключали и убирали гаджеты. В некоторых случаях телефоны складываются в особые ящики на время занятий. Однако привязанность учащихся к своим телефонам можно плодотворно использовать в образовательном процессе. Одним из вариантов такого использования являются «серьезные игры» [1]. Серьезная игра – это игра, основной целью которой является не развлечение, а усвоение определенных компетенций [1]. Прилагательное «серьезный» обычно добавляется к видеоиграм, используемым в таких отраслях, как оборона, образование, научные исследования, здравоохранение, управление чрезвычайными ситуациями, городское планирование, инженерия и политика [1]. В ходе серьезной игры учащиеся приобретают знания и навыки в ситуациях приближенных к реальным без каких либо последствий, к которым могут привести ошибочные решения. Использование

игр дает в образовательном процессе значительный прирост качества знаний и навыков обучающихся [2]. В работе [2] было показано, что учащиеся группы игрового обучения могли контролировать свою учебу, были значительно более заинтересованы, сконцентрированы, чем учащиеся группы неигрового обучения. Также авторами [2] указана роль подкрепления положительных эмоций при освоении новых знаний. В современном мире игровые технологии используются во многих образовательных учреждениях [3, 4] при обучении таким предметам, как математика [5], информатика [6], химия [7], физика [8].

В данной работе на основе простого примера показан вариант применения игровых технологий при изучении темы «Отражение и преломления света на границе среды». Геймплей игры «BURST IT» представляет собой разновидность широко известного жанра «Попади в цель». Стрельба осуществляется из лазерной башни по мыльному пузырю, однако в отличие от других представителей жанра, сложность заключается в том, что цель находится в среде с определенным показателем преломления, и луч преломляется на границе среды. Необходимо подобрать угол наклона дула башни так, чтобы луч, преломившись на границе среды, точно попал в цель.

Занятие с использованием игры строится следующим образом:

объясняются законы отражения и преломления света на границе среды;

демонстрируются с помощью игры явления отражения и преломления (рис. 1), и показываются примеры решения задач на данную тему;

дается задание по вариантам построить график угла преломления в зависимости от угла падения и определить показатель преломления среды;

проводится соревнование среди учащихся, кто больше наберет очков за определенное время. Победитель награждается дополнительной оценкой «отлично».

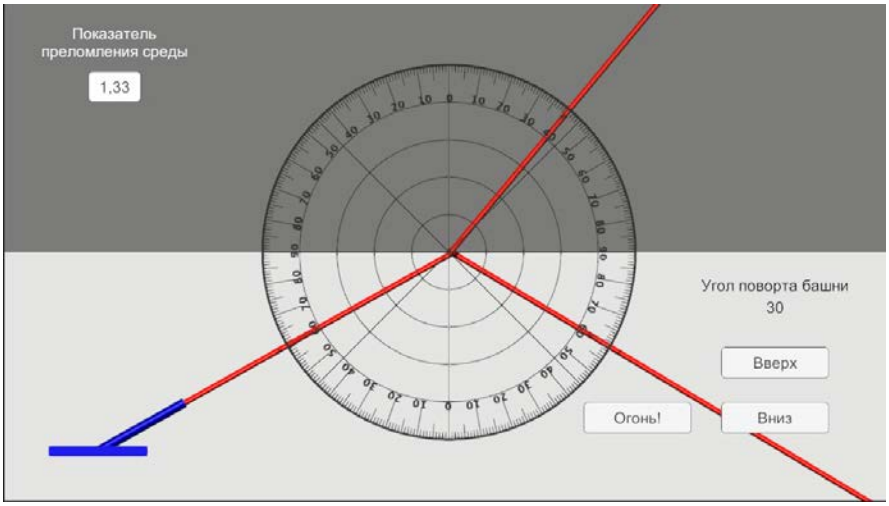


Рис. 1. Вариант демонстрации преломления и отражения света на границе среды с показателем преломления 1,33.

Данный подход позволит сформировать качественное представление поведения луча при явлениях отражения и преломления света на границе среды, а также уменьшить зависимость от приборной базы при формировании экспериментальных компетенций.

Основным плюсом подхода служит положительное эмоциональное подкрепление за счет игры и соревновательного элемента.

На основе данной игры можно в дальнейшем создать головоломку с несколькими телами как полностью отражающими, так и полупрозрачными. Дополнительно можно реализовать явления отражения и преломления на границе двух сред, затухания света в среде, полного внутреннего отражения, двойного лучепреломления, отражения луча от зеркал разной формы и прохождения лучей через

различные линзы и системы линз, распространения света в средах с переменным показателем преломления. Этого будет достаточно, чтобы полностью закрыть курс геометрической оптики в школе и часть курса в средних и высших учебных заведениях. В таком случае лабораторные и практические работы студенты смогут выполнять на любом устройстве, в любое время и в любом месте, в том числе и удаленно. Это актуально как для людей с ограниченными возможностями, так и во времена эпидемиологических заболеваний.

Стоит указать на возможность дополнительного контроля за обучающимися, так как в таком случае можно вести логи их работы и выполнения заданий, а также автоматизировать выставление оценок и поощрений за достижения в этой серьезной игре.

Необходимо упомянуть, что правильно построенная система уровней с постоянно усложняющей системой головоломок позволит привлечь большую аудиторию любящих головоломки людей, которых не интересует ни оптика, ни наука, однако играя в «BURST IT», они получат базовые знания о явлениях распространения света.

---

1. Djaouti, D., Alvarez, J., Jessel, J.P. Classifying serious games: the G/P/S model // Handbook of research on improving learning and motivation through educational games: Multidisciplinary approaches. – IGI Global. – 2011. – С. 118-136.
2. Chang, C. C. et al. Is game-based learning better in flow experience and various types of cognitive load than non-game-based learning? Perspective from multimedia and media richness // Computers in Human Behavior. – 2017. – Т. 71. – С. 218-227.
3. Perttula, A. et al. Flow experience in game based learning–a systematic literature review //International Journal of Serious Games. – 2017. – Т. 4, № 1.
4. Giannakas, F. et al. A critical review of 13 years of mobile game-based learning // Educational Technology Research and Development. – 2018. – Т. 66,– № 2. – С. 341-384.
5. McLaren, B.M. et al. A computer-based game that promotes mathematics learning more than a conventional approach //International Journal of Game-Based Learning (IJGBL). – 2017. – Т. 7, № 1. – С. 36-56.
6. Maurício, R.A. et al. A systematic mapping study on game-related methods for software engineering education // Information and software technology. – 2018. – Т. 95. – С. 201-218.
7. Sari, S. et al. Using android-based educational game for learning colloid material // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing. – 2017. – Т. 895, № 1. – С. 012012.
8. Yu, J., Denham, A. «May Force be with You», Disciple Training in Physics through Game-based Learning // EdMedia+ Innovate Learning. – Association for the Advancement of Computing in Education (AACE). – 2021. – С. 514-518.

УДК 53.05

ПРИМЕНЕНИЕ АКТИВНЫХ ФОРМ ОБУЧЕНИЯ В ФИЗИКЕ КАК СПОСОБ РАЗВИТИЯ ИНЖЕНЕРНОГО МЫШЛЕНИЯ

А.В. Казарбин[1], Ю.В. Лунина[2]

[1]Тихоокеанский государственный университет, (г. Хабаровск)

000283@pnu.edu.ru

[2]Хабаровский технический колледж, (г. Хабаровск)

lunina2110@mail.ru

В статье авторы рассматривают применение активных форм обучения в физике как способ развития инженерного мышления. Приводят сравнительный анализ исследовательского и проектного методов, а так же рассматривают важность применения физического эксперимента в образовательном процессе.

APPLYING ACTIVE FORMS OF LEARNING IN PHYSICS AS A WAY OF DEVELOPING ENGINEERING THINKING

A.V. Kazarbin[1], Yu.V. Lunina[2]
[1]Pacific State University, (Khabarovsk)
000283@pnu.edu.ru
[2] Khabarovsk Technical College (Khabarovsk)
lunina2110@mail.ru

In the article, the authors consider the use of active forms of education in physics as a way of developing engineering thinking. A comparative analysis of research and design methods is given, as well as the importance of using a physical experiment in the educational process is considered.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.131-135

Инженерное мышление должно опираться на хорошо развитое воображение и включает различные виды мышления: логическое, творческое, наглядно-образное, практическое, теоретическое, техническое, пространственное и др. Главные из них – творческое, наглядно-образное и техническое – являются основой всех остальные видов мышления.

Ведущая роль в формировании инженерного мышления принадлежит дисциплинам естественнонаучного цикла, среди которых наиболее значимым для развития конструкторских и изобретательских способностей является учебный предмет «Физика». Физика вносит наиболее существенный вклад в развитие у школьников/студентов мотивации к изобретательской деятельности (от ситуативных интересов до устойчивых мотивов, перерастающих в дальнейшем в ценностные ориентации и убеждения) и приобретение учащимися практического опыта различных видов конструкторской и изобретательской деятельности: изготовление физических моделей, конструкций и установок, преобразование бытовых приборов, выполнение домашних опытов и экспериментов, проведение комплексных исследований природных объектов и явлений, выполнение проектов технической направленности и др.

К сожалению, в настоящее время многие педагоги образовательных организаций профессионального образования (СПО и ВО) констатируют проблему несформированности у выпускников инженерного мышления. Эта проблема имеет глубокие корни и вызвана 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. Авторы обсуждали данную проблему в статье: «Профориентационная деятельность как фактор развития инженерного образования», где выявляли причины данного явления [1].

В рамках преемственности уровней образования целями которого является подготовка к поступлению студентов КГБ ПОУ «Хабаровский технический колледж» в ФГОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет на технические направления подготовки в колледже отдается предпочтение внедрению проектного и исследовательского методов в обучение студентов по предмету «Физика».

Исследовательский и проектный методы – это активные методы обучения, они мотивируют учащихся к самостоятельному, инициативному и творческому освоению учебного материала в процессе познавательной деятельности. Интеграция этих двух методов в форме проектно-исследовательской работы позволит интенсифицировать техническое и творческое развитие студентов.

Рассмотрим и проанализируем педагогическую сущность данных методов на основе выделенных нами критериев (таблица).

Сравнительный анализ проектного и исследовательского метода

Параметр	Исследовательский метод	Проектный метод
Основные понятия	**Исследование –** (буквально исследование изнутри») в предельно широком смысле – поиск новых знаний или систематическое расследование с целью установления фактов. **Учебное исследование** – творческая субъективно новая задача, которую обучающиеся еще не решали.	**Проект** – деятельность, направленная на выполнение какого-либо замысла или плана. **Учебный проект** – совместная учебно-познавательная, творческая или игровая деятельность учащихся-партнеров, имеющая общую цель, согласованные методы, способы деятельности, направленная на достижение общего результата по решению какой-либо проблемы, значимой для участников проекта.
Прогнозирование	Исследование находится в принципиально неподдающейся никакому прогнозированию составляющей [2].	Проектирование разворачивается и развивается в основном в рамках предсказуемой, «детерминированной» составляющей [2].
Сущность	Исследование не предполагает создания какого-либо заранее планируемого объекта, даже его модели или прототипа. Исследование – процесс поиска неизвестного, новых знаний, один из видов познавательной деятельности человека [3]. Исследовательская деятельность изначально более свободная, практически нерегламентированной какими-либо внешними установками. В идеале ее не должны ограничивать даже рамки самых смелых гипотез.	Проектирование – процесс разработки и создания проекта. Проект всегда ориентирован на практику. Проектирование изначально задает предел, глубину решения проблемы. Метод проектов предполагает составление четкого плана проводимых изысканий, с неизбежностью требует ясного формулирования и осознания изучаемой проблемы, выработку реальных гипотез, их проверку в соответствии с четким планом [4].
Этапы	постановка проблемы; изучение теории, посвященной данной проблематике; подбор методик исследования; сбор материала, его анализ и обобщение; научный комментарий; собственные выводы.	постановка проблемы; выработка концепции (гипотезы); определение целей и задач проекта, доступных и оптимальных ресурсов деятельности; создание плана; организация деятельности по реализации проекта;
Виды работ	*Учебное исследование* Цель: процесс поиска неизвестного, поиска новых знаний Степень анализа информации: полноценный процесс анализа информации Характер творческого процесса: максимальное проявление творчества личности	*Учебный проект* Цель: создание какого-либо заранее планируемого объекта, модели или прототипа Степень анализа информации: полноценный процесс анализа информации Характер творческого процесса: «творчество по плану»

Например, в ходе лабораторной работы «Изучение движения тела по окружности под действием сил упругости и тяжести» учащиеся определяют величину центростремительного ускорения шарика при его равномерном движении по окружности. Данную лабораторную работу можно дополнить исследовательскими заданиями:

1. Исследуйте влияние значения массы шарика на скорость вращения шарика.

2. Исследуйте влияние значения длины нити на скорость вращения шарика.

3. Предложите вариант собственного исследования, используя предложенные в лабораторной работе оборудовании.

Проектный метод, с нашей точки зрения, может быть реализован при выполнении разнообразных практико-ориентированных заданий (мини-проектов), решение которых связанно с повторением и осознанием пройденного материала, так и с самостоятельным поиском и изучением дополнительной информации.

Приведем пример такого задания: «Уезжая в длительную командировку, вы оставляете домашнего питомца дома. Требуется обеспечить его питьевой водой». В данном случае, важно чтобы

сюжет задачи быть воспринят учащимися с точки зрения физики, для чего необходимо выделить время (для осмысления и актуализации знаний, для объяснений хода мысли конструктора). При выполнении задания учащимся необходимо найти и изучить существующие способы решения проблемы, составить возможные варианты схемы питьевого устройства, его конструирования и дальнейшего представления аудитории.

Отдельно хотелось бы оговорить роль физического эксперимента в применении, как в проектном, так и в исследовательском методе обучения. В преподавании физики физический эксперимент – неотъемлемая часть изложения материала. В методическом отношении демонстрации делают всякое явление более ясным для слушателей, чем при словесном его описании, и содействуют более легкому усвоению и запоминанию фактов. Хорошо поставленная демонстрация повышает интерес слушателей, действуя не только на их умственную и эмоциональную деятельность, но и воображение. Основными качествами физического эксперимента являются гибкость и способность отражать нововведения, как научные (в процессе проведения опыта), так и педагогические (в методике обучения проведению эксперимента), о чем свидетельствуют работы российских исследователей в области физического эксперимента [5, 6]. В процессе обучения важно не забывать, что за различными уравнениями и вычислениями учащиеся могут совсем упустить из виду природу тех явлений, которые описываются этими уравнениями. Лабораторный практикум по физике является одной из самых активных форм изучения физики. Он позволяет студентам наблюдать физические явления в разных условиях, выявлять их закономерность, знакомиться с техническими свойствами и методами изучения физических явлений. Лабораторные работы дают возможность усовершенствовать, развить и углубить полученные ранее первоначальные представления, довести их до уровня понимания и твердых знаний. Кроме того, подобная деятельность развивает элементы самостоятельности, навыки в обращении с аппаратурой для решения поставленных задач.

При проведении демонстрационного эксперимента можно руководствоваться: наблюдением того или иного явления, проверкой выдвинутой гипотезы, выявлением физических закономерностей и проверкой вытекающих из них последствий. Особое место занимают опыты, на основе которых формулируются основные физические понятия, раскрывается сущность законов, физических гипотез и законов (например, опыты Фарадея, Эрстеда). Значительное место в преподавании физики занимают также опыты, имеющие вспомогательный характер или подготавливающие учащихся к восприятию нового материала, проблемные опыты, усиливающие познавательную активность учащихся.

По характеру физического практикума выделяют несколько видов работ. Работы технического типа знакомят студентов с измерительной техникой, методикой измерения физических величин. Работы репродуктивного типа, приступая к которым студенты из лекционного курса знают заранее каким должен быть результат, ограничивают возможность для развития творческого мышления. При выполнении работ репродуктивно-исследовательского типа обучающиеся ясно представляют себе закономерности использования явлений, однако им заранее неизвестен результат работы. Работы этого типа (а это большинство работ по измерению различных коэффициентов, величин) воспитывают у исполнителей способность к критическому анализу полученных результатов. Учебно-исследовательские, курсовые проекты представляют собой работы исследовательского типа, в которых ставится лишь проблема, а методику экспериментального решения и необходимое оборудование студент подбирает сам.

Анализ работ других авторов [3, 4, 5, 6] о месте и роли эксперимента, позволяет сделать вывод о том, что современный научный опыт относится к сложным научным методам. В настоящее время и наблюдения, и экспериментальные исследования невозможно представить без использования компьютерных технологий, особенно в научном эксперименте. Современный студент, осваивающий экспериментальный метод познания, должен познакомиться с особенностями проведения как классических, так и современных физических экспериментов.

Благодаря демонстрациям и лабораторному практикуму студенты осознают реальность изучаемых явлений, законов, процессов, осваивают методы физического эксперимента.

Главная цель проектных и исследовательских заданий – это развитие технического, исследовательского и творческого потенциала студентов, приобретение новых знаний и умений, а также опыта конструкторской деятельности. Таким образом, можно сделать вывод о том, что проектно-исследовательская деятельность студентов является основой подготовки высококвалифицированных инженерных кадров.

---

1. Казарбин, А.В., Лунина, Ю.В. Профориентационная деятельность как фактор развития инженерного образования // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование. Материалы XVI региональной научной конференции / под ред. А.И. Мазура. – 2018. – С. 257-260.
2. Поливанова, К.Н. Проектная деятельность школьников. – М.: Просвещение, 2011.
3. Леонтович, А.В. Об основных понятиях концепции развития исследовательской и проектной деятельности учащихся // Исследовательская работа школьников. – 2003. – № 3.
4. Шамало, Т.Н. Теоретические основы использования физического эксперимента в развивающем обучении. – Свердловск: Свердловский гос. пед. ин-т, 1990.
5. Оспенникова, Е.В. Методологическая функция виртуального лабораторного эксперимента // Информатика и образование. – 2002. – № 11.
6. Оспенников, Н.А. Школьный физический эксперимент в условиях компьютерных технологий // Вестник ПГПУ. – 2006. – № 2. – С. 48-77.
7. Баженова, И.И., Романько, Д.В. Выполнение индивидуального проекта как одно из современных требований к результатам образования школьников // Педагогическое образование в России, – 2016. – № 8.

УДК 53.087

РОЛЬ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА В ФОРМИРОВАНИИ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ

И.Б. Копылова
Амурский государственный университет (Благовещенск)
kopylovaib@mail.ru

Получение практических навыков профессиональной деятельности выпускников высших учебных заведений является актуальной задачей обучения. Формирование соответствующих профессиональных компетенций происходит как при прохождении различных видов практики, так и в ходе учебного процесса.

THE ROLE OF LABORATORY PRACTICE IN THE FORMATION OF PROFESSIONAL COMPETENCIES

I.B. Kopylova
Amur State University (Blagoveshchensk)
kopylovaib@mail.ru

Obtaining practical skills of professional activity of graduates of higher educational institutions is an urgent task of training. The formation of appropriate professional competencies occurs both during the passage of various types of practice, and during the educational process.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.135-137

В настоящее время требования к подготовке специалистов по программе бакалавриата значительно возросли, что отражается в формировании профессиональных компетенций различных технических и прикладных направлений подготовки.

При формировании учебных планов наблюдается тенденция сокращения практических и лабораторных занятий, что способствует поиска новой организации занятий и повышению эффективности данного вида работ. Закрепление теоретического материала происходит именно при решении практических задач, результаты можно использовать при проектировании технических устройств или разработке технологических процессов. В ходе выполнения лабораторного практикума формируется навыки работы с различными установками, приборами, математической обработкой результатов измерения, использования средств компьютерной техники для обработки результатов и построения различных зависимостей и графиков. Происходит формирование перечисленных навыков в течение всего периода освоения дисциплины под непосредственным руководством преподавателя.

Цели и задачи лабораторного практикума формируются исходя из целей освоения дисциплины и формирования компетенций различных уровней, которые прописываются в образовательных стандартах. Например, при формировании профессиональных компетенций направления подготовки «физика» от выпускника требуется умения и навыки использования различных видов аппаратуры, методов сбора и анализа информации, математической обработки результатов, знание методов планирования эксперимента и внедрение результатов работы в практические разработки [1].

Методика организации лабораторного практикума всегда связана с наличием определенного технического оснащения, важности в освоении определенного теоретического материла. Как правило каждая лабораторная работа включает определенный теоретический материал в более расширенном виде в соответствие с целью работы и задачами, которые необходимо решить в ходе выполнения лабораторной работы [2]. Поэтому, прежде чем выполнять лабораторную работу, необходимо изучить теорию.

Следующим этапом является выполнение эксперимента и получение результатов измерения. Именно на этом этапе формируются навыки работы с различными измерительными приборами и измерительными инструментами. Достаточно часто у студентов наблюдается полная беспомощность при первом знакомстве с оборудованием лабораторной работы, поэтому на этом этапе обязательна предварительная самостоятельная подготовка к выполнению лабораторной работы. Дальнейшее освоение происходит непосредственно на занятии под руководством преподавателя. Важным моментом является получение правильного значения измеряемой величины и определение погрешности результата.

Обработка полученных результатов предполагает использование современных методов и вычислительных устройств. Как правило, в работе указывается алгоритм обработки результатов, но студент может также воспользоваться различными прикладными программами для расчетов и построения графиков, а также обработки графического материала.

По результатам выполнения лабораторной работы необходимо сделать вывод. Умение представить результат и сформулировать выводы по полученным результатам также является необходимым элементом формирования профессиональных компетенций.

На последнем этапе предполагается защита лабораторной работы, где студент имеет возможность продемонстрировать уровень освоения теоретического материала, навык проведения измерений и использования технических средств, способность анализировать полученные результаты и делать выводы.

Условно все лабораторные работы можно разделить на следующие виды: расчетные, исследовательские и виртуальные. Как правило, большинство лабораторных работ включает и расчетный и

исследовательский элемент, что является наиболее рациональным при формировании лабораторного практикума для студентов высшей школы. Для студентов физиков наличие исследовательского элемента дополняется выполнением некоторых дополнительных заданий, которые помогают осваивать теоретический материал и формировать навыки самостоятельного исследования по заданной методике, что в дальнейшем позволит самостоятельно планировать и проводить научные исследования.

Виртуальные лабораторные работы можно проводить как непосредственно на занятиях, так и в удаленном режиме, что особенно актуально при использовании дистанционного обучения [3]. Основные преимущества виртуальных работ – это возможность использовать более сложного оборудования, освоение научных методик проведения эксперимента, визуализация изучаемого процесса, возможность обработки результатов непосредственно в программной среде лабораторной работы, анализа полученных результатов и выявление ошибок при проведении эксперимента. Этот вид работы требует наличие у студентов навыков самостоятельной работы, использования телекоммуникационных технологий, владения вычислительной техникой, прикладными программами. Поэтому этот вид лабораторного практикума лучше всего осваивается на старших курсах.

Таким образом лабораторный практикум решает множество задач по формированию как универсальных и общих, так и профессиональных компетенций у выпускника высшей школы

В то же время в программу обучения включаются разнообразные виды учебных практик: технологическая, производственная, научно-исследовательская и т.д. Роль практик трудно переоценить так как они чаще всего проходят на базе промышленных предприятий, исследовательских центров, различных промышленных лабораторий, где студент может непосредственно видеть уровень технического оснащения, изучать технологию получения того или иного промышленного продукта. При этом, как правило, сам студент не принимает непосредственно участия в данном процессе. В то же время у студента формируется представление о будущей деятельности и определяется интерес в определенных направлениях этой деятельности. Это дает возможность определить и направление исследовательской и научной деятельности в процессе обучения.

Практическая направленность обучения студентов является основным моментом в формировании профессиональных компетенций для студентов технических и инженерных направлений подготовки. Практические занятия, лабораторные работы, различные виды учебных практик являются неотъемлемым элементом успеха в обучении специалистов.

---

1. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 03.03.02 «Физика» (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 7 августа 2020 г. №891).

2. Маковкина, Л.Н. Значимость лабораторно-практических работ в учебном процессе / Л.Н. Маковкина, Е.И. Сорокина, Д.В. Сыроежкина // Педагогика сегодня: проблемы и решения. Материалы III Междунар. науч. конф. (г. Казань, март 2018 г.). – Казань: Молодой ученый, 2018. – С. 46-47.

3. Князева, Е.М. Лабораторные работы нового поколения // Фундаментальные исследования. – 2012. – № 6-3. – С.587-590.

УДК 378

ВОЗМОЖНОСТИ И РЕЗУЛЬТАТЫ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ

И.Б. Копылова
Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
kopylovaib@mail.ru

В статье анализируются возможности использования дистанционного обучения, результаты применения дистанционного обучения (ДО) в период пандемии. Приводятся результаты сравнительного анализа ДО и очной формы обучения на примере одного студенческого потока.

OPPORTUNITIES AND RESULTS OF DISTANCE LEARNING

I.B. Kopylova
Amur State University (Blagoveshchensk)
kopylovaib@mail.ru

The article analyzes the possibilities of using distance learning, the results of using distance learning (BEFORE) during the pandemic. The results of a comparative analysis of PRE-and full-time forms oeducation are presented on the example of one student stream.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.138-141

Дистанционное обучение как способ получения необходимых знаний и навыков в настоящее время внедряется практически во всех вузах страны. Необходимость применения этого вида обучения обусловлена многими факторами: необходимостью самосовершенствования и повышения квалификации людей, работающих в быстро развивающихся отраслях промышленности; востребованностью в получении образования людьми с ограниченными возможностями; получением второго высшего образования. Развитие информационных систем, коммуникаций, технических средств и образовательных платформ способствует внедрению дистанционного обучения в образовательный процесс.

Во многих вузах страны был проведен анализ востребованности такого вида обучения среди различных категорий обучающихся, а также пре1одавателей [1]. Наибольший процент востребованности такого вида обучения наблюдается у взрослых людей, которые четко представляют цели получения образования, более организованны и дисциплинированы. Студенты легче воспринимают введение такого вида обучения, так как современные выпускники школ очень мобильны и быстро осваивают новые информационные технологии, имеют навык работы в информационных сетях. Однако процент востребованности в дистанционных технологиях у них ниже.

Что касается преподавателей, то мнения разделились примерно поровну. Нужно заметить, что новые технологии обучения требуют от преподавателя и новых знаний и хорошего владения информационными технологиями, различными платформами электронного обучения. Составление конспектов лекций, практических заданий, тестов, проверка выполнения заданий и других видов работы в виртуальном пространстве требует значительного времени. Это особенно заметно, если преподаватель основную часть нагрузки ведет в очном режиме. Однако, все преподаватели отмечают возрастание интереса к освоению дисциплины, если имеются элементы электронного обучения.

У автора имеется опыт работы со студентами заочно-сокращенной формы обучения. Во время очной сессии таким студентам приходится выполнять большой объем работы, что приводит к перезагруженности студентов и снижению качества освоения дисциплин курса. Возможности дистанционного обучения позволяют заранее выполнить ряд заданий, исправить ошибки и получить зачет по выполненным заданиям. Размещение на сайте вопросов для промежуточной аттестации также позволяет планировать время для подготовки к экзамену или зачету. Таким образом во время сессии студент полностью сосредоточен на выполнении текущих заданий (лабораторных работ и т.д.) и подготовке к промежуточной аттестации по дисциплине.

Возраст студентов варьируется в широких пределах, но отличительной чертой таких студентов является повышенная мотивация для получения либо высшего образования, либо второго высшего образования. Повышение квалификации без отрыва от основной работы привлекает к дистанционной форме обучения широкий круг людей. Освоение новых информационных и коммуникационных технологий вызывает некоторые трудности у студентов, закончивших учебные заведения более десяти лет до поступления. Такие проблемы снимаются достаточно быстро при систематической работе в электронной среде обучения. Поэтому размещение учебных материалов и заданий в системе электронного обучения на известных обучающих платформах (Moodle) позволяет не только учиться, но и повышать уровень владения средствами компьютерной техники, телекоммуникационными технологиями, современными средствами связи, системой интернет.

Студенты очной формы обучения воспринимают достаточно легко переход на дистанционное обучение, они быстро ориентируются в виртуальном пространстве, но также быстро теряют интерес, потому что самостоятельное освоение различных дисциплин достаточно сильно отличающихся от школьного курса вызывает подчас недоумение и полное отрицание требований преподавателя к освоению дисциплины. Это говорит о трудностях при организации самостоятельной работы и отсутствии навыков в самообразовании.

Преподаватели также испытывают некоторые трудности при переходе на электронную форму обучения [2]. Прежде всего это разработка новых форм заданий наряду с традиционными, что требует значительного времени. Анализ эффективности выполнения заданий может быть проведен только после промежуточной аттестации, которая также проводится в удаленном режиме и не является полностью объективной без личностного контакта студента и преподавателя. С другой стороны, электронные средства дистанционного обучения значительно расширяют возможности преподавателя для разработки различного вида заданий, создания электронных курсов, работу в телекоммуникационной среде с использованием диалогового режима, видеоконференций, создание видео лекций.

Дистанционное обучение имеет как ряд преимуществ, так и ряд недостатков [3]. К достоинствам можно отнести: возможность учиться в удобном для студента режиме времени, без посещения вуза, возможность модульной организации освоения дисциплин, использование современных информационных и телекоммуникационных технологий, возможность получить образование людям с ограниченными возможностями, возможность постоянно повышать квалификацию, вуз может охватить большее число студентов.

Недостатками такого бучения также существуют: прежде всего это отсутствие личностного общения с преподавателем, получить консультацию и разъяснения по отдельным вопросам проблематично даже при работе в режиме online. У студентов нет возможности работать в команде, сравнить результаты своей работы с другими студентами. В свою очередь, преподаватель не может достаточно объективно контролировать уровень освоения материала, каждой конкретной темы, нет возможности обсудить и скорректировать подачу учебного материала. Нужно заметить также, что дистанционное обучение требует хорошего технического оснащения, современного программного обеспечения учебного процесса, возможности использования сети интернет.

Все положительные и отрицательные стороны дистанционного обеспечения особенно хорошо выявились в период пандемии, когда и преподаватели, и студенты были вынуждены общаться только в виртуальном пространстве [4].

Отсутствие у студентов самодисциплины, умения организовать самостоятельную работу привело прежде всего к тому, что студенты восприняли время изоляции как каникулы. Преподавателям очень сложно было организовать работу по изучению различных дисциплин в удаленном режиме.

Автор проанализировал результаты обучения одного из потоков студентов очной формы обучения в осеннем и весеннем семестрах 2020-2021 учебного года. В осеннем семестре занятия и промежуточная аттестация проводились в режиме дистанционного обучения, в весеннем семестре – в очном режиме. Контроль успеваемости и качества выполнения заданий в течении весеннего семестра показал, что данные показатели снизились на 10-15 % по сравнению с осенним семестром. Снизились и результаты промежуточной аттестации на 15-20 %.

В студенческих группах всегда имеются студенты, которые не посещают занятия не выполняют текущие задания и в лучшем случае, пытаются все сдать в конце семестра. Как показал анализ количество таких студентов не зависит от формы обучения, их процент составляет 10-15 % от списочного состава группы.

Для выполнения всех заданий, которые получает студент, преподаватель определяет сроки контроля (предоставления задания на проверку). Большинство студентов представляют задания в последние два дня до окончания срока – 80-85 %, а некоторые студенты и в последние два часа – 5 %. Некоторые студенты и после окончания срока – 5-10%. Как правило преподаватель вынужден продлевать срок контроля, это рационально делать, потому что должна быть мотивация к сдаче заданий для получения допуска к промежуточной аттестации и в том случае, когда у студента есть объективные причины. Продление срока контроля более чем на два-три дня является нерациональным, потому что необходимо сосредоточится на выполнении новых заданий. Причины задержки для предоставления задания можно выяснить в режиме общения со студентом по электронной почте или в чате. Данные замечания не касаются выполнения заданий или тестов в режиме online. Предполагается, что на выполнение таких заданий отводится ограниченное время и выполняются они в строго определенную дату без возможности повторного выполнения.

Интерпретировать результаты учебного года можно с различных точек зрения. С точки зрения преподавателя очный контроль является более объективным, так как заставляет студента серьезно готовиться к проверочным опросам и тестам. Студент не имеет возможности использовать шпаргалки и электронные ресурсы для получения правильного ответа. В личном беседе с преподавателем во время коллоквиумов, сдачи лабораторных работ, расчетно-графических заданий, защиты курсовых работ, сдачи зачетов и экзаменов выявляется степень освоения дисциплины, умение применять знания на практике.

В удаленном режиме студент имеет возможность воспользоваться телекоммуникационными технологиями для получения подсказки. Не секрет, что решения задач по многим дисциплинам можно найти в сети интернет, чем студенты активно пользуются при выполнении домашних заданий и расчетно-графических работ. Если преподаватель изменит только численные условия в задаче, то очень немногие студенты обращают на это внимание и приводят правильные ответ, остальные предоставляют то решение, которое нашли в сети. Это означает, что студент не освоил практическое применение основных формул и законов для решения практической задачи. Устранить этот недостаток можно только в аудитории. На практическом занятии в аудитории всегда присутствует элемент «мозгового штурма», работа в команде, присутствует элемент соревнования, что приводит к освоению материала большинством студентов.

Таким образом можно подвести итоги: дистанционное обучение как элемент очной формы обучения необходимо внедрять в учебный процесс. Наблюдается активация студентов при освоении дисциплины, формируется потребность в самостоятельной работе, умение поиска необходимой информации, навык работы с применением современных телекоммуникационных технологий.

1. Осипова, Л.Б., Горева, О.М. Дистанционное обучение в вузе: модели и технологии // Современные проблемы науки и образования. –2014. – № 5.

2. Лапшова, А.В., Сундеева, М.О., Татаренко, М.А. Дистанционные технологии обучения как ресурс повышения качества образования // Международный студенческий научный вестник. – 2017. – № 6.

3. Кузнецова, О.В. Дистанционное обучение: за и против // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2015. – № 8-2. – С. 362-364.

4. Копылова, И.Б. Проблемы и достижения современной системы электронного обучения // Материалы XVI региональной научной конф. – Хабаровск: Изд-во ТОГУ, 2018. – С. 266-268.

УДК 372.853

ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ УМЕНИЙ НА УРОКАХ ФИЗИКИ

И.В. Литовко
МОАУ СОШ № 1 г. Свободного (г. Свободный)
livirina@mal.ru

Представлены подходы к созданию условий для формирования исследовательских умений учащихся на уроках физики, что способствует развитию устойчивой мотивации, творческих способностей учащихся, их самореализации.

FORMATION OF RESEARCH SKILLS IN PHYSICS LESSONS

I.V. Litovko
MOAU Secondary school No. 1 of Svobodny (Svobodny)
livirina@mal.ru

The approaches to creating conditions for the formation of students ' research skills in physics lessons are presented, which contributes to the development of stable motivation and creative abilities of students, their self-realization.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.141-144

Главная особенность стандартов нового поколения – реализация системно-деятельностного подхода в обучении школьников. Важным стало не просто передать знания, а научить школьников овладевать новым знанием, новыми видами деятельности. Поэтому необходима организация такого процесса обучения ребенка, при котором каждый бы чувствовал себя нужным, ценным, успешным и достойным [1].

Физика занимает особое место среди школьных предметов, формируя мировоззрение учащихся, создавая представление о научной картине мира. Анализ анкетирования, проведенного среди учащихся 7-9 классов школы, показывает, что уровень познавательного интереса к предмету «физи-

ка» снижается к 9 классу, что вызвано высоким научным уровнем школьного курса физики. Уроки физики школьники воспринимают как учение по необходимости, высок ситуативный интерес к предмету, уровень повышенного познавательного интереса к предмету – низкий. При опросе учащихся выяснено, что при подготовке к уроку основное внимание они обращают на факты и законы, при повторении домашнего задания и объяснении нового материала у них часто вызывают затруднения вопросы, требующие умения применять различные мыслительные операции (сравнение, анализ, классификация, обобщение и др.) [2]. Это не обеспечивает развития интеллектуальных и творческих способностей учащихся, из самореализации. Разрешение данных проблем возможно через включение обучающихся в исследовательскую деятельность, что повысит мотивацию и эффективность учебной деятельности.

Под исследовательской деятельностью понимается деятельность, связанная с решением учащимися творческой, исследовательской задачи с заранее неизвестным решением и предполагающая наличие основных этапов, характерных для исследования: постановку проблемы; изучение теории, посвященной данной проблематике, подбор методик исследования и практическое овладение ими, сбор собственного материала, его анализ и обобщение, представление результатов [3].

В условиях современного урока исследовательскую деятельность учащихся можно организовать на всех этапах урока при изучении физической теории, решении задач, проведении демонстрационного эксперимента, выполнении лабораторной работы, проведении лабораторного опыта, выполнении домашнего эксперимента, решении практических вопросов, при подготовке проектов.

В 7 классе, когда учащиеся начинают знакомиться с новым учебным предметом, исследовательская деятельность организуется в форме групповой работы. Учащиеся класса разбиваются на группы по четыре человека. В описании задания-исследования учащимся отмечается, какое оборудование они должны использовать, в какой последовательности проводить исследование.

Например, при изучении темы «Движение частиц. Диффузия» учащимся предлагается задание «Исследуйте зависимость скорости диффузии от температуры». Предлагается следующее оборудование: стакан с горячей водой, стакан с холодной водой, марганцовка. Приведено описание выполнения исследования «В стаканы с холодной и горячей водой одновременно положите по крупинке марганцовки. Понаблюдайте, как меняется цвет воды в стаканах. Установите, почему. Сделайте вывод о зависимости скорости диффузии от температуры, обоснуйте его».

Учащиеся выполняют исследование по предложенному учителем плану, высказывают свои предположения о наблюдаемом явлении. Учителем на уроке заслушиваются выводы каждой группы, делается обобщенный вывод.

При проверке домашнего задания учащимся предлагается просмотреть видеосюжет с проведением данного исследования, звуковое сопровождение при этом выключено. После повторного включения учащимся предлагается вслух (в роли диктора) прокомментировать выполненное исследование, указан, какое оборудование использовалось, что исследовалось, какой результат получен и почему.

Постепенно уровень предлагаемых заданий-исследований усложняется: учащимся нужно самостоятельно подобрать оборудование или составить план проведения исследования.

Например, при изучении темы «Выталкивающая сила» учащимся предлагается задание «Исследуйте зависимость величины выталкивающей силы от объема тела». На партах размещено оборудование: динамометр, стакан с водой, два тела разного объема. Учащимся предлагается составить план проведения исследования, сделать вывод о зависимости величины выталкивающей силы от объема тела и обосновать его.

В конце 7 класса при выполнении задания-исследования учащимся предлагается заполнить Листок исследования, в который вносится выдвинутая гипотеза, цель и задачи исследования, план действий, вывод.

Одна из форм исследования – лабораторная работа, проводимая как индивидуально, так и в группах, может проходить по следующему плану:

1. Учитель сообщает проблему, для решения которой проводится исследование (задание для учащихся с высоким уровнем сформированности исследовательских умений).

2. Знания учащимся не сообщаются. Учащиеся самостоятельно их получают в процессе исследования. Средства для достижения результатов учащиеся выбирают сами, т.е. становятся активными исследователями (задание для учащихся со средним уровнем сформированности исследовательских умений).

3. Учитель управляет процессом исследований (задание для учащихся с низким уровнем сформированности исследовательских умений) [4].

В зависимости от уровня сформированности исследовательских умений учитель сам определяет тип задания-исследования. В последующем группы учащихся могут самостоятельно определить, какое задание они будут выполнять.

Описание лабораторных работ, приведенные в учебниках, уже поэтапно определяют план работы учащихся. Поэтому для учащихся с высоким и средним уровнем сформированности исследовательских умений предлагается описание работ, которые уже имеют исследовательский характер.

Во время урока-исследования деятельность учителя и учащихся связана с решением исследовательской задачи при выполнении следующих основных этапов: постановка проблемы, повторение теории, подбор приборов для исследования, обработка полученных результатов, анализ и выводы во время отчета о проведенном исследовании. При проведении уроков-исследований организуется работа по группам или в парах, могут использоваться разноуровневые задания.

Для формирования у обучающихся уважительного отношения к мнению одноклассников, воспитания терпимости, тактичности во время заслушивания отчетов о проведенном исследовании предлагается провести оценку по разработанным критериям для мини-исследования.

В объяснение нового материала целесообразно включать фронтальные опыты, которые учат школьников наблюдать и анализировать явления, способствуют развитию мышления. Например, перед изучением понятия скорости учащимся предлагается пронаблюдать за движением парафинового, пластилинового и свинцового шариков в стеклянных трубках с водой. При выполнении задания обучающиеся руководствуются указаниями, которые им даются в письменном виде. До выполнения задания школьники отвечают на вопросы (выдвигают гипотезы): Как вы думаете, какой из шариков будет двигаться быстрее? Какой медленнее? В результате выполнения опытов, их анализа, на основе сравнения обучающихся подводят к понятию скорости.

С целью развития мышления учащихся и развития их познавательной самостоятельности применяется эвристический прием проведения фронтальных лабораторных работ. Он предполагает проведение их до изучения соответствующего материала. Например, лабораторную работу по смешиванию холодной и горячей воды целесообразно проводить с целью установления уравнения теплового баланса. Ставится познавательная задача урока: имеется холодная и горячая вода, требуется на основе опыта установить, есть ли разница между количеством теплоты, отданном горячей водой и количеством теплоты, полученным холодной водой при смешивании воды. После постановки познавательной задачи обучающиеся высказывают свои предположения. Затем они выполняют экспериментальную часть работы. Далее учитель предлагает проанализировать полученные результаты и помогает обучающимся вопросами: на сколько градусов остыла горячая вода? Есть ли зависимость между массой воды и той разностью температур, которая наблюдается при нагревании и остывании воды? (80 грамм холодной воды нагрелось на 18°С, а 160 грамм горячей воды остыло на 9°С). Что можно сказать о произведении массы на разность температур для горячей и холодной воды? Далее учитель напоминает формулу, с помощью которой измеряется количество теплоты и предлагает учащимся сформулировать результат проделанной лабораторной работы.

Организация исследовательской деятельности не ограничивается рамками урока. Разработана модифицированная программа элективного предмета «Исследуем, изобретаем, измеряем». Содержание данной программы решает проблему социальной адаптации школьников посредством включения их в активную социально значимую исследовательскую деятельность, способствует накоплению опыта самостоятельного принятия решения, позволяет обрести школьникам уверенность в собственных личностных возможностях.

Учащиеся, участвующие в региональном этапе всероссийской олимпиады по физике, выполняют задания двух туров: теоретического и экспериментального. С целью подготовки к олимпиаде и выявления уровня развития исследовательских навыков учащихся с 2015 года в городе Свободном для обучающихся 7-11 классов проводится муниципальная олимпиада по физике «Решение экспериментальных задач». Используя предложенное оборудование, учащимся необходимо определить физические величины в трех заданиях.

Развитие исследовательских умений учащихся осуществляется и в рамках проектной деятельности. Школьниками подготовлены исследования по темам «Можно ли намагнитить гвоздь?», «Всегда ли преломляется свет в жидкостях?», «Сравнение силового действия магнитов», «Необычные источники тока», «Поверхностное натяжение растворов стиральных порошков», «Лампа светит» и другие. С результатами исследований школьники ежегодно выступают на муниципальных и региональных научно-практических конференциях.

Организация исследовательской деятельности – один из способов формирования устойчивой мотивации учащихся не только в рамках урока, но и внеклассной работы по предмету. Формирование исследовательских навыков учащихся на уроках физики способствует увеличению числа учащихся с высоким уровнем развития исследовательских умений и познавательных мотивов, наблюдается положительная динамика развития мыслительных операций учащихся (сравнение, обобщение, классификация); увеличивается количество учащихся, участвующих и занимающих призовые места в предметных олимпиадах, творческих конкурсах, занимающихся проектной деятельностью.

---

1. Асмолов, А.Г. Формирование универсальных учебных действий в основной школе: от действия к мысли. Система заданий. – М: Просвещение, 2011. – 159 с.

2. Литовко, И.В. Обучение экспериментированию при решении задач на уроках физики. – Режим доступа: https://urok.1sept.ru/articles/601115

3.Леонтович, А.В. Исследовательская деятельность учащихся. - М.: Наука, 2003. – 96 с.

4. Чечель, И.Д. Управление исследовательской деятельностью педагога и учащегося в современной школе.. – М.: Сентябрь, 1998. – 140 с.

УДК 53.08

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВА ТЕПЛОТЫ ПРИ ЧАСТИЧНО УПРУГОМ УДАРЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СМАРТФОНА

А.Ю. Милинский[1], С.В. Барышников[1], O. Popov[2]

[1] Благовещенский государственный педагогический университет, (г. Благовещенск)

[2] Umea University, Sweden, (Umea)

a.milinskiy@mail.ru

В статье представлено творческое экспериментальное задание учащимся для определения количества теплоты при частично упругом ударе. Опыт проводится с использованием смартфона, что делает эксперимент простым и удобным для проведения в домашних условиях.

DETERMINATION OF THE AMOUNT OF HEAT FOR PARTIALLY ELASTIC IMPACT USING THE SMARTPHONE

A. Milinsky[1], S. Baryshnikov[1], O. Popov[2]
[1]*Blagoveshchensk State Pedagogical University, (Blagoveshchensk)*
[2] *Umea University, Sweden, (Umea)*
a.milinskiy@mail.ru

The article presents a creative experimental task for students to determine the amount of heat with a partially elastic impact. The experiment is carried out using a smartphone, which makes the experiment simple and convenient for conducting at home.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.144-147

Введение

Экспериментальный характер физики определяет ведущую роль учебного физического эксперимента как исследовательского метода обучения [1]. Поэтому разработка методики физического эксперимента и поиск оборудования для его проведения является одним из важных направлений модернизации физического образования в средних и высших учебных заведениях [2,3].

Текущая социальная ситуация, когда необходимо научиться продуктивно жить в условиях растущей неопределенности и угроз пандемии, требует изыскания новых форм обучения. Одним из таких направлений является использование современных мобильных устройств, позволяющих не только дистанционно получать информацию и проводить видеоконференции, но также самостоятельно проводить физический эксперимент. Массовое распространение смартфонов и наличие в них множества высокочувствительных датчиков, таких как микрофоны, акселерометры, термометры, датчики магнитного поля и давления, камеры и т.д., делает их главными помощниками учащимся в ходе выполнения экспериментальных заданий по физике. Кроме того, смартфоны часто являются альтернативой громоздкому и дорогостоящему лабораторному физическому оборудованию [2, 3]. Самостоятельное проведение учащимися физического эксперимента позволяет овладевать новыми знаниями, умениями и развивать творческую активность. В ходе решения экспериментальных задач учащиеся постоянно критически переосмысливают изученный ранее материал и учатся применять его.

В статье представлено творческое экспериментальное задание учащимся для определения количества теплоты при частично упругом ударе. Опыт проводится с использованием смартфона, что делает эксперимент удобным для самостоятельной реализации

Теоретическая часть

Количество тепловой энергии, выделяющейся при ударе металлического шара о поверхность стола, может быть найдена как разность кинетических энергий шарика до и после удара: $Q = E_1 - E_2$.

Энергия E_1 до удара равна потенциальной энергии шарика массой m, поднятого на высоту h_1 (рис.1):

$$E_1 = mgh_1.$$

После первого удара шарик поднимается на высоту h_2. Эту высоту можно определить, зная время t между первым и вторым ударами:

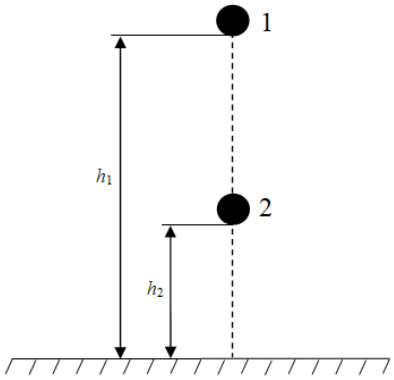


Рис. 1. Схема проведения эксперимента.

$$h_2 = \frac{gt^2}{8}. \quad (1)$$

Соответственно, энергию E_2 после первого удара можно записать как

$$E_2 = mgh_2 = \frac{mg^2t^2}{8}. \quad (2)$$

Таким образом, часть энергии, переходящей в количество теплоты Q, запишется в виде:

$$Q = mg\left(h - \frac{gt^2}{8}\right). \quad (3)$$

Школьникам в процессе эксперимента предлагается определить количество выделившейся теплоты при ударе для шариков разной массы и построить график зависимости $Q(m)$. При правильном проведении эксперимента этот график должен представлять прямую линию.

Метод реализации задания

В классическом физическом эксперименте для регистрации времени, прошедшего между двумя ударами шарика о стол, можно использовать осциллограф, к которому в качестве датчика на вход Y подключен микрофон, лежащий на столе. Однако в этом случае осциллограф должен обладать большим послесвечением и режимом ждущей развертки.

Массовое распространение смартфонов и наличие в них множества высокочувствительных датчиков, таких как микрофоны, акселерометры, термометры, датчики магнитного поля и давления, камеры и т.д., делает их главными помощниками учащимся в ходе выполнения экспериментальных заданий по физике. Кроме того, смартфоны часто являются альтернативой громоздкому и дорогостоящему лабораторному физическому оборудованию [4].

Задание для школьников для проведения домашнего эксперимента

Для проведения эксперимента по определению выделяющейся теплоты при ударе шарика о стол установите из Play Market бесплатное приложение Sound Oscilloscope. Положите смартфон на стол и, роняя металлический шарик с известной высоты, определите время между первым и вторым ударами. Приложение Sound Oscilloscope позволяет достаточно в широких пределах менять разрешение по оси времени и точно определить время между ударами. На рис.2 показана аудио запись двух последовательных ударов металлического шарика о поверхность стола.

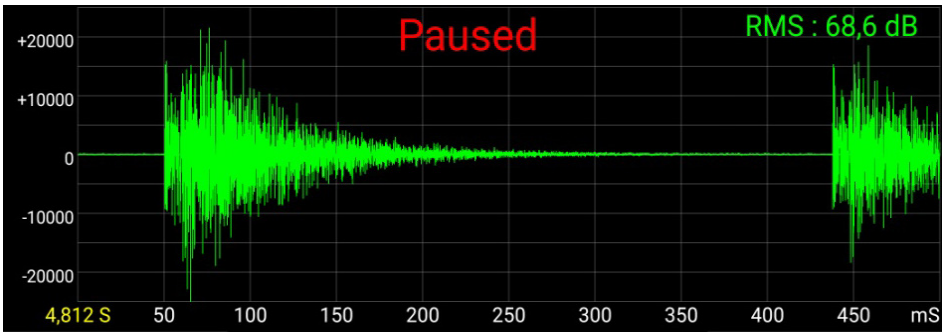


Рис. 2. Аудиозапись при первом и втором ударах металлического шарика.

Для повышения точности эксперимента опыт желательно повторить несколько раз и для дальнейших расчетов использовать среднее время:

$$t = \frac{t_1 + t_2 + t_3 + t_4 + t_5}{5}.$$

Используя соотношение (3), вычислите количество энергии, переходящей в тепло при ударе шарика о поверхность стола. Полученные результаты занесите в таблицу результатов измерений.

Результаты измерений

№ шарика	m, г	h, см	t, с	Q, мДж
1				
2				
3				

Далее используйте шарик другой массы проведите те же опыты. Новые результаты также занесите в таблицу. Постройте график зависимости теплоты, выделяющейся при ударе, от массы шарика. Сравните и объясните полученные результаты.

Заключение

Таким образом, в статье показано, что творческий подход к постановке физического эксперимента при современных возможностях смартфонов позволяет скомпенсировать нехватку физического оборудования в школах и проводить физические опыты на высоком уровне, как в школе, так и дома.

1. Разумовский, В.Г., Майер, В.В. Физика в школе. Научный метод познания и обучения. – М.: Гуманит. изд. центр ВЛАДОС, 2007. – 463 с.
2. Масленникова, О.В., Фаддеев, М.А., Зворыкин, И.Ю. Решение экспериментальных задач как средство формирования познавательных умений учащихся в ходе изучения курса физики // Физика в школе. – 2020. – № 4. – С 45-55.
3. Масленникова, О.В., Фаддеев, М.А., Зворыкин, И.Ю. Решение экспериментальных задач как средство формирования познавательных умений учащихся в ходе изучения курса физики (на примере изучения темы «Сила трения») // Физика в школе. – 2020. – № 7. – С 45-55.
4. Размачева, Ю.А. Использование мобильных устройств при обучении физике учащихся школ // Научный руководитель. – 2018. – № 3. – С. 58-66.

УДК: 53.05

РАЗРАБОТКА ВИРТУАЛЬНОЙ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ «ПРОВЕРКА ЗАКОНОВ ДИНАМИКИ ПОСТУПАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ» В СРЕДЕ UNREAL ENGINE

В.В. Насыров[1], М.Г. Насырова[2]

[1]ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет» (г. Хабаровск)
[2]Вычислительный центр ДВО РАН (г. Хабаровск)
000612@pnu.edu.ru

В работе описана ВЛР “Проверка законов динамики поступательного движения” и возможность ее использования в курсе физики.

DEVELOPMENT OF THE VIRTUAL LAB «VERIFICATION OF THE LAW OF DYNAMICS OF TRANSLATIONAL MOTION» IN THE UNREAL ENGINE ENVIRONMENT

V.V.Nasyrov[1], M.G. Nasyrova[2]

[1] Federal State Educational Institution of Higher Professional Education «Pacific National University» (Khabarovsk)
[2] Computing Center of the Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)
000612@pnu.edu.ru

The paper describes the virtual lab «Verification of the laws of dynamics of translative motion» and the possibility of its use in a physics course.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.147-150

Подготовка современных специалистов оказывается практически невозможна без применения новых образовательных технологий, в том числе дистанционных форм, которые активно внедряются (например, [1,2]) в последнее время не только в заочном, но и в очном обучении.

Использование профессиональной среды разработки компьютерных 3D игр Unreal Engine (UE5) позволяет существенно улучшить интерактивность обучающих виртуальных лабораторных работ (ВЛР) и дает возможность добавить эффект присутствия в процесс выполнения лабораторной работы, что на наш взгляд выгодно отличает такие ВЛР от большинства существующих работ с 2D интерфейсом.

В данной работе мы представляем разработанную ВЛР «Проверка законов динамики поступательного движения». Реальная лабораторная установка, послужившая прототипом для ВЛР, входит в модульный учебный комплекс МУК-М2, предназначенный для проведения физического лабораторного практикума в высших и средних учебных заведениях по разделу «Механика» курса общей физики. Так как к настоящему моменту сотрудниками кафедры физики ТОГУ подготовлено учебное пособие [3] с описанием экспериментальной установки, где разработана методика выполнения эксперимента и методически выверен порядок исполнения работы, то при разработке ВЛР мы уделили особое внимание детальному соответствию компьютерной модели и реальной установки, а также последовательности хода работы.

При таком подходе обучающийся может при выполнении ВЛР использовать имеющиеся методические разработки кафедры, делая работу в полном соответствие с методическими указаниями. Выполняя виртуальный эксперимент при проведении ВЛР обучающийся получает результаты измерений, причем он производит ту же последовательность действий (с поправкой на систему управления персонажем), что и в реальной работе.

Для краткого обзора возможностей лабораторной установки приведем рис. 1 (взят из [3]).

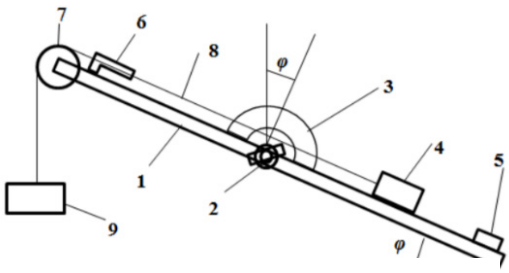


Рис. 1. Общий вид узла «плоскость» с системой связанных тел из [3].

Рис. 2. Лабораторная установка в ВЛР.

Основной частью является система, из двух тел: груза 4 и сборного бруска 9 , соединенных перекинутой через блок 7 нитью. В лабораторной работе предлагается измерить параметры движения бруска по наклонной плоскости 1 (пройденное расстояние, время движения). На основании выполненных измерений обучающийся должен рассчитать для разных углов наклона плоскости ускорение движения и коэффициент трения бруска по плоскости (для разных контактных поверхностей – «дерево/дерево» и «дерево/металл»). Соответствующие расчетные формулы тривиальны, поэтому здесь не приводятся.

При выполнении ВЛР обучающийся «находится» в виртуальной трехмерной комнате, где имеет возможность перемещаться, взаимодействовать с предметами и изучить установку детально с различных ракурсов (рис. 2).

ВЛР снабжена подробной справочной системой (рис. 3), где приводится как непосредственно методические указания по выполнению работы, так и описание системы управления персонажем в ВЛР. Отметим, что так как ВЛР основана на игровом движке UE5, то пользователю, который как правило уже играл в компьютерные 3D-игры, не потребуется приобретения каких-либо новых навыков для выполнения ВЛР по сравнению с обычной компьютерной игрой.

При выполнении работы пользователь может передвигаться по комнате и взаимодействовать с элементами установки: менять наклон поверхности, начальное положение бруска, нажимать на кнопку секундомера. Таким образом, пользователь может делать все те же действия, что и в реальной работе. Например, для начала выполнения действий с установкой необходимо подойти к установке и выставить брусок в начальное положение, проверить контактную поверхность бруска. Затем нужно включить секундомер, отсчеты которого автоматически прекращаются при остановке бруска о стопор.

Неотъемлемой частью любой лабораторной работы является обработка экспериментальных данных студентом, оформление отчета по работе и проверка результатов преподавателем. В ВЛР измеряемые данные заносятся в таблицу результатов (рис. 4) автоматически.

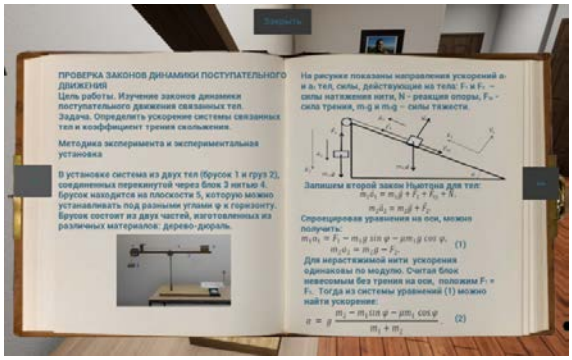


Рис. 3. Виртуальное методическое указание в ВЛР.

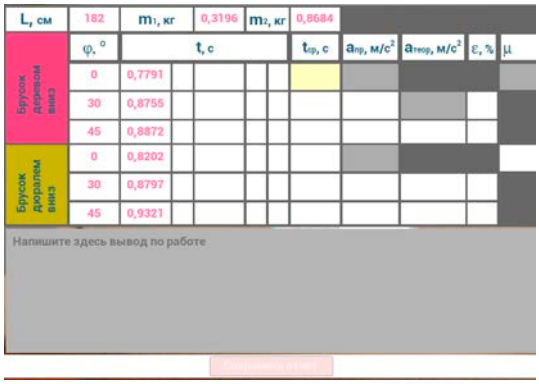


Рис. 4. Таблица результатов ВЛР.

Далее студент должен самостоятельно заполнить расчетные значения таблицы, правильность вычисления которых происходит автоматически и по прохождении проверки формируется файл отчета. Таким образом, при использовании ВЛР при самоподготовке студент сможет убедиться, что он освоил методику расчёта необходимых в реальной работе величин, а при использовании ВЛР при дистанционном обучении облегчается труд преподавателя, контролирующего процесс обучения, так как файл с результатами имеет идентификационные данные студента, а наличие этого файла подтверждает правильность выполнения работы и гарантирует правильность рассчитанных параметров.

Отметим, что UE5 позволяет подготовить ВЛР для запуска на основных платформах: Windows, Linux, IOS, Android. Поэтому ВЛР может быть запущена студентом и в домашних условиях на стационарном компьютере или ноутбуке. Такой способ использования программы позволяет легко встроить её практически в любую электронную образовательную среду (ЭОС) и использовать при дистанционном обучении. Естественно, что ВЛР можно использовать и в учебных заведениях, где нет возможности поработать в реальной лаборатории. Однако, обязательным условием является наличие в компьютере видеокарты уровня не ниже NVIDIA GTX1060. С одной стороны, это видеокарта 6 летней давности, но с другой стороны, при сложившемся из-за майнинга криптовалют дефиците видеокарт на рынке, может стать препятствием при использовании ВЛР.

1. Насыров, В.В., Иванова, М.А. Применение мобильных платформ в физических демонстрациях // Ученые заметки ТОГУ. – 2019. – Т. 10, № 2. – С. 500-503.

2. Алёшин, М.С., Прохоренко, А.В. Моделирование процессов рассеяния с использованием библиотеки Open Source Physics // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование Материалы XVI региональной научной конференции / под ред. А.И. Мазура. – 2018. – С. 85-88.
3. Кирюшин, А.В. и др. Элементы физической механики: учебное пособие. – Хабаровск: Изд-во ТОГУ, 2015. - 111 с.

УДК 53.08

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ МОБИЛЬНОГО ОБУЧЕНИЯ И ПОВЫШЕНИЯ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ПОДГОТОВКИ УЧИТЕЛЕЙ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ ДИСЦИПЛИН

О. Попов[1], С. Барышников[2], А. Милинский[2]
[1]Университет Умео, Департамент естественнонаучного и математического образования (Швеция)
[2]Благовещенский государственный педагогический университет (Россия)
oleg.popov@umu.se

Повышение качества подготовки специалистов для улучшения естественнонаучного образования является одним из основных приоритетов во всем мире. Использование современных мобильных средств связи и подходов к обучению открывает большие перспективы в достижении этих целей при подготовке учителей по естественно-научным дисциплинам. В этой статье представлены теоретические основы и некоторые практические решения того, как смартфоны могут способствовать распространению мобильного обучения в различных странах (на примере Швеции и России). Разработка ведется в рамках проекта InterMobile.

DEVELOPING TOOLS FOR MOBILE LEARNING TO ENHANCE SCIENCE TEACHERS' PROFESSIONAL COMPETENCE

O. Popov[1], S. Baryshnikov[2], A. Milinsky[2]
[1]Umeå University, Department of Science and Mathematics Education (Sweden)
[2] Blagoveshchensk State Pedagogical University (Russia)
oleg.popov@umu.se

Raising quality of science specialists and science education is a major priority around the globe. Another important global educational focus is promoting sustainable development. Use of modern mobile learning tools and teaching approaches shows great promises for teacher education in fulfilling these goals. This paper presents theoretical foundations and some practical solutions how smartphones as handheld computers can assist mobile learning (m-learning) in geographically distributed settings. The developmental work is conducted within the framework of InterMobile project that is presented in the paper where also some expected and achieved outcomes outlined.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.150-153

Introduction

This paper presents design and some outcomes of an ongoing InterMobile project for «Promoting Internationalisation of Science Teacher Education through Mobile Learning» developed in collaboration between Umeå University in Sweden and Blagoveshchensk State Pedagogical University in Russia.

Science teacher education is an important field of higher education in Sweden and Russia. All universities and schools of teacher education in Sweden must promote sustainable development in their activities. Similar demands are stated in Russian steering documents for higher education. Use of modern mobile learning shows great potential for teacher education including learning in geographically distributed intercultural projects Yildiz, et al. [1]. Advanced by this project international academic collaboration supported by digital technology is contributes to achieving the goal of improving science teacher educators' intercultural competence and creating a foundation for further professional development on different scales: individual, local, national, and international.

Current societal situation, when we need to learn to live productively in the context of increasing uncertainty and pandemic threats, demands developed international understanding and cooperation. Internationalisation of science teacher education is a challenging issue all over the world. We use in the project Knight's [2] definition of internationalisation of higher education as 'the process of integrating an international, intercultural, or global dimension into the purpose, functions or delivery of postsecondary education'. This concise definition inspires us to focus on improvement of the process of internationalisation in daily academic activities of our departments. Our institutions have knowledge and experience of using digital technology, including handhelds, in science courses but there are weakly developed international and intercultural dimensions, especially in physical sciences courses. Science teaching practices are usually considered as intrinsically universal and culture free enterprise. In order to overcome this misconception, decontextualized academic subject knowledge needs to be related to the context-bound experiential knowledge of multicultural world that learners bring with them. Practical steps of introducing explicit instruction about interculturality in science education need to be further developed and theoretically advanced.

Thus, the project aims to explore the situation with pre-service training of science teachers in the partner universities from a comparative perspective, advance knowledge about existing potential for innovation and create a teaching model for increasing domestic internationalization facilitated by the use of mobile learning. This model includes a number of innovative learning activities such as physical data collection with build-in and external sensors, digital visualization, information exchange and distributed problem-solving with help of smartphones.

The project addresses also the challenges of the "post-truth" era such as increasing skills of searching for scientific evidence and developing an intercultural collaboration competence. We aim to prepare platform for a full-scale international collaboration that can contribute to improvement of teacher education programs in both countries.

Enhancing digital response to societal demands

Russia and Sweden have as a strategic goal the development of knowledge and digital technology-based society. The creation, transfer and application of knowledge and digital technologies are assumed to be of prime importance for a process of further societal and economic development.

The rapidly expanding mobile learning (m-learning) that employs handheld technology is a powerful trend in our countries and internationally. Smartphones as handheld computers find increasing use in education (Sung, Chang, & Liu, [3]). Our smartphones are packed with internal sensors that can measure sound, light, acceleration, magnetic field strength, etc. (see e.g. App: Датчики or Toolbox Sensor Suite). Use of smartphones as measurement devices in science experiments is a promising area. The smartphones' sensors are reliable and accurate enough to permit good measurements. Every student can have their own measuring tool inside and outside the classroom. This can empower the students to conduct their own experiments and collect data anytime and anywhere. Use of GPS (Global Position System) allow different measurements and data analysis to be connected to specific places. The ubiquity, flexibility, ease of access and diverse capabilities of m-technologies make them a necessity in current times.

Furthermore, mobile learning augmented by VR enables so called “seamless learning” smoothly connecting learning experiences inside and outside of the classroom (Looi, Seow, Zhang, So, Chen, & Wong [4]), t ex providing learning experiences conducted in the outdoors context.

Information collected in different natural and cultural contexts can be exchanged among students of the partner universities for facilitating their learning outcomes including development of intercultural competence. Research reviews show evidence that use of mobile digital technologies can foster students’ performances in science (Bano et al., [5]), inquiry-based learning (Suárez et al. [6]), collaboration (Fu & Hwang, [7]) and intercultural competence (Shadiev & Sintawati, [8]).

The InterMobile project includes two studies: baseline and design studies.

Baseline study focuses on collection of information about existing practices of teaching with help of handheld technology in Sweden and Russia as well as a literature review on teaching/learning interculturality in science education.

The “design” study relies on educational design methodology with focus on local contexts and digital technology. A general didactical approach for teaching interculturality in physical sciences using m-learning is advanced. We develop authentic practical activities for students to be conducted in-lab and outdoors so-called specific cases or m-learning tasks. The first outcomes of the project are already available and accepted for publication in our national science teacher professional media (see e.g Popov, Baryshnikov, Milinskiy, [9]).

These practical activities could be recorded and reported in form of short videos. Video-reporting of practical activities shared with fellows from the partner university can enhance students’ skills in doing and communicating science. Our hypothesis is that by adding the systemic use of m-technologies in international collaborative settings can allow students a deeper understanding of local and global issues and the relationship between science, culture and nature. We will need to consider how group dynamics and interaction with new technology take place when solving science problems during international collaboration.

On everyday basis, networking within the InterMobile project takes place through exchange of pedagogical ideas, technological solutions and background information via email, WhatsApp and ZOOM. Participants share information and documents about ongoing activities and projects in their departments and at local conferences.

The process and outcomes of the project expected to contribute to increase internationalization of science teacher education and better understanding between educationalists in two countries providing, thus, new opportunities for long-term academic collaboration and researchers mobility in post-Covid era. The project results will contribute to further professional development of teacher educators. Results of the initiated cooperation will be disseminated also through the pre-service and in-service teacher training courses in which project participants are involved.

This project is partially funded by the Swedish Institute.

---

1. Yildiz, G., et al. Research trends in mobile learning // International Review of Research in Open and Distributed Learning (IRRODL). – 2020. – V.21, № 3. – P. 176-196.

2. Knight, J. Internationalization: Concepts, Complexities and Challenges. In J. J. F. Forest & P. G. Altbach (Eds.), // International Handbook of Higher Education. – 2007. – V.18. – P.207–227. Dordrecht: Springer.

3. Sung, Y.T., Chang, K.E., & Liu, T.C. The effects of integrating mobile devices with teaching and learning on students' learning performance: A meta-analysis and research synthesis // Computers & Education. – 2016. – V. 94. – P. 252-275.

4. Looi, C.K., Seow, P., Zhang, B., So, H.J., Chen, W., & Wong, L.H. Leveraging mobile technology for sustainable seamless learning: a research agenda // British journal of educational technology. – 2010. – V.41, № 2. – P.154-169.

5. Bano, M., Zowghi, D., Kearney, M., Schuck, S., & Aubusson, P. Mobile Learning for Science and Mathematics School Education: A Systematic Review of Empirical Evidence // Computers & Education. – 2018. – V.121. – P. 30-58.

6. Fu, Q.K., & Hwang, G.-J. Trends in Mobile Technology-Supported Collaborative Learning: A Systematic Review of Journal Publications from 2007 to 2016 // Computers & Education. – 2018. – V. 119. – P. 129-143.

7. Shadiev, R. & Sintawati, W. A Review of Research on Intercultural Learning Supported by Technology // Educational Research Review. – 2020. – V. 31. – 100338.

8. Suárez, A., Specht, M., Prinsen, F., Kalz, M., & Ternier, S. A Review of the Types of Mobile Activities in Mobile Inquiry-Based Learning // Computers and Education. – 2018. – V. 118. – P. 38-55.
9. Popov, O., Baryshnikov, S., Milinskiy A. Att studera energiomvandlingar med hjälp av en smarttelefon – Hur stor värmemängd utvecklas vid en stöt? // LMNT-Nytt. – 2021 (*to be published*).

УДК 378.147

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВИРТУАЛЬНЫХ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ФИЗИКЕ ПРИ ДИСТАНЦИОННОЙ ФОРМЕ ОБРАЗОВАНИЯ

А.В. Прохоренко, **В.И. Римлянд**
Тихоокеанский государственный университет, (г. Хабаровск)
: riml@fizika.khstu.ru

Рассмотрены проблемы организации лабораторных практикумов по физике в условиях перехода на дистанционное обучение. Проведен анализ виртуальных лабораторных работ по физике Университета штата Колорадо в Боулдере.

THE USE OF VIRTUAL LABORATORY WORKS IN PHYSICS WITH A DISTANCE FORM OF EDUCATION

A. V. Prokhorenko, V.I. Rimlyand
Pacific National University (Khabarovsk)
: riml@fizika.khstu.ru

The problems of organizing laboratory workshops in physics during the transition to remote learning are considered. The analysis of the virtual laboratory work in physics at the University of Colorado at Boulder is carried out.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.153-156

Введение

При переходе на дистанционное образование при преподавании физики и других технических дисциплин вузы столкнулись с рядом проблем в части организация выполнения лабораторных работ. Основные из них: технологическая неготовность, созданных ранее платформ к масштабному их использованию; методически неподготовленность электронных учебных курсов к практическому применению в условия перехода на онлайн обучение; отсутствие опыта проведения данного типа занятий у большинства преподавателей. Стороны студентов: проблемы технического характера и умения организовать самостоятельную работу.

На кафедре физики Тихоокеанского государственного университета был проведенный анализ влияния перехода на онлайн весной 2020 года на успеваемость студентов [1]. Был выявлен ряд проблем в организации дистанционного обучения, которые в наибольшей степени касаются дисциплин, в программе которых предусмотрены лабораторные занятия. Однако, переход на дистанционное обучение не привел к снижению успеваемости по физике по итогам сессии. Студенты в целом удовлетворены качеством проведения ЛР в дистанционном режиме. К негативным моментам перехода на онлайн обучения можно отнести: невозможность имитировать взаимодействие с реальными измерительными приборами в процессе выполнения ЛР: сборка установки, настройка приборов, снятие по-

казаний, оценивание результатов измерений и расчетов и ряд других. Переход на дистанционный режим показал быструю адаптацию преподавателей к практической работе в среде «Moodle» и организации виртуальных занятий. При этом большинство преподавателей отмечают при этом недостаток компетентности в технологических и педагогических навыках, необходимых для онлайн преподавания. Данная проблема свойственна большинству вузов России и за рубежом [2]

Выполнение лабораторных работ формирует у студентов профессиональные компетенции и навыки самостоятельной работы [3-5]. Настоящее время активно развивается новое направление - виртуальные и удаленные лаборатории и виртуальные лабораторные работы. Существует достаточно много интернет ресурсов, предлагающих виртуальные лабораторные работы различным предметам, выполнять которые можно в режимах online и офлайн. Одними из наиболее развитых порталов, посвященных виртуальным лабораториям, являются онлайн-ресурсы PhET Interactive Simulations [6], ProgramLab [7], Виртуальный лабораторный комплекс ТПУ [8] и ряд других. Они позволяют проводить виртуальные эксперименты по физике, химии, биологии и другим предметам.

Виртуальные лабораторные работы по физике Университета штата Колорадо.

Наш анализ показывает, что портал PhET Университета штата Колорадо в Боулдере предлагает наиболее доступные, бесплатные, интерактивные лабораторные работы. Модели написаны на Java, Flash или HTML5 и могут быть запущены онлайн или загружены на компьютер. Все симуляции имеют открытый исходный код. На странице доступны различные фильтры для сортировки по: области науки; уровню образования; формату работы; дополнительным возможностям; доступности симуляций на определённом языке. Представлены симуляции разного рода, включая демонстрации физических явлений. Есть такие, которые можно использовать в качестве виртуальных лабораторных работ, проводить измерения. Приведем примеры некоторых из них, которые могут быть рекомендованы для использования в курсе физики.

Лабораторная работа №1. Колебания тела на пружине

Ссылка: https://phet.colorado.edu/en/simulation/masses-and-springs. Цель: определить факторы, влияющие на период колебаний; найдите значение ускорения свободного падения g на Планете X; разработать эксперимент по определению массы неизвестного объекта; описать взаимосвязь между векторами скорости и ускорения; объяснить принцип сохранения механической энергии и ряд других заданий.

Лабораторная работа (рис. 1) состоит из разделов: введение (предназначен для ознакомления с основами эксперимента); векторы (для изучения равнодействующей силы или составляющих силы в системе); энергия (демонстрируется энергия в системе в режиме реального времени; лаборатория (предназначен для выполнения эксперимента, задача которого состоит в сборе данных и определения значения «загадочной» массы или силы тяжести на Планете X).

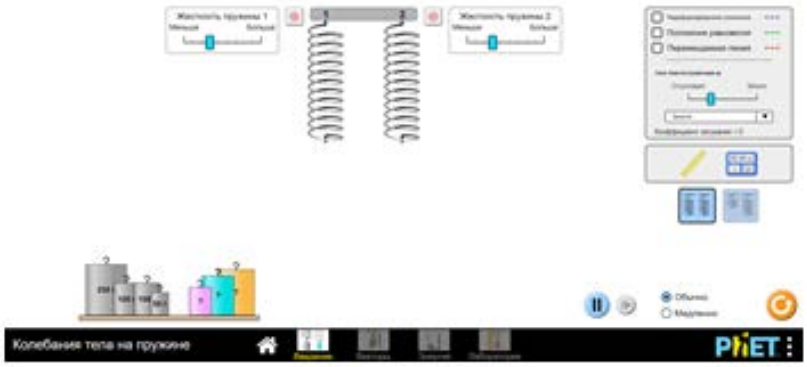


Рис. 1. Лабораторная работа «Колебания тела на пружине».

Лабораторная работа №2. Электрические поля точечных зарядов

Ссылка: https://phet.colorado.edu/en/simulation/charges-and-fields. Цель: определить переменные, которые влияют на силу и направление электрического поля для статического расположения зарядов; изучить переменные, которые влияют на силу электростатического потенциала (напряжения); объяснить эквипотенциальные линии и сравните их с линиями электрического поля; для расположения статических зарядов спрогнозировать силовые линии электрического поля; проверить прогноз, используя сложение векторов. В лабораторной работе (рис. 2) учащиеся изучают электростатику, организуют пространство положительных и отрицательных зарядов и наблюдают за результирующим электрическим полем, напряжением и эквипотенциальными линиями.

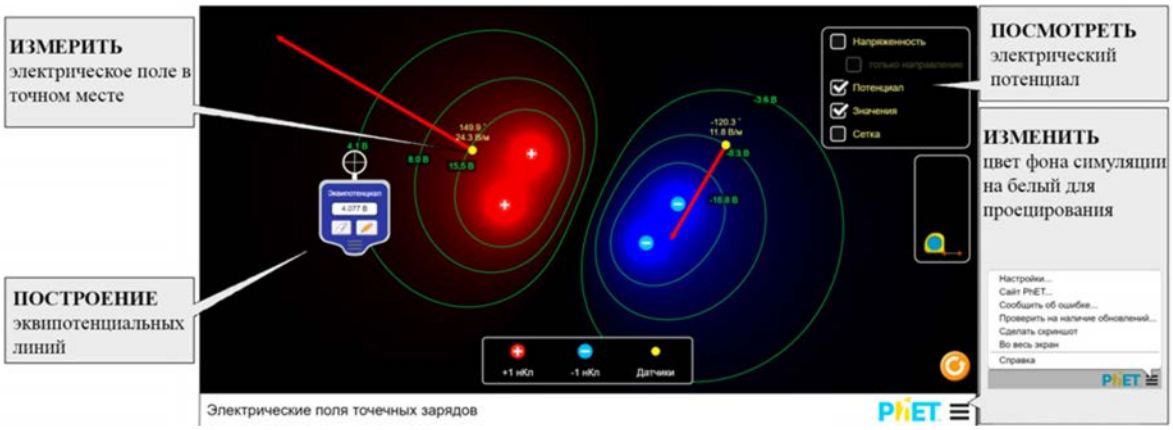


Рис. 2. Лабораторная работа «Электрические поля точечных зарядов», визуализация потенциала для случая +2 нКл и –2 нКл

Лабораторная работа №3. Лаборатория конденсаторов

Ссылка: https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/capacitor-lab. Цель: определить взаимосвязь между зарядом и напряжением конденсатора; определите энергию, запасенную в конденсаторе или наборе конденсаторов в цепи; изучить влияние пространства и диэлектрических материалов, вставленных между проводниками конденсатора в цепи; определить эквивалентную емкость набора конденсаторов, включенных последовательно и параллельно в цепи. Лабораторная работа (рис.3) состоит из разделов: введение, отображен конденсатор, можно снимать замеры и в последствии, выполнять расчёты; диэлектрики (поведение конденсатора с диэлектриком); несколько конденсаторов (для изучения различных видов подключения конденсаторов: последовательное и параллельное).

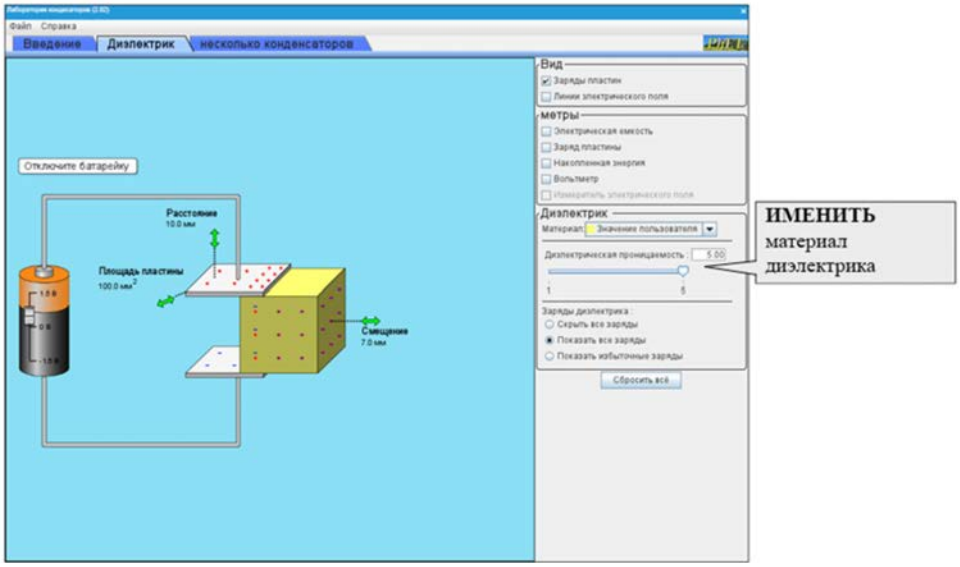


Рис. 3. Лабораторная работа «Лаборатория конденсаторов», экран «Диэлектрик».

Лабораторная работа № 4. Интерференция волн

Ссылка: https://phet.colorado.edu/en/simulation/wave-interference. Цель: создать интерференционную картину с двумя источниками и определить способы её изменения; Лабораторная работа (рис.5) состоит из разделов: волны (происходит создание волны из крана, звуковогодинамика или лазера; интерференция (найти точки конструктивного и деструктивного воздействия на глаз и с помощью детекторов); щели.

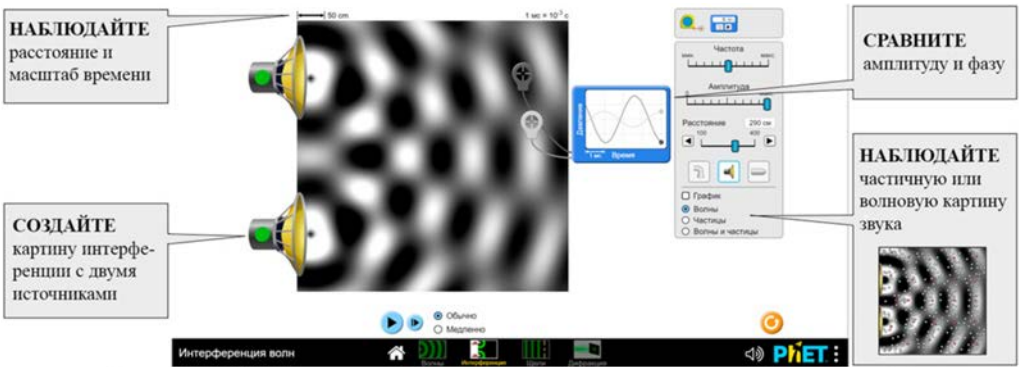


Рис. 5. Лабораторная работа «Интерференция волн», экран «Дифракция».

Заключение

Наличие лаборатории любого типа (виртуальной или реальной) не является достаточным условием для обеспечения успеха в образовательном процессе. Любой тип лаборатории, предлагаемый в качестве отдельного инструмента, без связи с учебным материалом, обычно приводит обучающихся к использованию стратегии проб и ошибок. Сочетание практических действий и виртуальных лабораторий может быть лучшим предложением вместо того, чтобы использовать только лаборатория одного типа. Лабораторные работы, выполненные на реальных установках, могут быть использованы на первом этапе для построения доверия к виртуальному эксперименту, которое будет использоваться на втором этапе. В качестве виртуальных лабораторных работ по физике могут быть рекомендованы работы представленные на сайте Университета штата Колорадо в Боулдере PhET. Данные работы наибольшей степени соответствуют требования онлайн обучения в условиях вузов России. Однако, их внедрение в учебный процесс требует дополнительного методического обеспечения для каждой лабораторной работы с учетом соответствующих требований.

---

1. Rimlyand, V.I., Drachev, K.A. The Experience In Organizing A Hands-On Course In Physics In E-Learning Environment // European Proceedings of Social and Behavioural Sciences EpSBS. – 2020. – Vol. 111 – P. 787-794.
2. Downing, J.J., Dyment, J.E. Teacher educators' readiness, preparation, and perceptions of preparing preservice teachers in a fully online environment: An exploratory study. The teacher educator 48 (2), 96-109.
3. Hernández-de-Menéndez, Marcela, Vallejo Guevara, Antonio, Morales-Menendez, Ruben. Virtual reality laboratories: a review of experiences // International Journal on Interactive Design and Manufacturing (IJIDeM). – 2019. – Volume 13. – P. 947-966.
4. Аношина, О.В. Виртуальный лабораторный практикум: преимущества и недостатки // Новые информационные технологии в образовании и науке. – 2019. – № 2. – С. 46-52.
5. Ранних, В.Н. Роль виртуального лабораторного практикума в улучшении когнитивных и мотивационных показателей обучения в вузе // Известия Тульского гос. ун-та. Серия «Педагогика». – 2015. – № 2. – С. 131-135.
6. PhET INTERACTIVE SIMULATION, University of Colorado Boulder. – URL: https://phet.colorado.edu/ (дата обращения: 20.06.2021).
7. Каталог учебного оборудования Програмлаб. Физика. – URL: https://pl-llc.ru/catalog/fizika/t/ (дата обращения: 12.07.2021).
8. Виртуальные лаборатории. – URL: https://portal.tpu.ru/ceor/v_lab (дата обращения: 10.06.2021).

УДК 378.14

РАЗРАБОТКА КРИТЕРИАЛЬНО-УРОВНЕВОЙ СИСТЕМЫ ОЦЕНКИ РЕЗУЛЬТАТОВ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ ПО ФИЗИКЕ

А.С. Стукалова
Дальневосточный государственный медицинский университет (г. Хабаровск)
stukalovaanna@mail.ru

Критериально-уровневая система оценки результатов как важная составляющая образовательного процесса требует актуализации при переходе обучения в онлайн режим. Разработаны критерии с описанием уровней достижений, позволяющие диагностировать уровень сформированности умений и навыков студента в системе дистанционного обучения по физике.

DEVELOPMENT OF CRITERIAL-LEVEL SYSTEM FOR EVALUATING THE RESULTS OF DISTANCE LEARNING IN PHYSICS

A.S. Stukalova
Far Eastern State Medical University (Khabarovsk)
stukalovaanna@mail.ru

The criterion-level system for assessing results as an important component of the educational process requires updating when learning goes online. Criteria have been developed with a description of the levels of achievement, allowing to diagnose the level of formation of the student's skills and abilities in the system of distance learning in physics.

DOI: 10.2250/PFARE.2021.157-160

Продолжающаяся неблагополучная эпидемиологическая ситуация диктует необходимость предусмотреть возможность проводить обучение студентов дистанционно без потери качества образовательного процесса. Преподавание естественнонаучного блока имеет ряд организационно-методических особенностей, которые делают переход на онлайн обучение объективно непростой задачей. Ориентация рабочей программы по физике на исследовательский характер учебно-познавательной деятельности студентов обуславливает проведение большого количества лабораторных работ, использование физического оборудования формирует научное практико-ориентированное мировоззрение. Происходит естественная непрерывная интеграция теоретико-методологических знаний и практических умений и навыков студентов. При обучении онлайн экспериментальная часть полностью или частично замещалась другими формами проведения занятия из-за отсутствия возможности организации выполнения студентами лабораторных работ.

При традиционном способе обучения имеющаяся балльно-рейтинговая система была внедрена во все формы организации учебного процесса вуза. Посещение лекций, активное участие в семинарских занятиях и выполнение лабораторного практикума фиксировалось преподавателем в виде накопительной системы оценивания и позволяла студенту к концу семестра получить зачет по дисциплине. Разнообразные виды работы во время лабораторного практикума (допуск к работе, выполнение эксперимента, оформление отчета, собеседование по теоретической и практической части) имели свою градацию в разработанной преподавателем балльно-рейтинговой системе и являлись ведущими компонентами в системе оценивания результатов обучения по физике.

Как известно [1], критериально-уровневая система оценки результатов обучения представляет собой одну из составляющих образовательного процесса. Оценивание называется критериальным, если основано на сравнении учебных, метапредметных и личностных достижений учащихся с заранее выработанными и известными критериями. Система оценивания выступает и как средство диагностики, и как инструмент обратной связи в учебном процессе. Объективная и открытая система оценивания способствует формированию у учащегося критического отношения к своей деятельности, развитию самостоятельности и адекватной самооценке. В последнее время в образовательном пространстве наблюдается изменение значения контролирующих средств – они приобретают функции активизации процесса обучения и управления его качеством, отслеживают эффективность образовательного процесса.

Перенос учебных ситуаций в онлайн среду вызвал трудоемкий, но необходимый пересмотр системы оценки качества обучения. Процессуальные, поведенческие и концептуальные аспекты обучения изменились [2], что объективно повлекло необходимую актуализацию. Поскольку понятие системы оценки качества дистанционного обучения предполагает наличие диагностических и оценочных процедур, необходимо их адаптировать к новым технологиям. К примеру, устный опрос как распространенный и эффективный метод контроля знаний при дистанционном обучении становится одним из трудоемких методов, требующих абсолютно синхронной связи студента и педагога и высоких технических параметров точек доступа сети Интернет, что не всегда выполнимо по ряду объективных причин.

При разработке критериально-уровневой системы оценивания результатов обучения были составлены как перечень проверяемых планируемых результатов (становление и планомерное развитие компетенций, соответствующих федеральному государственному образовательному стандарту), так и набор проверяемых элементов содержания дисциплины с учетом формируемых умений и навыков. Каждый уровень достижений, отмечаемый определённым баллом, имеет дескриптор с описанием констатирующих действий студента по отношению к данному критерию.

Рассмотрим пример учебного задания по теме «Физические основы УВЧ-терапии».

Задание: изучите описание лабораторной работы, ознакомьтесь с фото- и видеоматериалами. На основе предложенных экспериментальных данных постройте зависимость температуры двух образцов (диэлектрической жидкости и раствора электролита) от времени воздействия УВЧ электрического и магнитного полей, представив информацию графически. Сформулируйте вывод об особенностях влияния высокочастотных полей на материалы. Ответьте на предложенные вопросы по теме исследования.

Указания для студентов: ознакомившись с табличными данными из файла, выберите равномерный рабочий масштаб для графиков, укажите размерность используемых физических величин. Количество представленных в отчете рисунков – два (электрическое и магнитное поле отдельно), на каждом по две кривые – поведение электролита и диэлектрика при воздействии УВЧ поля.

Рекомендации для преподавателя: создать условия и предпосылки формирования универсальной компетенции УК-1 (способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий) через самостоятельную образовательную деятельность студентов.

Критерий 1: Оформление лабораторной работы.

Дескрипторы к критерию 1: Указаны название, цель лабораторной работы и используемое оборудование (1 балл); в работе присутствует краткий теоретический обзор изучаемого явления (1 балл); приведена схема экспериментальной установки (1 балл); приборы и их основные технические характеристики (пределы измерения, цена деления шкалы, погрешность) указаны (1 балл); все записи в тетради сделаны аккуратно и грамотно (1 балл); даны правильные и лаконичные ответы на вопросы самоконтроля (1 балл).

Высокий уровень достижений (6 баллов): Работа оформлена в полном объеме без существенных замечаний, в теоретическом обзоре конспективно отражены все изучаемые понятия, при необходимости приведены формулы с указанием физических величин и их размерности, приведена схема установки с указаниями основных элементов установки, ответы на вопросы самоконтроля развернутые, однозначные.

Средний уровень достижений (4 балла): Работа имеет ряд недочетов, исправленных после замечаний преподавателя, теоретический обзор не имеет логически связанной структуры, схема экспериментальной установки выполнена небрежно, ответы на вопросы самоконтроля частично отражают обсуждаемое явление и требуют уточнения, доработку.

Низкий уровень достижений (2 балла): Работа представлена в неполном объеме, имеются значительные пробелы в конспекте теоретического блока, отсутствует схема экспериментальной установки, ответы на вопросы самоконтроля не соответствуют фактическому материалу.

Критерий 2: Графическое представление результатов исследования.

Дескрипторы к критерию 2: Указаны физические величины и их размерность на координатных осях (1 балл); корректно выбран и нанесен масштаб на соответствующих осях (1 балл); рисунки сделаны контрастно, достаточно крупно (не менее трети рабочего листа), без помарок (1 балл); представленные на рисунке кривые подписаны (1 балл); корректно проведена аппроксимирующая кривая (1 балл); присутствует подпись к рисунку, отражающая смысл эксперимента (1 балл).

Высокий уровень достижений (6 баллов): Рисунки аккуратно оформлены в полном объеме, принципиальные замечания отсутствуют, масштаб графиков функционально обоснован, аппроксимирующие линии построены правильно.

Средний уровень достижений (4 балла): Рисунки имеют ряд недочетов, исправленных после замечаний преподавателя, масштаб графиков корректен, но площадь чертежа недостаточно наглядна; экспериментальные кривые соответствуют общему замыслу лабораторного опыта.

Низкий уровень достижений (2 балла): Рисунки представлены с существенными замечаниями: отсутствуют подписи и наименование физических величин, масштаб неравномерный или на осях присутствуют не масштабные деления, а координаты экспериментальных точек; нанесенные экспериментальные точки «сбиты» относительно таблицы результатов, кривая функциональной зависимости представлена ломаной кривой.

Критерий 3: Обоснование выводов по выполненной работе.

Дескрипторы к критерию 3: Дана верная интерпретация полученного результата (1 балл); указан используемый метод (1 балл); сформулированный вывод соответствует заявленной цели работы (1 балл); проанализировано и обосновано поведение экспериментальных кривых в данных условиях (1 балл); указана роль погрешности в полученных данных (1 балл); намечены пути повышения точности экспериментальных результатов (1 балл).

Высокий уровень достижений (6 баллов): Заключение представлено в полном объеме, принципиальные замечания отсутствуют, полученные результаты кратко, но емко обоснованы.

Средний уровень достижений (4 балла): Общий вывод имеет незначительные недочеты, исправленные после замечаний преподавателя, заключение фрагментарно, роль погрешности не отражена, анализ полученных экспериментальных кривых не развернут.

Низкий уровень достижений (2 балла): Заключение представлено в неполном объеме, имеются значительные пробелы в его структуре либо внутренние противоречия; вывод частично соответствует заявленной цели лабораторной работы.

Выдвинутые показатели дают возможность педагогу осуществлять непрерывный контроль по всем блокам дисциплины, студент на основе самоанализа проводит самооценку своих достижений и корректирует образовательный маршрут. Организация развернутой системы оценки результатов обу-

чения и установление соответствия ее содержания формируемым компетенциям является действенным способом обеспечения требуемого уровня качества образования.

Очевидно, дистанционное обучение прочно вошло в образовательное пространство высшей школы. Современные тенденции требуют от преподавателя пересмотреть приемы и методы обучения в контексте использования новых технологий, актуализировать действующие параметры и критерии системы оценки результатов обучения.

---

1. Вертьянова, А.А. Особенности применения технологии критериального оценивания в современном учебном процессе // Вестник ПГГПУ. Серия № 1 «Психологические и педагогические науки». – 2016. – № 2. – С. 131-139.

2. Агапонов, С. В. Средства дистанционного обучения. Методика, технология, инструментарий. – СПб.: БХВ Петербург, 2005. – 336 с.

СОДЕРЖАНИЕ

Секция 1. Теоретическая физика и моделирование

Секция 2. Физика конденсированного состояния

Секция 3. Материаловедение

Секция 4. Оптика и лазерная физика

Секция 5. Техническая физика

Секция 6. Физическое образование

Научное издание

Адрес редакции и издателя:
675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21.

Адрес типографии:
675000, г. Благовещенск, ул. Мухина, 150а

Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование. *Материалы XIX региональной научной конференции. 27 – 30 сентября 2021 г.*

Издательство федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Амурский государственный университет». Подписано к печати 21.10.2021. Дата выхода в свет 23.11.2021. Формат 60×84/8. Усл. печ. л. 19,07. Тираж 200. Заказ 194. Бесплатно.

Отпечатано в типографии АмГУ.