

**ФИЗИКА:
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ,
ОБРАЗОВАНИЕ**

ХАБАРОВСК 2022

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

ФИЗИКА: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, ОБРАЗОВАНИЕ

*Материалы XX региональной научной конференции
(Хабаровск, 3–7 октября 2022 г.)*

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



Хабаровск
Издательство ТОГУ
2022

УДК 53:37.061.3
ББК В3л0
Ф503

Ф503 **Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование** : материалы XX региональной научной конференции (Хабаровск, 3–7 октября 2022 г.) / под ред. А. И. Мазура. – Хабаровск : Изд-во ТОГУ, 2022. – 182, [2] с. – В надзаг.: Правительство Хабаровского края, Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Тихоокеанский государственный университет.
ISBN 978-5-7389-3638-8

В сборнике представлены материалы докладов XX региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование», проведенной в октябре 2022 года. В них отражены результаты работы академических институтов, преподавателей вузов Дальневосточного региона и учителей школ Хабаровского края в области физики и физического образования.

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

УДК 53:37.061.3
ББК В3л0

ISBN 978-5-7389-3638-8

© Тихоокеанский государственный университет, 2022

УДК 004.942

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОКЛАСТЕРОВ ТЕЛЛУРИДА СВИНЦА

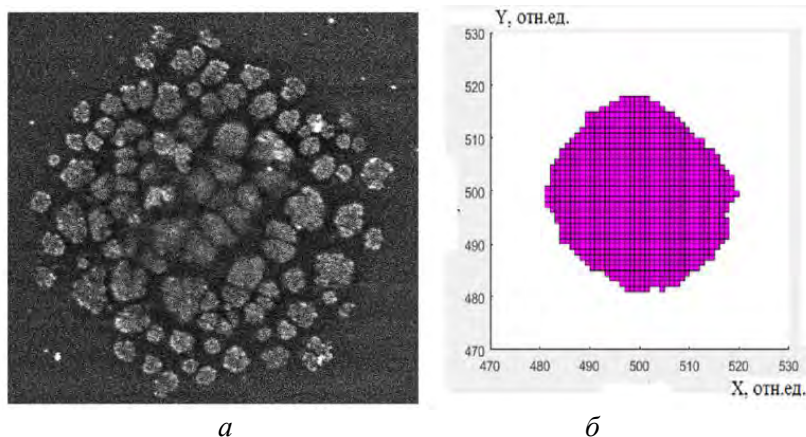
Д. Н. Бухаров

ФГБОУ ВО «Владимирский государственный университет им. А. Г. и Н. Г. Столетовых»
Владимир, e-mail: buharovdn@gmail.com

Предложена модель структуры нанокластеров теллурида свинца, полученных вследствие лазерного воздействия. Используется приближение диффузионно-ограниченной агрегации применительно для лазерноиндуцированных дефектов. Основным параметром является вероятность перемещения дефекта. Адекватность модели оценивается через соотношение фрактальных размерностей экспериментальных образцов и модельных расчетов.

Системы нанокластеров, сформированные из нанообъектов теллурида свинца, находят применение как материалы с управляемыми термоэлектрическими и оптическими свойствами, применяемые для нужд современной нанoeлектроники и оптофотоники [1].

Рассматриваемые образцы, изображенные на рис.1а, были получены за счет лазерного воздействия движущегося источника на эпитаксиальную пленку теллурида свинца [2]. Исследование их структуры, выполненное с помощью РЭМ Quanta 200 3D и зондовой нанолaborатории Integra-Auga, показало наличие нанокластеров с размерами от 50 нм до 1 мкм с топологией, существенно зависящей от времени воздействия и параметров лазерного излучения. Структура полученных систем нанокластеров достаточно достоверно может быть отнесена к фрактальной. Так, например, структура образцов, полученных после кратковременного воздействия при величинах меньше 0,3 с, может быть соотнесена с фрактальным броуновским движением. Увеличение времени до величин порядка 0,3 с воздействия позволяет генерировать образцы со структурой, соотносимой с фракталом направленной перколяции или диффузии ограниченной агрегацией. В области воздействия лазерного излучения наблюдалась термомодификация теллурида свинца без плавления и оценка температуры в центре первом приближении в ней может быть оценена примерно как 773 К.



Образец нанокластеров теллурида свинца (а), DLA модель (б)

Наблюдаемая модификация поверхности может быть объяснена в рамках дефектно-деформационной теории [3], которая позволяет оценить в первом приближении коэффициент диффузии дефектов как величину в $6 \cdot 10^{-11}$ см²/с. В связи с этим для описания формирования нанокластеров на подложке применима модель диффузионно-ограниченной агрегации (DLA) [4], реализованная методом клеточного автомата со случайными блужданиями частиц с величинами 1 отн.ед. с единичными относительными смещениями. В качестве окрестности использовалась окрестность фон Неймана [5]. Влияние температуры в этом приближении учитывается в параметре вероятности прилипания (s), который пропорционален относительному коэффициенту вероятности перемещения вакансии – ее подвижности (\bar{B}), принимающий значения из (0; 1]:

$$\bar{B} = \frac{M}{\bar{T}}, \quad M = \frac{D}{k_b}, \quad \bar{T} = \frac{T}{T_k}, \quad \bar{B} \sim s, \quad (1)$$

где D – коэффициент диффузии дефектов, k_b – постоянная Больцмана, T – температура, T_k – температура плавления [6].

Тогда при $D = 6 \cdot 10^{-11}$ см²/с, $T=773$ К, $T_k = 1197$ К получим $s=0,402$. Для этих параметров на рис. 1б изображена модель структуры нанокластеров теллурида свинца. Ее хаусдорфова размерность, полученная методом boxcounting [7], составила величину 1.841.

Радиус нанокластера составил величину 40 отн. ед. или в случае масштабного коэффициента по пространству, равного 10 нм – 400 нм. Полученное значение попадает во множество измеренных размеров нанообъектов. Разница хаусдорфовых размерностей модели и экспериментального образца составила величину порядка 0,01.

Сравнивая результаты эксперимента и моделирования можно сделать вывод об их удовлетворительном совпадении на уровне размерностей. Таким образом, предложенная модель достаточно адекватно отображает структуру экспериментальных образцов в первом приближении.

ЛИТЕРАТУРА

1. Laser nanostructuring of the PbX thin films for creation of the semiconductor devices with controlled properties / S. M. Arakelian, D.N. Bukharov, V.I. Emel'yanov, S.P. Zimin, S.V. Kutrovskaya, A. O. Kucherik, A. A. Makarov, A. V. Osipov // Physics Procedia. 2014. Vol. 56. P. 1115-1125.
2. Бимодальный ансамбль наночастиц на поверхности эпитаксиальных пленок теллурида свинца при воздействии непрерывного лазерного излучения / С. М. Аракелян, Д. Н. Бухаров, В. И. Емельянов, С. П. Зимин, С. В. Кутровская, А. О. Кучерик, А. А. Макаров, А. В. Осипов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2015. № 11. С. 41-49.
3. Емельянов В. И. Дефектно-деформационная теория образования ансамбля наночастиц с бимодальным распределением по размерам при непрерывном лазерном облучении твердых тел // Квантовая электроника. 2011. Т. 41. № 8. С. 738-741.
4. Mroczka J., Woźniak M., Onofri F.R.A. Algorithms and methods for analysis of the optical structure factor of fractal aggregates // Metrol. Meas. Syst. 2012. V. XIX. № 3. P. 459-470.
5. Zaitsev D. A. A generalized neighborhood for cellular automata // Theoretical Computer Science. 2017. V. 666. P. 21-35.
6. Связь поверхностной самодиффузии и подвижности пузырей в твердом теле: теория и атомистическое моделирование / А. С. Антропов, В. Д. Озрин, В. В. Стегайлов, В. И. Тарасов // ЖЭТФ. 2019. Т. 156. вып. 1 (7). С. 125-134.
7. Jie X., Lacidogna G. A Modified Box-Counting Method to Estimate the Fractal Dimensions // АММ. 2011. Vol. 58-60, P. 1756-1761.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛЕТА РАКЕТЫ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

Д. А. Гладких

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: 2020102741@pnu.edu.ru

В работе рассматривается численное решение задачи о полете ракеты, испытывающей силу сопротивления воздуха, с применением метода Рунге-Кутты 3 порядка точности.

Рассмотрим классическую задачу о вычислении траектории движения ракеты, выпущенной с начальной скоростью v под углом θ_0 к горизонту [1].

При построении математической модели делаются следующие допущения:

1. Дальность полета ракеты не превышает 100 км, что позволяет допустить, что Земля плоская.

2. Отсутствует боковой ветер.

3. Ракета не имеет органов управления.

4. Не учитываются силы Кориолиса.

Пункты 2, 3 и 4 позволяют допустить, что вся траектория движения ракеты лежит в одной плоскости, что, в свою очередь, позволяет уменьшить размерность задачи.

Обозначим через $x(t)$ и $y(t)$ координаты ракеты, причем считаем, что ракета стартует в момент времени $t = 0$ из точки $(0, 0)$,

$$x(0) = 0, \quad y(0) = 0. \quad (1)$$

Обозначим модуль вектора скорости через $v(t)$, угол ракеты с горизонтом через $\theta(t)$:

$$v(t) = \sqrt{(x'(t))^2 + (y'(t))^2}, \quad \theta(t) = \arctg\left(\frac{y'(t)}{x'(t)}\right). \quad (2)$$

В соответствии со вторым законом Ньютона имеем соотношение:

$$m(t) \frac{dv(t)}{dt} = F(t), \quad (3)$$

где $m(t)$ – масса ракеты, $F(t)$ – равнодействующая всех сил, приложенных к ракете. В нашем случае

$$F(t) = T(t) + F_{\text{сопр}}(t) + F_{\text{тяж}}(t). \quad (4)$$

$T(t)$ – сила тяги работающего двигателя, $F_{\text{сопр}}(t)$ – сила сопротивления воздуха, $F_{\text{тяж}}(t)$ – сила тяжести.

Сила сопротивления воздуха пропорциональна квадрату скорости ракеты, то есть:

$$F_{\text{сопр}}(t) = -\frac{1}{2} C \rho S (v(t))^2, \quad (5)$$

где S – площадь сечения ракеты плоскостью, нормалью к которой является поток воздуха (в нашем случае ракета направлена строго против потока, поэтому S является площадью поперечного сечения); $\rho = \rho(y)$ – плотность воздуха, зависящая от высоты над уровнем моря; C – коэффициент лобового сопротивления ракеты, который для дозвуковых ($v < 0,3M$) скоростей считается постоянным: $C = const$.

Будем считать, что скорость сгорания топлива постоянна, т.е. при работающем двигателе масса ракеты изменяется во времени по линейному закону:

$$m(t) = m_0 - \alpha t, \quad (6)$$

где $m(0) = m_0$ – масса полностью заправленной ракеты, α – скорость сгорания топлива ($\alpha = const$).

При сделанных допущениях уравнение движения центра массы ракеты в проекциях на оси координат запишутся в виде системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\begin{cases} x''(t) = \frac{(2T(t) - C\rho(y)S(v(t))^2)\cos(\theta(t))}{2m(t)} - m'(t)\frac{x'(t)}{m(t)} \\ y''(t) = \frac{(2T(t) - C\rho(y)S(v(t))^2)\sin(\theta(t))}{2m(t)} - m'(t)\frac{y'(t)}{m(t)} - g \end{cases} \quad (7)$$

Решение уравнений (7) должно удовлетворять начальным условиям (1), а также условиям

$$v(0) = v_0, \theta(0) = \theta_0. \quad (8)$$

В пособии [2] предлагается провести численное решение задачи Коши (2), (7), (8) при следующих исходных данных (приняв значение плотности воздуха постоянным):

$$\begin{aligned} m(0) &= 30 \text{ кг}, C = 0.2, \rho = 1.29 \text{ кг/м}^3, \\ S &= 0.25 \text{ м}^2, g = 9.81 \frac{\text{м}}{\text{с}^2}, v_0 = 50 \text{ м/с}. \end{aligned} \quad (9)$$

Начальная масса топлива равна 15 кг, двигатель работает в течение первых четырех секунд до полного выгорания топлива (то есть $\alpha = \frac{30-15}{4} = 3.75$), $T(t) = 5$ Н. Будем проводить численный эксперимент, варьируя значение плотности воздуха.

Известно, что плотность воздуха с высотой уменьшается, причем зависимость $\rho(y)$ нелинейна. На уровне моря плотность воздуха равна 1.225 кг/м^3 , на высоте 5 км над уровнем моря она уменьшается до 0.7365 кг/м^3 .

В [2] плотность задается равной 1.29 кг/м^3 , но в этом случае погрешность на высоте 5 км составляет 53%.

Для описания изменения плотности воздуха с высотой в данной работе выполнена аппроксимация имеющихся опытных данных о значениях плотности на разных высотах (рис. 1).

Аппроксимация проведена методом наименьших квадратов экспоненциальной функцией, в результате получена формула для плотности воздуха $\rho(y) = 1,225e^{-0,0001y}$.

Для решения задачи Коши для данной системы ОДУ была разработана программа на ЭВМ. Она использует численный метод Рунге-Кутты третьего порядка точности.

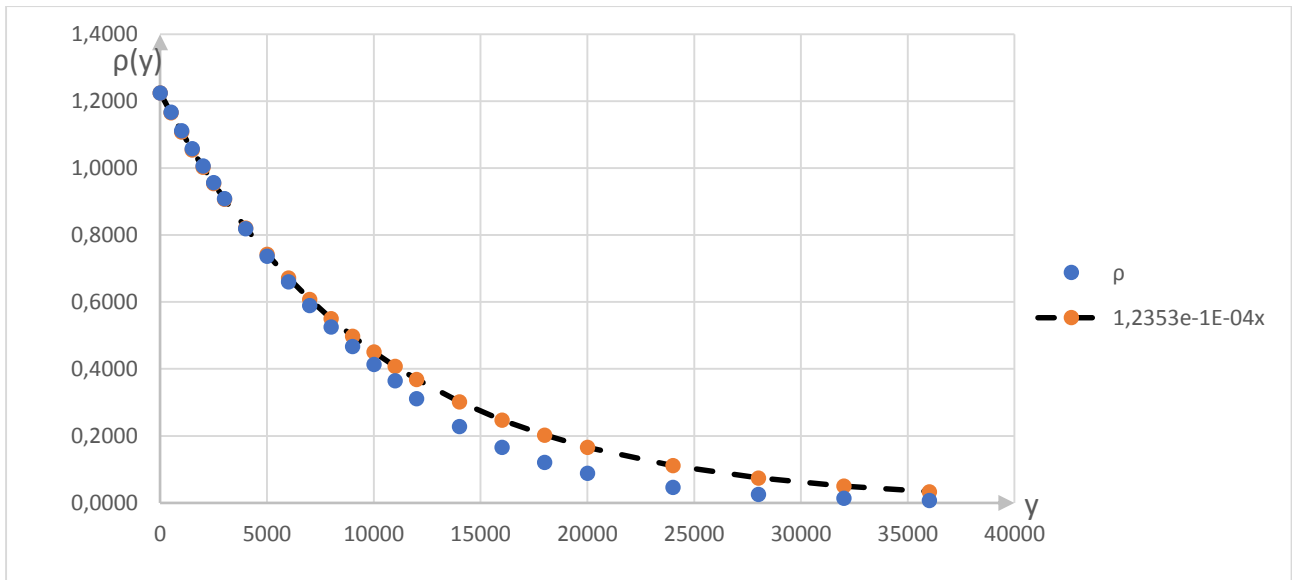


Рис. 1. Аппроксимация значений плотности воздуха на высоте до 36 км над уровнем моря

Метод Рунге-Кутты – это семейство численных методов для решения задачи Коши для системы ОДУ. Численное решение находится путем итераций, на каждой из которых производятся одно или несколько вычислений в зависимости от порядка метода. Для достижения 3 порядка точности требуется использовать трех стадийный метод. В случае функции двух переменных одна итерация s-стадийного метода Рунге-Кутты выглядит следующим образом (вычисляется значение y):

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(x_n, y_n), \\
 k_2 &= f(x_n + c_2h, y_n + a_{21}hk_1), \\
 k_3 &= f(x_n + c_3h, y_n + a_{31}hk_1 + a_{32}hk_2), \\
 &\dots \\
 k_s &= f(x_n + c_sh, y_n + a_{s1}hk_1 + a_{s2}hk_2 + \dots + a_{s,s-1}hk_{s-1}), \\
 y_{n+1} &= y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i.
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

Коэффициенты для данного метода принято располагать в виде треугольной таблицы Батчера (табл. 1, 2):

Таблица 1

Таблица Батчера

0					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
...		
c_q	a_{q1}	a_{q2}	...	$a_{q,q-1}$	
	b_1	b_2	...	b_{q-1}	b_q

Для трехстадийного метода:

Таблица 2

Таблица Батчера для $q = 3$

0	0		
1/2	1/2	0	
1	-1	2	0
	1/6	4/6	1/6

Коэффициенты до 4 порядка включительно приведены в [3].

Результаты численного моделирования с использованием программного средства представлены на графиках (рис. 2-6).

На рис. 2 приведены результаты расчетов для случая, когда ракета выпущена вертикально вверх.

На левом графике можно заметить, что присутствует погрешность вычисления, связанная с использованием численного метода. В идеальном случае на графике должна быть вертикальная линия.

График справа иллюстрирует изменения угла $\theta(t)$: при подъеме угол положителен и численно равен $\pi/2$, затем, после прохождения точки с $v_y = 0$, угол становится противоположным ($-\pi/2$ к горизонту).

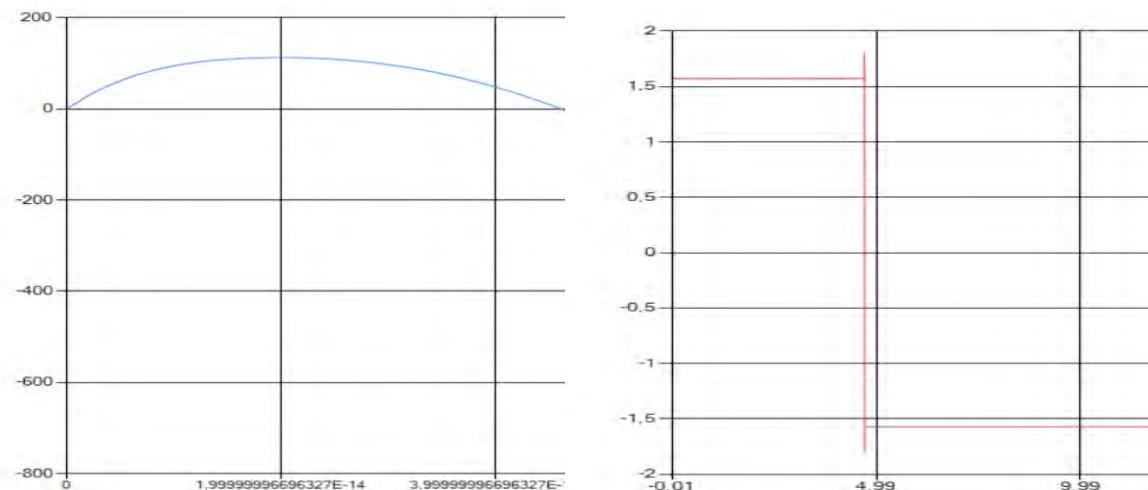


Рис. 2. Графики $y(x)$ и $\theta(t)$ соответственно при угле запуска $\theta_0 = 90^\circ$

В следующих вычислительных экспериментах исследовано влияние изменения плотности воздуха с высотой. Сравнение дальности и высоты полета ракеты проведены при угле запуска $\theta_0 = 45^\circ$.

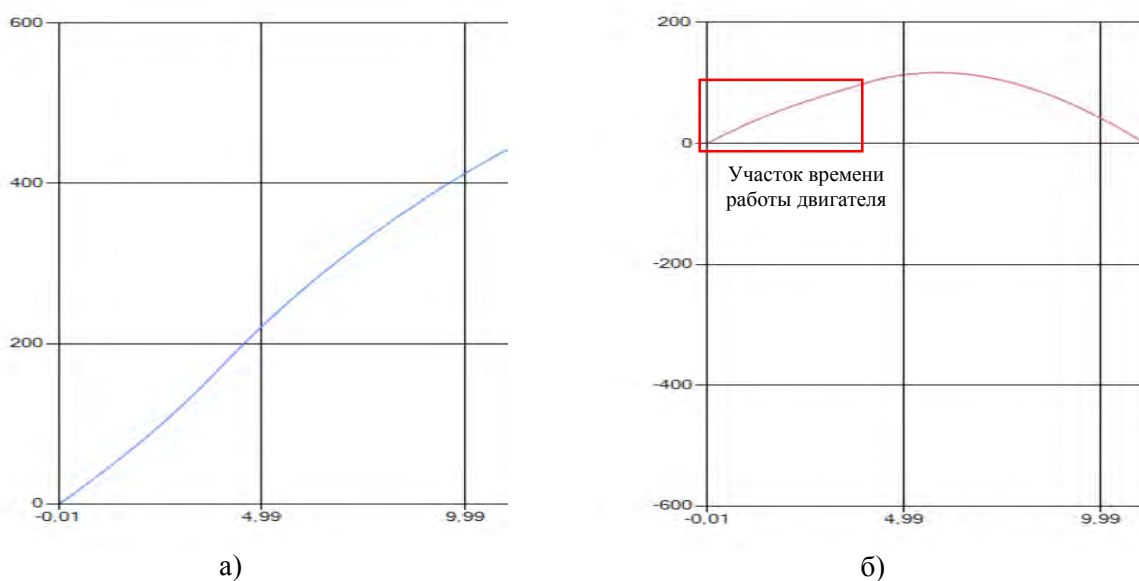
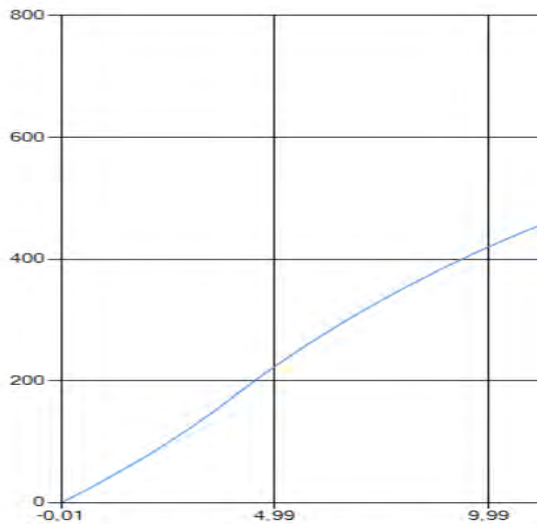
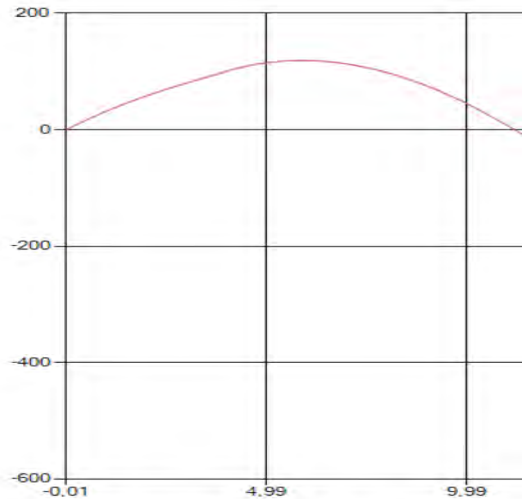


Рис. 3. Графики $x(t)$ и $y(t)$ соответственно при $\rho = \text{const} = 1,29 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$



а)



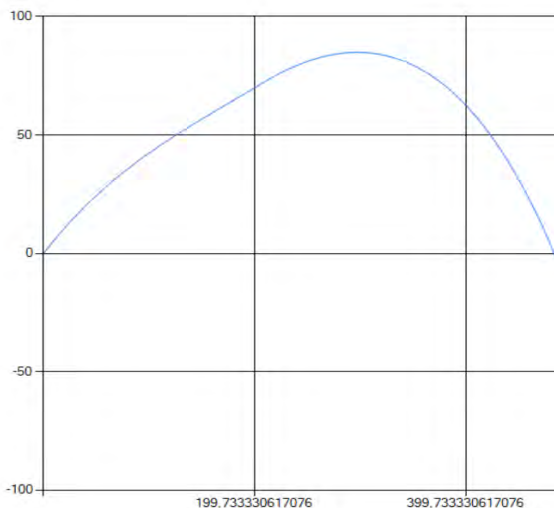
б)

Рис. 4. Графики $x(t)$ и $y(t)$ соответственно при $\rho \neq \text{const}$

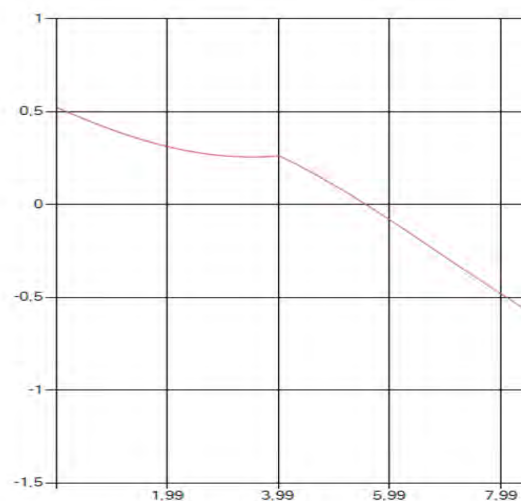
На графике, представленном на рис. 3, а, отметка в 400 м преодолена позже, чем на графике, изображенном на рис. 4, а, что позволяет сделать вывод о том, что плотность воздуха оказывает на систему ощутимое влияние уже при подъеме на высоту 120 м.

Заметим, что на участке от 0 до 4 секунд, пока работает двигатель, ракета движется с ускорением, графики $x(t)$ и $y(t)$ выпуклы вниз (ускорение является положительным).

Данная модель позволяет оценить влияние внешних сил (гравитация, сопротивление воздуха) на полетные характеристики при разных начальных условиях. На рис. 5 приведены графики изменения высоты и угла при $\theta_0 = 30^\circ$, $\rho = 1,29 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. Поведение функции $\theta(t)$ на графике справа при $t \in [0, 4]$ свидетельствует о нехватке мощности двигателя для преодоления сил гравитации и сопротивления воздуха при данном угле запуска. Зависимость дальности полета ракеты от угла запуска при $\theta \in [30^\circ, 80^\circ]$ показана на рис. 6.



а)



б)

Рис. 5. Графики $y(x)$ и $\theta(t)$

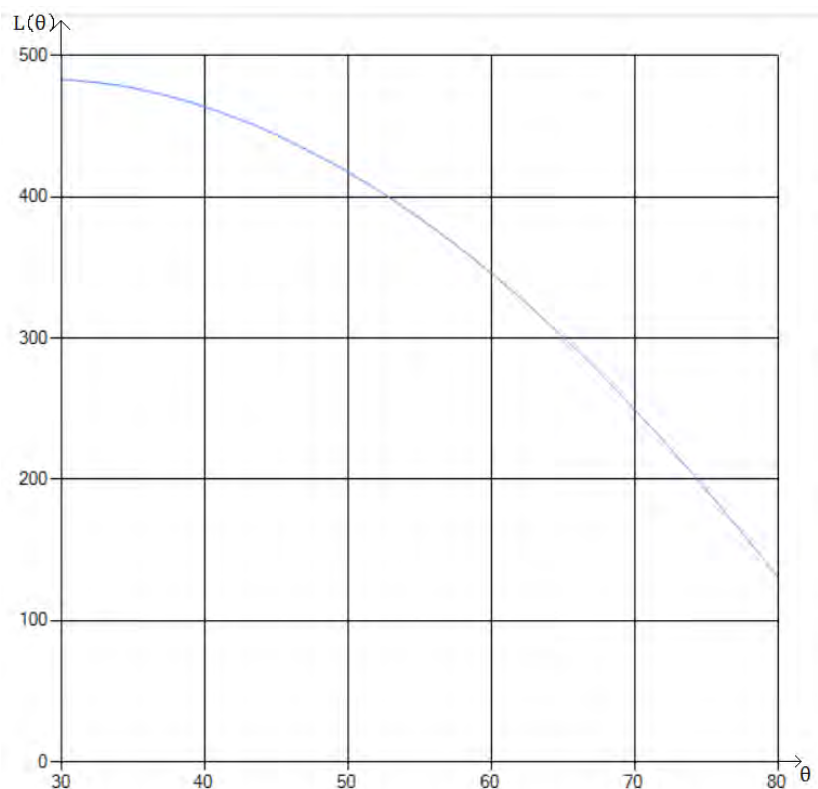


Рис. 6. График $L(\theta)$

Таким образом, было проведено численное моделирование полета ракеты при постоянной и переменной плотности воздуха.

Было выявлено, что с использованием более реалистичной модели изменения плотности воздуха максимальная высота полета больше, чем при его постоянном значении.

В заключение добавим, несмотря на то, что задача о полете ракеты широко известна и многократно исследована, усложнение модели позволяет получить новые результаты, более приближенные к реальным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Galilei G. Ms. Gal. 72 / Florence: Biblioteca Nazionale Centrale, 1999. 196 p.
2. Даутов Р. З. Практикум по курсу численные методы. Решение задачи Коши для системы ОДУ // Казань: Изд-во Казанск. федер. ун-та, 2014. 100 с.
3. Демченко В. В. Метод Рунге-Кутты решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка: уч. метод. пособие по курсу «Вычислительная математика» / Сост. В. В. Демченко. М.: МФТИ, 2004. 20 с.

ВЛИЯНИЕ ФАЗОВО-ЭКВИВАЛЕНТНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ НА ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПРЕДСКАЗАНИЯ СВОЙСТВ ДЕЙТРОНА

Е. В. Демьяненко, А. И. Мазур

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: k.v.demyan@gmail.com

В работе исследовано влияние параметров фазово-эквивалентных преобразований реалистического NN-взаимодействия JISP16 на статические характеристики дейтрона. Проведены расчеты зависимостей среднеквадратичного радиуса, квадрупольного момента и вероятности d -состояния дейтрона от непрерывного параметра β различных фазово-эквивалентных преобразований.

Введение

В ядерной физике главной задачей является изучение и описание свойств ядер и реакций с их участием. Однако в настоящее время не существует единой теории ядра и ядерных реакций, что обусловлено, главным образом, следующими причинами: во-первых, неизвестен явный вид ядерных сил, а во-вторых, ядро представляет многочастичную систему.

Для решения этой проблемы в современных расчетах ядер используются различные модели и подходы. В связи с быстрым развитием возможностей суперкомпьютеров все большее внимание привлекают так называемые подходы *ab initio*.

В таких подходах в теории ядра в качестве входной информации используется только реалистическое нуклон-нуклонное взаимодействие. Одним из наиболее эффективных подходов *ab initio* для описания ядер с атомным числом A вплоть до 20 является модель оболочек без инертного кора (МОБИК) [1], в которой все нуклоны являются спектроскопически активными.

Реалистическое NN-взаимодействие, в отличие от модельных феноменологических потенциалов, строится таким образом, чтобы с высокой степенью точности описать как свойства дейтрона, так и характеристики нуклон-нуклонного рассеяния в различных парциальных волнах в достаточно широком интервале энергий (до 350 МэВ в лабораторной системе). Известно, что кулоновское взаимодействие можно было бы восстановить только по спектру атома водорода, который включает бесконечное число состояний. К сожалению, наиболее простая ядерная система – дейтрон – имеет только одно связанное состояние, и однозначно потенциал восстановить невозможно даже с учетом данных по рассеянию.

Сейчас существует много моделей реалистических взаимодействий, с высокой степенью точности свойства дейтрона и рассеяние нуклонов друг на друге (например, потенциалы CD-Bonn [2], Nijmegen [3], Argonne [4]), количество новых вариантов подобных взаимодействий ежегодно растет. Однако и этого оказывается недостаточным при описании свойств более тяжелых ядер с $A > 2$.

Необходимо учитывать возможность существования трехчастичных (и более) сил, строить соответствующие модели, и включать их в схему расчета, что увеличивает необходимый объем вычислительных ресурсов и приводит к менее точным предсказаниям.

В нашей работе мы будем использовать взаимодействие JISP16 [5], построенное методом обратной задачи рассеяния [6] с применением фазово-эквивалентных преобразований (ФЭП).

Достоинством JISP16 является то, что сам метод его построения и подбора параметров позволяет отказаться от использования трехчастичных сил.

Цель настоящей работы заключается в исследовании влияния параметров ФЭП на предсказания статических характеристик дейтрона (среднеквадратичный радиус, квадрупольный момент и вероятность d состояния) в расчетах с реалистическим NN -взаимодействием JISP16.

Построение NN -потенциала JISP16 и применение ФЭП

Реалистическое взаимодействие JISP16 [7] строится методами обратной задачи рассеяния [6] на основе известных экспериментальных сдвигов фаз нуклон-нуклонного рассеяния в разных парциальных волнах и энергии связи единственного связанного состояния двухнуклонной системы – дейтрона. Обратная задача решается в рамках метода J -матрицы с осцилляторным базисом, известного также как HORSE (Harmonic Oscillator Representation of Scattering Equations) [8].

В HORSE радиальная функция $u_l(E, r)$ состояния рассеяния разлагается по полному набору осцилляторных функций $R_{nl}(r)$:

$$u_l(E, r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{nl}(E) R_{nl}(r). \quad (1)$$

Волновые функции $a_{nl}(E)$ в пространстве осцилляторных функций являются решением бесконечной системы уравнений

$$\sum_{n'=0}^{\infty} (H_{nn'}^l - \delta_{nn'} E) a_{n'l}(E) = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \infty. \quad (2)$$

Элементы матрицы гамильтониана $H_{nn'}^l$ представляют собой сумму элементов матрицы кинетической энергии $T_{nn'}^l$ и матрицы потенциальной энергии $V_{nn'}^l$

$$H_{nn'}^l = T_{nn'}^l + V_{nn'}^l. \quad (3)$$

Бесконечная матрица кинетической энергии является трехдиагональной. Ее элементы

$$\begin{aligned} T_{n,n-1}^l &= T_{n-1,n}^l = -\frac{1}{2} \sqrt{n \left(n + l + \frac{1}{2} \right)}; \\ T_{nn}^l &= \frac{1}{2} \left(2n + l + \frac{3}{2} \right), \end{aligned} \quad (4)$$

линейно растут по мере увеличения n . В то же время элементы матрицы потенциальной энергии $V_{nn'}^l$ для большинства короткодействующих взаимодействий убывают с ростом n, n' . Поэтому в HORSE бесконечную матрицу потенциала аппроксимируют матрицей конечного размера:

$$\tilde{V}_{nn'}^l = \begin{cases} V_{nn'}^l, & \text{если } n, n' \leq N \\ 0, & \text{если } n \text{ или } n' > N \end{cases}. \quad (5)$$

В результате осцилляторное пространство разделяется на два подпространства: внутреннее ($n, n' \leq N$) и внешнее (n или $n' > N$).

При этом матрица кинетической энергии и, следовательно, система уравнений (2), остаются бесконечными.

Важно подчеркнуть, что задача (2) с матрицей потенциала конечного размера (5) имеет точное решение. Таким образом, исходная задача сводится, по сути, к вопросу аппроксимации локального потенциала нелокальным взаимодействием, представленным матрицей конечного размера в осцилляторном базисе.

Во внешней (асимптотической) области (n или $n' > N$), уравнение (2) отвечает движению свободной частицы и принимает вид трехчленного рекуррентного соотношения

$$T_{n,n-1}^l a_{n-1,l} + (T_{n,n}^l - E) a_{n,l} + T_{n,n+1}^l a_{n+1,l} = 0. \quad (6)$$

Уравнению (6) удовлетворяют два фундаментальных осцилляторных решения: регулярное $S_{nl}(E)$ и нерегулярное $C_{nl}(E)$, аналитический вид которых известен. Таким образом, во внешней области решение уравнения (2) всегда можно представить в виде суперпозиции регулярного $S_{nl}(E)$ и нерегулярного $C_{nl}(E)$ осцилляторных решений. Например, в случае асимптотики стоячей волны любое решение во внешней области можно представить как:

$$a_{nl}^{ass}(E) = \cos\delta(E)S_{nl}(E) + \sin\delta(E)C_{nl}(E), \quad (7)$$

где $\delta(E)$ – сдвиг фазы рассеяния [8].

Функции внутренней области ($n \leq N$) в HORSE могут быть найдены как

$$a_{nl}(E) = G_{nN} T_{N,N+1}^l a_{N+1,l}^{ass}(E), \quad (8)$$

где элементы матрицы

$$G_{nN} = - \sum_{\lambda'=0}^N \frac{\langle n|\lambda'\rangle\langle\lambda'|n'\rangle}{E_{\lambda'} - E} \quad (9)$$

выражаются через собственные значения E_λ и собственные векторы $\langle n|\lambda\rangle$ матрицы гамильтониана внутренней области, то есть являются решением задачи

$$\sum_{n'=0}^N (H_{nn'}^l - \delta_{nn'}E) a_{n'l}(E) = 0, \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (10)$$

Функция $a_{N,l}$ на границе N одновременно удовлетворяет уравнениям и внешней, и внутренней области. Из условия сшивки $a_{N,l} = a_{N,l}^{ass}$ нетрудно получить формулу для расчета сдвига фаз:

$$\tan\delta(E) = - \frac{S_{Nl}(E) - G_{NN} T_{N,N+1}^l S_{N+1,l}(E)}{C_{Nl}(E) - G_{NN} T_{N,N+1}^l C_{N+1,l}(E)} \quad (11)$$

Аналогичные выражения можно получить для S -матрицы и других характеристик рассеяния.

Формулы (1) – (11) полностью иллюстрируют идею метода HORSE.

Параметрами HORSE являются размер матрицы обрезанного гамильтониана N и осцилляторная энергия $\hbar\Omega$.

Используя формализм HORSE, мы можем построить гамильтониан взаимодействия по известным сдвигам фаз рассеяния $\delta_l(E)$ в некоторой парциальной волне l . Экспериментальные данные обычно известны при определенных значениях энергий. В этом случае, для получения непрерывной зависимости можно использовать методы интерполяции.

Пусть нам известны сдвиги фаз $\delta_l(E)$ в некотором диапазоне энергий. Выберем и зафикси-

сиреуем параметры N и $\hbar\Omega$. Волновые функции $a_{nl}(E)$ для любого значения n должны быть конечными при любой энергии E , включая $E = E_\lambda$. Тогда из формул (8) и (9) следует, что должно выполняться равенство $a_{N+1,l}^{ass}(E_\lambda) = 0$. В результате, рассматривая выражение

$$a_{N+1,l}^{ass}(E) = \cos\delta(E)S_{N+1,l}(E) + \sin\delta(E)C_{N+1,l}(E) = 0 \quad (12)$$

как трансцендентное уравнение относительно энергий, мы можем по известным при любых энергиях сдвигам фаз определить набор собственных энергий E_λ .

Из формул (8) и (9) можно получить [6] выражения для последних компонент собственных векторов матричного гамильтониана:

$$\langle N|\lambda\rangle^2 = \frac{a_{Nl}(E_\lambda)}{\alpha_l^\lambda T_{N,N+1}^l}, \quad (13)$$

где

$$\alpha_l^\lambda = \frac{da_{N+1,l}(E_\lambda)}{dE}. \quad (14)$$

По собственным значениям E_λ и компонентам собственных векторов $\langle N|\lambda\rangle$ используя ортонормированность и полноту набора базисных функций внутренней области можно восстановить гамильтониан (и, следовательно, потенциал) взаимодействия в виде трехдиагональной симметричной матрицы размера $(N+1) \times (N+1)$. Параметрами такого взаимодействия являются элементы матрицы. Общее количество ненулевых элементов матрицы потенциала с учетом эрмитовости гамильтониана равно $2N-1$.

В случае связанных каналов задача построения матрицы потенциала является более сложной, однако идея остается прежней. Отметим, что при рассмотрении нейтрон-протонного рассеяния в парциальной волне 3sd_1 , (связанные тензорными силами s и d -каналы рассеяния), дополнительно к фазам рассеяния в качестве входной информации необходимо использовать энергию связи дейтрона. Матрицы потенциалов в двухканальных случаях имеют блочную структуру. Диагональные по каналам блоки полностью аналогичны одноканальным потенциалам. Недиагональные по каналам – тензорные силы – имеют по 2 ненулевых элемента в каждой строке. Как и в одноканальном случае, полная матрица гамильтониана является эрмитовой, а матрица потенциала – симметричной.

Однако рассмотренный выше способ построения взаимодействия не является однозначным. Это можно продемонстрировать с помощью определенного класса преобразований гамильтониана, которые не приводят к изменению фаз рассеяния и энергий связанных состояний – фазово-эквивалентных преобразований.

В матричном виде такие преобразования гамильтониана можно представить следующим образом:

$$[\tilde{H}] = [U][H][U^+]. \quad (15)$$

Здесь $[H]$, $[\tilde{H}]$ – матрицы гамильтониана до и после преобразования, $[U]$ – унитарная матрица ФЭП и $[U^+]$ – эрмитово-сопряженная матрица ФЭП.

В наиболее простом случае матрица $[U]$ перемешивает только две базисные функции матрицы гамильтониана и может быть схематически представлена в блочном виде как

$$[U] = \begin{bmatrix} [U_0] & 0 \\ 0 & [I] \end{bmatrix}, \quad (16)$$

где $[I]$ – единичная матрица, а матрица $[U_0]$ имеет вид матрицы поворота

$$[U_0] = \begin{bmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Матрица $[U_0]$ может смешивать любые две базисные функции n_1, n_2 . Параметр β является непрерывным, и может варьироваться в пределах от -180° до 180° .

Очевидно, подобные преобразования не приводят к изменению энергии связанного состояния и к изменению фаз рассеяния, то есть являются фазово-эквивалентными.

Рассмотренная неоднозначность представляет существенную и важную особенность взаимодействия JISP16. Используя ФЭП в разных парциальных волнах и аккуратно подбирая их параметры можно добиться более точных предсказаний характеристик сложных ядер без использования трехчастичных сил.

Этим взаимодействие JISP16 выгодно отличается от других реалистических потенциалов.

Результаты теоретических расчетов

При построении потенциала JISP16 использовалась осцилляторная энергия $\hbar\Omega = 40$ МэВ. Вторым параметр N в каждой парциальной волне выбирался таким образом, чтобы можно было описать сдвиги фаз нерелятивистского рассеяния в разных парциальных волнах вплоть до энергии $E = 350$ МэВ в лабораторной системе отсчета.

Этому требованию при выбранном $\hbar\Omega = 40$ МэВ удовлетворяет максимальное полное число осцилляторных квантов в парциальных волнах с четным орбитальным моментом $2N + l = 10$, а в нечетных парциальных волнах $-2N + l = 9$.

В результате потенциал JISP16 в связанных sd -волнах представлен матрицей размером (9×9) (рис.1), имеющей блочную структуру. Диагональные по каналам подматрицы размером (5×5) и (4×4) описывают взаимодействие непосредственно в s - и d -каналах.

Недиагональные по каналам блоки (5×4) и (4×5) – это тензорное взаимодействие, описывающее связь двух парциальных волн с разными орбитальными моментами $l = 0$ и $l = 2$.

В силу эрмитовости гамильтониана недиагональные по каналам подматрицы транспонированы друг относительно друга.

Для удобства анализа ФЭП базисные функции на рис. 1 пронумерованы от 1 до 9, при этом первые пять функций отвечают каналу s ($n = 0, 1, 2, 3$ и 4 ; $l = 0$), а следующие 4 – каналу d ($n = 0, 1, 2$, и 3 ; $l = 2$).

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	×	•	0	0	0	•	×	0	0
2	•	•	•	0	0	•	•	0	0
3	0	•	•	•	0	0	•	•	0
4	0	0	•	•	•	0	0	•	•
5	0	0	0	•	•	0	0	0	•
6	•	•	0	0	0	•	•	0	0
7	×	•	•	0	0	•	×	•	0
8	0	0	•	•	0	0	•	•	•
9	0	0	0	•	•	0	0	•	•

Рис. 1. Структура матрицы взаимодействия JISP16 в случае связанных sd каналов

Ненулевые матричные элементы на рис. 1 представлены красными кружками.

Для исследования влияния параметров ФЭП на характеристики дейтрона в расчетах с реалистическим NN -взаимодействием JISP16 мы будем брать различные значения базисных функций n_1, n_2 , принадлежащие разным каналам.

Соответствующие ФЭП будем обозначать как $\{n_1, n_2\}$.

В результате фазово-эквивалентных преобразований матричные элементы потенциала меняются.

Кроме этого, появляются дополнительные ненулевые элементы, например, как указано на рис.1, элементы V_{17} и сопряженный ему V_{71} , отмеченные косыми крестиками в случае ФЭП $\{n_1 = 1, n_2 = 7\}$.

Ниже на рисунках представлены результаты расчетов среднеквадратичного радиуса r (рис. 2а), квадрупольного момента Q (рис. 3а) и вероятности d -состояния (рис. 4а) в зависимости от β для разных $\{n_1, n_2\}$ (значения n_1, n_2 на рисунках приведены в легенде).

Горизонтальные линии на рисунках соответствуют экспериментальным значениям: $r = 1.968$ фм, $Q = 2.707$ мбарн, вероятность d -состояния – 5.635 %.

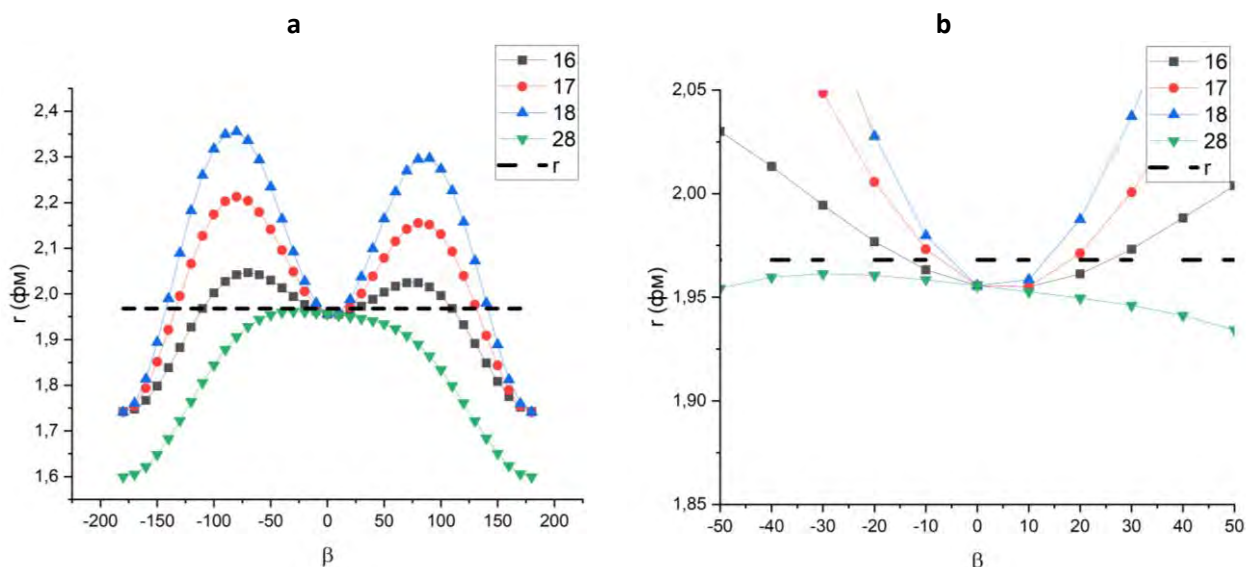


Рис. 2. Зависимость среднеквадратичного радиуса дейтрона от параметра β для разных ФЭП. На правой панели – зависимость $r(\beta)$ в увеличенном масштабе

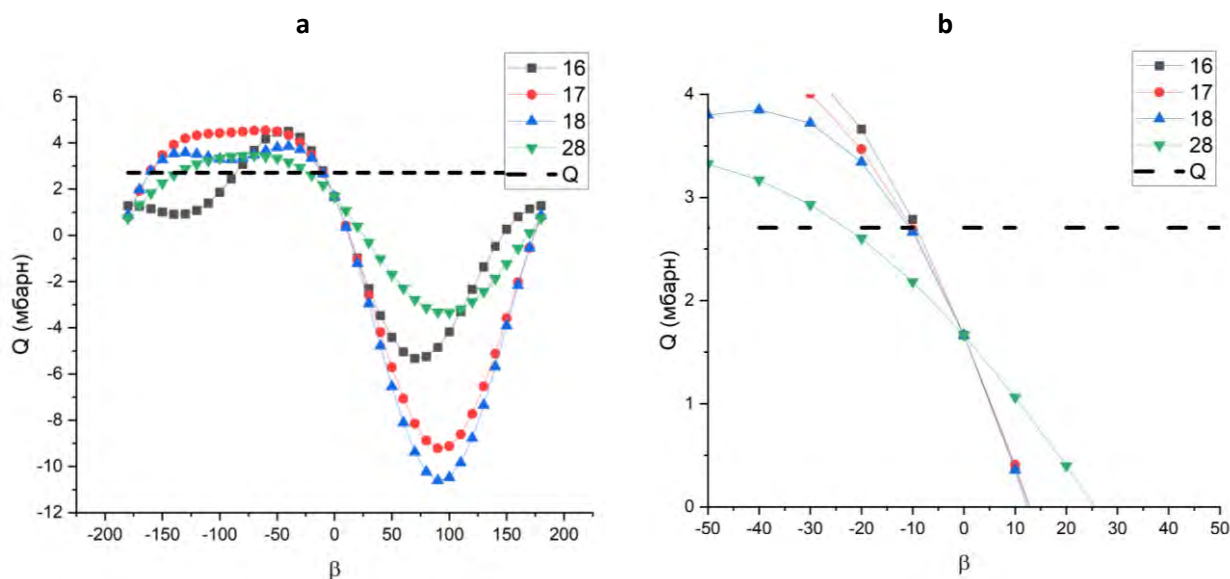


Рис. 3. Зависимость квадрупольного момента дейтрона от параметра β для разных ФЭП. На правой панели – зависимость $Q(\beta)$ в увеличенном масштабе

Рассмотренные характеристики дейтрона в зависимости от β варьируются в достаточно больших пределах. Для каждого ФЭП $\{n_1, n_2\}$ кривые зависимостей $r(\beta)$, $Q(\beta)$, и вероятности d -состояния отличаются от соответствующих кривых, полученных с другими ФЭП. Например, если в ФЭП обе базисные функции n_1 и n_2 принадлежат только s - волне (или только d -волне), то вероятность d -состояния меняться не будет. Поэтому подобные ФЭП мы не рассматривали. Если же базисные функции берутся из разных блоков, то практически для

всех ФЭП $\{n_1, n_2\}$ наблюдаются пересечение кривых с горизонтальными линиями, соответствующими экспериментальным значениям. Именно этот факт позволяет определить оптимальные значения параметра β , при котором результаты расчетов характеристик дейтрона наиболее близки к соответствующим экспериментальным данным.

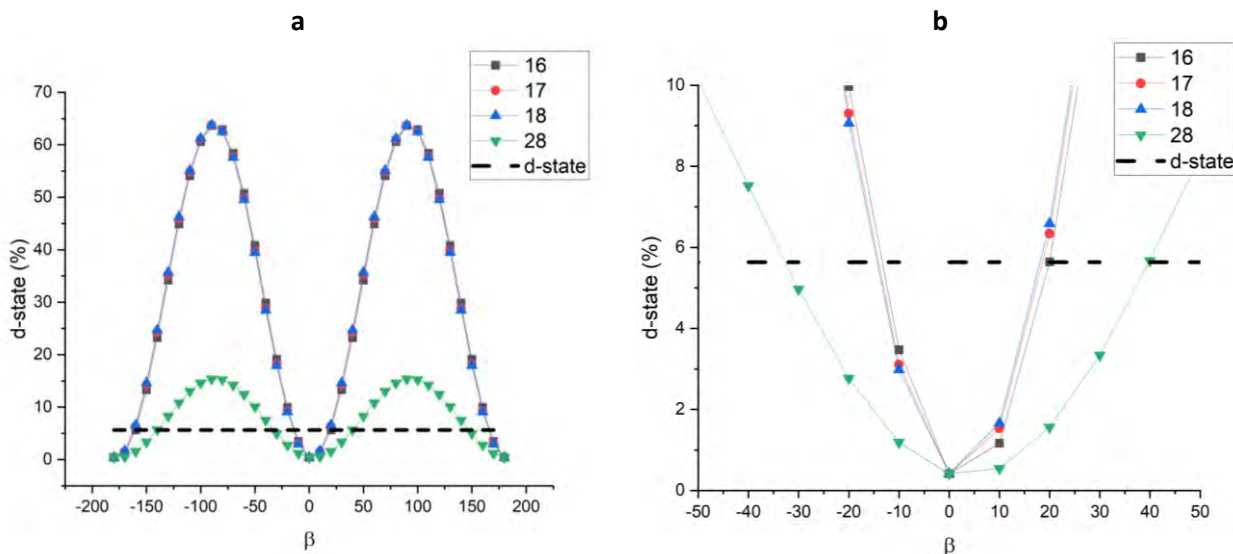


Рис. 4. Зависимость вероятности d-состояния волновой функции дейтрона от параметра β для разных ФЭП. На правой панели – то же самое в увеличенном масштабе

Рассмотрим точки пересечения кривых $r(\beta)$ с горизонтальной линией, отвечающей экспериментальному значению на полученных графиках. Видно, что для ФЭП $\{n_1 = 1, n_2 = 6\}$ (рис. 2b) пересечение происходит при $\beta = -11^\circ$, для ФЭП $\{1,7\}$ оптимальным является значение $\beta = -7^\circ$, для ФЭП $\{1,8\}$ – $\beta = -4^\circ$. В случае ФЭП $\{2,8\}$ пересечения нет, но минимальная разница $r(\beta)$ с экспериментальным значением наблюдается для $\beta = -30^\circ$.

Рассмотрим теперь при этих же β и n_1, n_2 результаты для квадрупольного момента (рис.3b) и вероятности d-состояния (рис. 4b). В случае ФЭП $\{n_1 = 1, n_2 = 6\}$ при $\beta = -11^\circ$ квадрупольный момент несколько больше экспериментального, а значение вероятности d-состояния – ниже. Однако следует отметить, что среднеквадратичный радиус и квадрупольный момент дейтрона достаточно точно измеряются в экспериментах, тогда как вероятность d-состояния определяется косвенно.

Поэтому при выборе оптимальных значений непрерывного параметра β для разных ФЭП мы в первую очередь следили за точностью описания r и Q .

Оптимальные параметры различных ФЭП и соответствующие результаты расчетов характеристик дейтрона приведены в таблице. Для сравнения в этой же таблице даны расчеты без ФЭП и экспериментальные значения.

Сравнение результатов расчетов характеристик дейтрона с различными ФЭП и экспериментальных данных

	Эксперимент	JISP16 (без ФЭП)	$\{n_1 = 1, n_2 = 6\}$ $\beta = -11^\circ$	$\{n_1 = 1, n_2 = 7\}$ $\beta = -7^\circ$	$\{n_1 = 1, n_2 = 8\}$ $\beta = -4^\circ$	$\{n_1 = 2, n_2 = 8\}$ $\beta = -30^\circ$
r , фм	1.968	1.956	1.964	1.966	1.962	1.961
Q , мбарн	2.707	1.565	2.886	2.409	2.103	2.932
d-state, %	5.635	0.413	3.978	1.584	0.987	4.966

Заклучение

Мы рассмотрели влияние фазово-эквивалентных преобразований реалистического NN-взаимодействия JISP16 на статические характеристики дейтрона: среднеквадратичный радиус, квадрупольный момент и вероятность d -состояния. Были исследованы различные ФЭП. На основе анализа зависимости перечисленных характеристик от непрерывного параметра β выбраны ФЭП, которые позволяют одновременно улучшить описание экспериментальных значений. К таким ФЭП относятся:

1. $\{n_1 = 1, n_2 = 6\}$.
2. $\{n_1 = 1, n_2 = 7\}$.
3. $\{n_1 = 1, n_2 = 8\}$.
4. $\{n_1 = 2, n_2 = 8\}$.

Для перечисленных ФЭП были определены оптимальные значения параметра β , с которыми характеристики дейтрона воспроизводятся наиболее точно. При выборе оптимальных значений параметра β для разных ФЭП мы в первую очередь следили за точностью описания среднеквадратичного радиуса r и квадрупольного момента Q , так как вероятность d -состояния из экспериментальных данных определяется косвенно.

Из результатов, представленных в таблице видно, что не все значения характеристик дейтрона для выбранных ФЭП имеют близкие к экспериментальным значения. Так, в случае ФЭП $\{n_1 = 1, n_2 = 8\}$ хороший результат для среднеквадратичного радиуса наблюдается при $\beta = -4^\circ$, но при этом квадрупольный момент сильно отличается от экспериментального значения, а вероятность d -состояния имеет наибольшее расхождение с экспериментом. Схожая ситуация наблюдается для ФЭП $\{n_1 = 1, n_2 = 7\}$ с оптимальным параметром $\beta = -7^\circ$. Наиболее точное описание характеристик дейтрона удается добиться в случае ФЭП $\{n_1 = 1, n_2 = 6\}$ с параметром $\beta = -11^\circ$.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках проекта № 0818-2020-0005 с использованием ресурсов Центра коллективного пользования «Центр данных ДВО РАН».

ЛИТЕРАТУРА

1. Barrett B. R., Navrátil P., Vary J. P. Ab initio no core shell model // Prog. Part. Nucl. Phys. 2013. V. 69. P. 131-181.
2. Machleidt R. High-precision, charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential // Phys. Rev. C. 2001. V. 63. P. 024001.
3. Construction of high-quality NN potential models / V. G. J. Stoks, R. A. M. Klomp, C. P. F. Terheggen, and J. J. de Swart // Phys. Rev. C 1994. V. 49. P. 2950.
4. Wiringa R. B., Stoks V. G. J., and Schiavilla R. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking // Phys. Rev. C. 1995. V. 51. P.38.
5. Realistic nuclear Hamiltonian: Ab exitu approach / A. M. Shirokov, A. I. Mazur, J. P. Vary, T. A. Weber. // Physics Letters B. 2007. V. 644. P. 33-37.
6. Nucleon-nucleon interaction in the J-matrix inverse scattering approach and few-nucleon systems / A. M. Shirokov, A. I. Mazur, S. A. Zaytsev, J. P. Vary, T. A. Weber. // Physical Review C. 2004. V. 70. P. 044005-1– 044005-24.
7. N3LO NN interaction adjusted to light nuclei in ab exitu approach / A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, M. Sosonkina, P. Maris, and J. P. Vary. // Phys. Lett. B. 2016. V. 761. P.87.
8. P-Matrix and J-Matrix Approaches: Coulomb Asymptotics in the Harmonic Oscillator Representation of Scattering Theory / J. M. Bang, A. I. Mazur, A. M. Shirokov, Yu. F. Smirnov and S. A. Zaytsev // Ann. Phys. (NY). 2000. V. 280. P. 299-335.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРВОГО ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ ЯДРА ${}^6\text{He}$
НА ОСНОВЕ РАСЧЕТОВ *AB INITIO*
С РЕАЛИСТИЧЕСКИМ НУКЛОН-НУКЛОННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

М. К. Ефименко, И. А. Мазур

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: 2019105727@pnu.edu.ru

По данным расчетов ab initio с реалистическим нуклон-нуклонным взаимодействием были определены значения энергии и ширины резонанса первого возбужденного состояния ${}^6\text{He}$. Для решения использовались методы HORSE, SS HORSE и параметризация методом обратной задачи рассеяния в HORSE.

Целью представленной работы является определение энергии и ширины первого возбужденного состояния ядра ${}^6\text{He}$ по данным расчетов *ab initio* с реалистическим нуклон-нуклонным взаимодействием Daejeon16 [1] ядер ${}^6\text{He}$ и ${}^4\text{He}$.

Метод HORSE

Метод Harmonic Oscillator Representation of Scattering Equation (осцилляторное представление уравнений теории рассеяния), или HORSE, является одним из эффективных методов расчета параметров рассеяния квантовой частицы в поле потенциала.

Основная идея метода состоит в представлении решения радиального уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}u_l(k, r) = Eu_l(k, r)$$

в виде разложения по бесконечному набору радиальных осцилляторных функций:

$$u_l(k, r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{nl}(k) R_{nl}(r); R_{nl} = (-1)^n \sqrt{\frac{2n!}{r_0 \Gamma\left(n + l + \frac{3}{2}\right)}} \left(\frac{r}{r_0}\right)^{l+1} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2}\right) L_n^{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{r^2}{r_0^2}\right),$$

где $r_0 = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$ – осцилляторный радиус, n – радиальное квантовое число, $\Gamma(x)$ – гамма-функция, $L_n^\alpha(x)$ – обобщенный полином Лагерра.

В формализме HORSE фазы рассеяния могут быть вычислены как:

$$\text{tg } \delta_l(E) = -\frac{S_{Nl}(E) - G_{NN} T_{N,N+1}^l S_{N+1,l}(E)}{C_{Nl}(E) - G_{NN} T_{N,N+1}^l C_{N+1,l}(E)},$$

где $T_{N,N+1}^l$ – недиагональный элемент оператора кинетической энергии, $G_{nn'}$ определяется через E_λ и $\langle \lambda | nl \rangle \langle n' l | \lambda \rangle$ – собственные значения и собственные векторы внутренней части гамильтониана соответственно;

$$G_{nn'}(E) = -\sum_{\lambda=0}^{\mathcal{N}} \frac{\langle \lambda | nl \rangle \langle n' l | \lambda \rangle}{E_\lambda - E}, \quad \lambda = 0, 1, \dots, \mathcal{N}, \quad (1)$$

где \mathcal{N} – размерность базиса; \mathcal{S}_{nl} и \mathcal{C}_{nl} – осцилляторные регулярное и нерегулярное решения, аналитический вид которых известен [2].

Более всего метод HORSE подходит для двухчастичных задач, где число базисных векторов $\mathcal{N} = \mathbb{N} + 1$, т.е. практически совпадает с номером модельного пространства. Однако в случае многочастичных рассеяний число \mathcal{N} начинает весьма резко возрастать, по отношению к \mathbb{N} , что затрудняет расчеты. Кроме собственных значений энергии E_λ , при многоканальном рассеянии необходимо проецировать $\langle \lambda | \mathbb{N} l \rangle$ на интересующий канал, что так же усложняет задачу численного расчета с разумной точностью.

Метод SS HORSE

Основная идея метода SS HORSE заключается в том, чтобы вычислять значения фазы рассеяния и S-матрицу только при $E = E_\lambda$. В таком случае выражение для фазы рассеяния значительно упростится

$$\text{tg} \delta_l(E_\lambda) = -\frac{\mathcal{S}_{\mathbb{N}+1,l}(E_\lambda)}{\mathcal{C}_{\mathbb{N}+1,l}(E_\lambda)}$$

и перестанет включать в себя информацию о собственных векторах $\langle \lambda | \mathbb{N} l \rangle$. Так же нет необходимости знать все значения E_λ : достаточно одного или нескольких низколежащих состояний, рассчитанных относительно соответствующего порога реакции.

Вариация параметров метода \mathbb{N} и $\hbar\omega$, позволяет получить значения фазы рассеяния в некотором интервале энергий.

Обратная задача рассеяния

В HORSE возможно решение обратной задачи рассеяния [3], в которой по известной зависимости $\delta(E)$ для заданных значений $\hbar\omega$ и \mathbb{N} восстанавливается матрица потенциала.

Компоненты волновой функции в осцилляторном представлении $a_{n,l}(E)$ должны быть конечными при любом значении энергии, т.е. в том числе и при $E = E_\lambda$.

Это возможно только когда

$$a_{M+1,l}(E) = 0 \rightarrow \cos(\delta(E_\lambda)) \mathcal{S}_{M+1,l}(E_\lambda) + \sin \delta(E_\lambda) \mathcal{C}_{M+1,l}(E_\lambda) = 0, \quad (2)$$

где $M + 1$ – размер матрицы, используемой для решения обратной задачи рассеяния.

Выражение (2) позволяет вычислить собственные значения энергии, в то время как собственные векторы, так же использующиеся в G_{MM} (1), вычисляются следующим образом:

$$\langle \lambda | M l \rangle^2 = \frac{a_{Ml}(E_\lambda)}{T_{M,M+1}^l A^\lambda}, \quad A^\lambda = \left. \frac{da_{M+1,l}(E)}{dE} \right|_{E=E_\lambda}, \quad \lambda = 0, 1, \dots, M. \quad (3)$$

Следует отметить, что на практике рассчитанные таким образом элементы матрицы потенциала в общем случае не точно удовлетворяют условию полноты $\sum_{\lambda=0}^M \langle M l | \lambda \rangle^2 = 1$, однако значение $\langle M l | M \rangle^2$ можно найти не по формуле (2), а искусственно сделать его удовлетворяющим условию полноты, что не должно портить описания фаз для $E \leq E_{M-1}$.

Используемые приближения для трехчастичной задачи

Переход к гиперкоординатам удобен только тогда, когда ни одна пара не выделяется в смысле образования связанных состояний (истинно демократическое рассеяние).

В этом случае удобно отделить центр масс и перейти к A-1 координатам Якоби [4], и после – использовать метод гиперсферических гармоник, в котором координаты преобразовы-

ваются в гиперрадиус $\rho = \sqrt{\sum_{i=1}^{A-1} \xi_i^2}$ и гиперугол. При разложении волновой функции по функциям $(3A - 3)$ -мерного гармонического осциллятора с частотой $\hbar\omega$ ее можно представить в виде произведения угловой и радиальной части, так же, как в двухчастичной задаче.

Полученная система связанных уравнений формально эквивалентна системе, описывающей многоканальное рассеяние в системе с гиперсферическими каналами $\Gamma = \{K, \gamma\}$, где K – гипермомент, а γ – набор остальных квантовых чисел, и каналы рассеяния имеют один и тот же порог.

При этом вклад кинетической энергии T в матрицу гамильтониана диагонален по индексам, различающим каналы рассеяния, при этом матрица потенциальной энергии не является диагональной по ним.

Считая, что в исследуемой задаче распад происходит достаточно быстро, можно использовать приближение, при котором учитывается связь открытого канала с $K = K_{\min}$ с искусственно закрытыми каналами $K > K_{\min}$ во внешней области, однако с учетом $K > K_{\min}$ — во внутренней.

Тогда по аналогии с методом HORSE при достаточно больших n матричные элементы потенциальной энергии становятся малы по сравнению с матричными элементами кинетической, поэтому их можно отбросить начиная с некоего n_{Γ_0} , и решение строится по аналогии с методом HORSE и выражается через регулярное и нерегулярное осцилляторные решения [5].

Результаты расчетов

Ядро ${}^6\text{He}$ является системой трех частиц ($\alpha + n + n$), каждая пара которых не образует связанных состояний. Следовательно, для расчетов, необходимых для оценки энергии и ширины первого возбужденного состояния, мы можем использовать описанные выше приближения. Мы будем рассматривать только канал с минимальным значением $K_{\min} = 0$, так как каналы с большим значением гипермомента подавляются центробежным барьером.

Исходными данными являются значения нижайших состояний собственной энергии рассчитанных при различных N и $\hbar\omega$ для ${}^6\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ для реалистического NN взаимодействия Daejeon16. Энергия относительного движения нейтронов и ядра ${}^4\text{He}$ может быть вычислена следующим образом:

$$E_\lambda = E_\lambda^{({}^6\text{He})} - E_\lambda^{({}^4\text{He})}.$$

Полученные данные являются входными для использования метода SS HORSE. Он использовался совместно с описанными приближениями, при этом $K_{\min} = 0$. Полученные фазы рассеяния представлены на рис. 1. Однако не во всех достигнута достаточная сходимость, поэтому результаты были подвергнуты предварительной обработке. В ней исключены значения с низкими $\hbar\omega$, образующие петли, а также результаты для маленьких N .

Метод SS HORSE позволяет получить значения фаз лишь при отдельных значениях энергии, а для HORSE необходимо знать такие связанные с потенциалом параметры как собственные векторы исследуемой системы, которые возможно найти при помощи обратной задачи рассеяния.

Однако для ее применения в свою очередь так же необходимо иметь полную зависи-

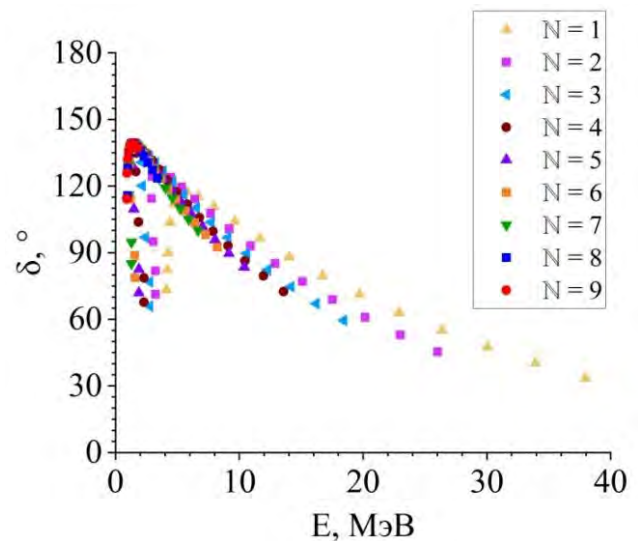


Рис. 1. Фазы, рассчитанные методом SS HORSE

мость $\delta(E)$, что было достигнуто аппроксимацией данных.

Решение обратной задачи включает в себя следующие шаги: определение собственных значений энергии E_λ , определение коэффициентов A^λ и вычисление квадратов последних компонент собственных векторов $\langle \lambda | M | \lambda \rangle^2$.

Входными параметрами являлись $M = 5$, (матрица 6×6) и $\hbar\omega = 2$ МэВ. Результаты решения обратной задачи представлены в таблице.

Результаты решения обратной задачи квантового рассеяния

λ	0	1	2	3	4	5
E_λ , МэВ	0.6812	1.3618	3.6084	7.1976	12.4125	21.1241
A^λ , МэВ ⁻¹	-6.1396	1.3632	-0.7056	0.5004	-0.3651	0.2251
$\langle M \lambda \rangle^2$	4.92E-03	3.19E-02	9.98E-02	0.1914	0.3185	0.3533

Полученные результаты были использованы для прямого расчета, результат которого представлен на рис. 2 совместно с отобранными для этого фазами.

После этого для определения энергии и ширины резонанса были вычислены значения первых производных фазы рассеяния по энергии. Эта зависимость имеет пик, который с большой достоверностью (0,99) аппроксимируется лоренцианом (рис. 3):

$$y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \cdot \frac{w}{4(E - x_c)^2 + w^2}$$

где ширина на полувысоте $w = 0.2414 \pm 0.0004$, центр пика $x_c = 0.7316 \pm 0.0001$, и остальные параметры $A = 3.000 \pm 0.005$, $y_0 = 0.2 \pm 0.005$. Согласно соответствующим параметрам аппроксимации, энергия первого возбужденного состояния составила $E^* = 0.731 \pm 0.0001$ МэВ, а его ширина $\Gamma = 0.241 \pm 0.0004$ МэВ.

Соответствующие экспериментальные значения из сборника [6]: $E_{\text{экс.}}^* = 1.797 \pm 0.025$ МэВ и $\Gamma_{\text{экс.}} = 0.113 \pm 0.02$ МэВ.

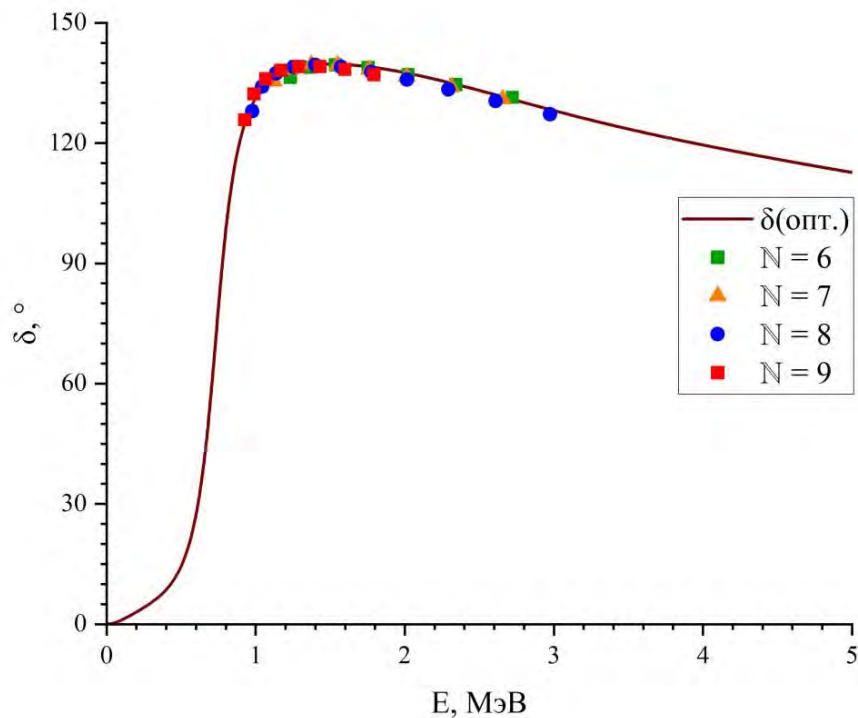


Рис. 2. Фаза рассеяния в обратной задаче

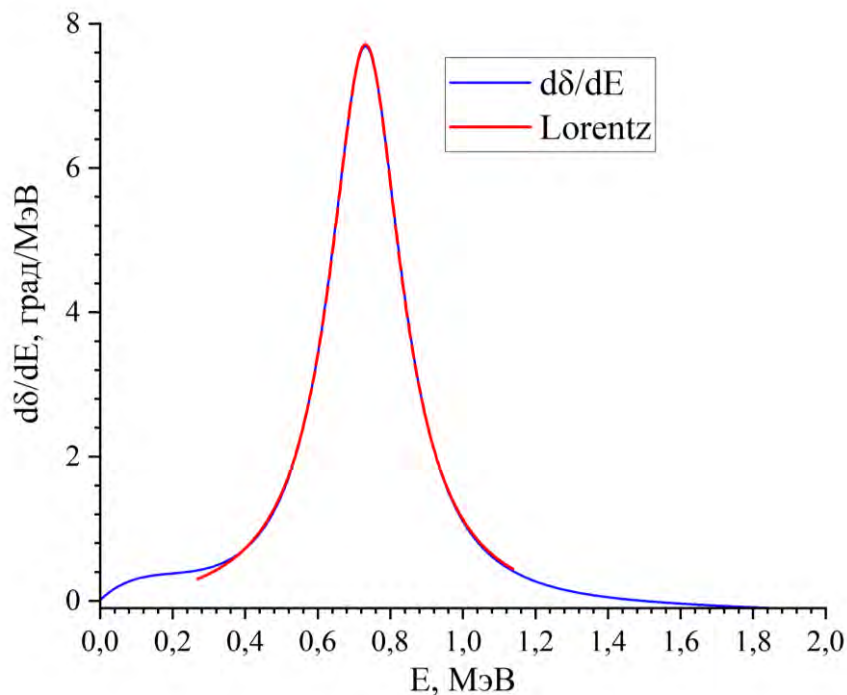


Рис. 3. Зависимость $d\delta/dE$ от E

Заключение

По данным расчетов *ab initio* с реалистическим нуклон-нуклонным взаимодействием для первого возбужденного состояния ядра ${}^6\text{He}$ и основного состояния ${}^4\text{He}$ были определены значения энергии первого возбужденного состояния для и ширина резонанса, при этом последняя в пределах погрешностей совпала с известными данными.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках проекта № 0818-2020-0005 с использованием ресурсов Центра коллективного пользования «Центр данных ДВО РАН».

ЛИТЕРАТУРА

1. N3LO NN interaction adjusted to light nuclei in *ab initio* approach / A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, M. Sosonkina, P. Maris and J. P. Vary // *Phys. Let. B.* 2016. V. 761. P. 87-91.
2. Мазур И. А. Исследование резонансных ядерных процессов в микроскопических подходах с использованием осцилляторного базиса : диссертация. 2017.
3. Nucleon-nucleon interaction in the J-matrix inverse scattering approach and few-nucleon systems / A. M. Shirokov, A. I. Mazur, S. A. Zaitsev, J. P. Vary, and T. A. Weber // *Phys. Rev. C.* 2009. V. 70. P. 044005.
4. Зайцев С. А. Трехдиагональная параметризация взаимодействия в дискретном подходе к проблеме рассеяния // *ТМФ.* 1998. Т. 115. № 2. С. 263-274.
5. Истинно многочастичное рассеяния в осцилляторном представлении / С. А. Зайцев, Ю. Ф. Смирнов, А. М. Широков // *ТМФ.* 1998. Т. 117. № 2. С. 227-248.
6. Tilley D. R. Energy levels of light nuclei $A=5$, $A=6$, $A=7$ / D. R. Tilley et al. // *Nucl. Phys. A.* 2002. V. 708. P. 163-362.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МАГНИТНЫХ ВОЛН С ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЕЙ В ОРТОФЕРРИТЕ ИТТРИЯ

В. И. Жукова, Е. А. Жуков, С. Р. Панасюк

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: 000158@pnu.edu.ru

Рассмотрено взаимодействие доменной границы с магнитными волнами в ортоферрите иттрия с учетом диссипации. Получено явное решение для амплитуды магнитной волны

В работе [1] было отмечено, что движение доменных границ в ортоферритах сопровождаются ее торможением на определенных скоростях, в том числе сверхзвуковых. В работе [2] был предложен механизм торможения, основанный на взаимодействии нормальных волн с доменными границами. В настоящей работе рассмотрено взаимодействие доменной границы с магнитными волнами в ортоферрите иттрия. Получено решение для амплитуды магнитной волны. Рассмотрим движение доменных границ вдоль оси x , совпадающей с кристаллографической осью a . Углы векторов намагниченности подрешеток $\theta_{1,2}$, $\varphi_{1,2}$ представим в виде

$$\theta_1 = \pi/2 - \nu + \varepsilon, \theta_2 = \pi/2 + \nu + \varepsilon, \varphi_1 = \varphi + \beta, \varphi_2 = \pi + \varphi - \beta$$

При небольших амплитудах колебаний, φ , ν , β , ε соответствуют проекциям векторов антиферромагнетизма \mathbf{l} , и намагниченности \mathbf{m} : $\mathbf{l} = (1, \varphi, \nu)$; $\mathbf{m} = (0, \beta, -\varepsilon)$.

Динамические уравнения для магнитной переменной ν имеют вид:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \nu + \frac{b_3}{2A} \sin(2\nu) &= \frac{mH}{A} \sin \nu - \frac{\delta_l}{A} \frac{\partial u_l}{\partial x} \sin 2\nu + \frac{\delta_t}{A} \frac{\partial u_t}{\partial x} \cos 2\nu + \frac{\alpha M}{gA} \frac{\partial \nu}{\partial t}, \\ \left(\frac{1}{s_l^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\eta_l}{\rho s_l^2} \frac{\partial^3}{\partial t \partial x^2} \right) u_l &= - \frac{\delta_l}{\rho s_l^2} \frac{\partial \nu}{\partial x} \sin 2\nu; \\ \left(\frac{1}{s_t^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\eta_t}{\rho s_t^2} \frac{\partial^3}{\partial t \partial x^2} \right) u_t &= - \frac{\delta_t}{\rho s_t^2} \frac{\partial \nu}{\partial x} \cos 2\nu; \end{aligned} \quad (1)$$

где c – максимальная скорость магнитных волн; A – константа обменной энергии; b_3 – константа анизотропии; ρ – плотность; α – коэффициент поглощения магнитных волн; M – намагниченность; H – амплитуда магнитного поля; g – гиромагнитное отношение; u_l – смещение продольной волны; u_t – смещение поперечной волны; δ_l – упругая константа для продольных волн; δ_t – упругая константа для поперечных волн; η_l – коэффициент затухания продольных волн; η_t – коэффициент затухания поперечных волн; s_l – скорость продольных акустических волн; s_t – скорость поперечных акустических волн.

Поскольку магнитоакустическое взаимодействие является слабым, рассмотрим динамические уравнения для магнитной переменной ν в пренебрежении влиянием акустической подсистемы на магнитную:

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

$$-\frac{\delta_l \partial u_l}{A \partial x} \sin 2v + \frac{\delta_t \partial u_t}{A \partial x} \cos 2v = 0; \quad (3)$$

Решаем (2) с помощью теории возмущений [5, 6], полагая $v = v_0 + v_1$, где $v_1 \ll v_0$, v_0 – параметр доменной границы в отсутствии взаимодействия, полученный в [1], v_1 – параметр магнитной волны.

В нулевом приближении полагаем

$$\frac{mH}{A} \sin v + \frac{\alpha M}{gA} \frac{\partial v}{\partial t} = 0;$$

Параметр доменной границы удовлетворяет следующему условию:

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) v_0 + \frac{b_3}{2A} \sin(2v_0) = 0; \quad (4)$$

при условии

$$\frac{mH}{A} \sin v_0 + \frac{\alpha M}{gA} \frac{\partial v_0}{\partial t} = 0. \quad (5)$$

Решение (4) имеет вид [1]:

$$v_0 = -\frac{2}{D_3} \operatorname{arctg} \left(\exp \left(\frac{x - vt}{D_3} \right) \right), \quad (6)$$

где D_3 – ширина доменной границы; v – скорость движения доменной границы, которая в нулевом приближении может двигаться с любой скоростью, не превышающей предельной c . Учет диссипации приводит к зависимости скорости от магнитного поля [1].

При этом выполняются условия:

$$\begin{aligned} \cos(v_0) &= \operatorname{th} \left(\frac{x - vt}{D_3} \right); \\ \sin(v_0) &= \frac{1}{\operatorname{ch} \left(\frac{x - vt}{D_3} \right)}; \\ \frac{\partial v_0}{\partial x} &= \frac{1}{D_3 \operatorname{ch} \left(\frac{x - vt}{D_3} \right)}; \\ \cos(2v_0) &= 1 - \frac{2}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{x - vt}{D_3} \right)}; \\ D_3 &= \sqrt{\frac{A}{b_3} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)}. \end{aligned} \quad (7)$$

В первом приближении система (2), (3) приобретает вид:

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{b_3}{A} \cos(2v_0) \right) v_1 = \frac{mH}{A} v_1 \cos(v_0) + \frac{\alpha M}{gA} \frac{\partial v_1}{\partial t}; \quad (8)$$

$$-\frac{\delta_l \partial u_l}{A \partial x} [\sin 2v_0 + 2v_1 \cos(2v_0)] + \frac{\delta_t \partial u_t}{A \partial x} [\cos(2v_0) - 2v_1 \sin(2v_0)] = 0. \quad (9)$$

Решаем уравнение (8) при условии (9) применяя еще раз теорию возмущений, полагая $v_1 = v_1^{(0)} + v_1^{(1)}$, где $v_1^{(0)}$ – параметр магнитной волны в нулевом приближении (отсутствии взаимодействия), $v_1^{(1)}$ – изменение параметра в первом приближении.

Нулевое приближение $v_1^{(0)}$ удовлетворяет уравнению, которое следует из (8) при нулевой правой части:

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{b_3}{A} \cos(2v_0) \right) v_1^{(0)} = 0;$$

Решение этого уравнения имеет вид:

$$v_1^0 = \left[\text{th} \left(\frac{x - vt}{D_3} \right) - i D_3 \left(\frac{\omega_s v - k_s c^2}{c^2 - v^2} \right) \right] e^{i\omega_s t - ik_s x}, \quad (10)$$

где ω_s, k_s – частота и волновое число магнитной волны,

$$\omega_s = \sqrt{\omega_3^2 + c^2 k_s^2}, \quad \omega_3^2 = \frac{b_3 c^2}{A} \quad (11)$$

Первое приближение $v_1^{(1)}$ будем искать в виде:

$$v_1^{(1)} = A_1(x - vt) e^{i\omega_s t - ik_s x} + A_1^*(x - vt) e^{-i\omega_s t + ik_s x}, \quad (12)$$

Для определения $A_1(x - vt)$, $A_1^*(x - vt)$ подставим (12) в уравнение (8), применяя приближение медленно меняющихся амплитуд, учитывая неравенства:

$$\frac{\partial^2 A_1}{\partial t^2} \ll \omega_s \frac{\partial A_1}{\partial t}; \quad \frac{\partial^2 A_1}{\partial x^2} \ll k_s \frac{\partial A_1}{\partial t}.$$

В результате, пренебрегая вторыми производными, получим укороченные уравнения, делая замену $\xi = x - vt$:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial A_1(\xi)}{\partial \xi} e^{i(\omega_s - k_s v)t} e^{-ik_s \xi} \left(-\frac{2i\omega_s}{c^2} v + 2ik_s + \frac{\alpha M}{gA} v \right) + \\ & + A_1(\xi) e^{i(\omega_s - k_s v)t} e^{-ik_s \xi} \left[-\frac{\omega_s^2}{c^2} + k_s^2 + \frac{b_3}{A} \left(1 - \frac{2}{\text{ch}^2 \left(\frac{\xi}{D_3} \right)} \right) - \frac{mH}{A} \text{th} \left(\frac{\xi}{D_3} \right) - i \frac{\alpha M}{gA} \omega_s \right] + \\ & + \frac{\partial A_1^*(\xi)}{\partial \xi} e^{-i(\omega_s - k_s v)t} e^{ik_s \xi} \left(\frac{2i\omega_s}{c^2} v - 2ik_s + \frac{\alpha M}{gA} v \right) + \\ & + A_1^*(\xi) e^{-i(\omega_s - k_s v)t} e^{ik_s \xi} \left[-\frac{\omega_s^2}{c^2} + k_s^2 + \frac{b_3}{A} \left(1 - \frac{2}{\text{ch}^2 \left(\frac{\xi}{D_3} \right)} \right) - \frac{mH}{A} \text{th} \left(\frac{\xi}{D_3} \right) + i \frac{\alpha M}{gA} \omega_s \right] = 0. \end{aligned}$$

Используя (11), получим:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial A_1(\xi)}{\partial \xi} e^{i(\omega_s - k_s v)t} e^{-ik_s \xi} \left(-\frac{2i\omega_s}{c^2} v + 2ik_s + \frac{\alpha M}{gA} v \right) + \\ & + \frac{\partial A_1^*(\xi)}{\partial \xi} e^{-i(\omega_s - k_s v)t} e^{ik_s \xi} \left(\frac{2i\omega_s}{c^2} v - 2ik_s + \frac{\alpha M}{gA} v \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -A_1(\xi)e^{i(\omega_s-k_s v)t}e^{-ik_s\xi} \left[-\frac{b_3}{A} \frac{2}{\text{ch}^2\left(\frac{\xi}{D_3}\right)} - \frac{mH}{A} \text{th}\left(\frac{\xi}{D_3}\right) - i\frac{\alpha M}{gA} \omega_s \right] - \\
& -A_1^*(\xi)e^{-i(\omega_s-k_s v)t}e^{ik_s\xi} \left[-\frac{b_3}{A} \frac{2}{\text{ch}^2\left(\frac{\xi}{D_3}\right)} - \frac{mH}{A} \text{th}\left(\frac{\xi}{D_3}\right) + i\frac{\alpha M}{gA} \omega_s \right].
\end{aligned}$$

Это уравнение равносильно системе двух уравнений

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial A_1(\xi)}{\partial \xi} \left(-\frac{2i\omega_s}{c^2} v + 2ik_s + \frac{\alpha M}{gA} v \right) = \\
& = -A_1(\xi) \left[-\frac{b_3}{A} \frac{2}{\text{ch}^2\left(\frac{\xi}{D_3}\right)} - \frac{mH}{A} \text{th}\left(\frac{\xi}{D_3}\right) - i\frac{\alpha M}{gA} \omega_s \right]; \\
& \frac{\partial A_1^*(\xi)}{\partial \xi} \left(\frac{2i\omega_s}{c^2} v - 2ik_s + \frac{\alpha M}{gA} v \right) = \\
& = -A_1^*(\xi) \left[-\frac{b_3}{A} \frac{2}{\text{ch}^2\left(\frac{\xi}{D_3}\right)} - \frac{mH}{A} \text{th}\left(\frac{\xi}{D_3}\right) + i\frac{\alpha M}{gA} \omega_s \right].
\end{aligned}$$

В результате получаем решение:

$$\begin{aligned}
A_1(x-vt) &= \exp\left(\frac{-\frac{2b_3 D_3}{A} \text{th}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right) - \frac{mH D_3}{A} \ln\left(\text{ch}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right)\right) - i\frac{\alpha M \omega_s}{gA} (x-vt)}{-i\frac{2\omega_s v}{c^2} + 2ik_s + \frac{\alpha M v}{gA}} \right), \\
A_1^*(x-vt) &= \exp\left(\frac{-\frac{2b_3 D_3}{A} \text{th}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right) - \frac{mH D_3}{A} \ln\left(\text{ch}\left(\frac{x-vt}{D_3}\right)\right) + i\frac{\alpha M \omega_s}{gA} (x-vt)}{i\frac{2\omega_s v}{c^2} - 2ik_s + \frac{\alpha M v}{gA}} \right),
\end{aligned}$$

Таким образом, рассмотрено взаимодействие доменной границы с магнитными волнами в ортоферрите иттрия с учетом диссипации и получено решение для амплитуды магнитной волны в первом приближении теории возмущения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Барьяхтар В. Г., Иванов Б. А., Четкин М. В. Динамика доменных границ в слабых ферромагнетиках // УФН. 1985. Т. 146. Вып. 3. С. 417-458.
2. Нелинейные магнитоакустические взаимодействия в слабых ферромагнетиках / Е. А. Жуков, В. И. Жукова, А. П. Кузьменко, Ю. И. Щербаков // Известия РАН, Сер. физ. 2010. Т. 74. № 10. С. 1426-1428.
3. Звездин А. К., Мухин А. А., Попков А. Ф. Магнитоупругие аномалии в динамике доменных границ в слабых ферромагнетиках. М.: ФИАН СССР. 1982. Препринт № 108. 65 с.
4. Барьяхтар В. Г., Иванов Б. А., Сукстанский А. Л. Фононное торможение доменной границы в редкоземельном ортоферрите // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. Вып. 12. С. 2183-2195.
5. Жуков Е. А., Жукова В. И. Расчеты взаимодействия магнитных и продольных акустических волн с участием доменной границы в ортоферритах иттрия // Вестник ТОГУ. 2021. № 4(63). С. 55-64.
6. Метод генерации, усиления и измерения параметров гиперзвуковых волн в магнитных кристаллах / Е. А. Жуков, В. И. Жукова, А. В. Каминский, В. В. Корчевский, В. И. Римлянд // Вестник ТОГУ. 2012. №3. С. 17-27.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ АТОМНОЙ СИСТЕМЫ

В. В. Насыров

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: 000612@pnu.edu.ru

В работе описан способ расчета энергий дискретного спектра легких атомов с помощью построения функции Йоста для эквивалентной задачи рассеяния.

Рассмотрим связанные состояния двухэлектронной системы в поле ядра с зарядом Z , в которых один из атомных электронов находится в состоянии $1s$. Запишем уравнение Шрёдингера такой системы (здесь и далее используются атомные единицы)

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_{r_1} - \frac{1}{2}\Delta_{r_2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1)$$

и представим гамильтониан уравнения (1) как сумму двух гамильтонианов:

$$H = \left(-\frac{1}{2}\Delta_{r_1} - \frac{Z}{r_1} \right) + \left(-\frac{1}{2}\Delta_{r_2} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \right). \quad (2)$$

Первая скобка в (2) соответствует гамильтониану водородоподобного иона с зарядом Z

$$H^{ion}(\vec{r}_1) = -\frac{1}{2}\Delta_{r_1} - \frac{Z}{r_1}, \quad (3)$$

с собственными значениями энергии в $1s$ состоянии

$$E_1^{ion} = -\frac{Z^2}{2} \quad (4)$$

и волновой функцией ψ_{1s}

$$\psi_{1s}(Z, \vec{r}_1) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} \exp(-Zr_1). \quad (5)$$

Вторая скобка в (2) описывает взаимодействие электрона с ионом:

$$H^{sc}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{1}{2}\Delta_{r_2} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}. \quad (6)$$

Предположим, что гамильтониан (6) описывает процесс упругого рассеяния электрона с импульсом $k = \sqrt{2mE}$ на одноэлектронном ионе, который находится в основном состоянии. Определим модельный потенциал взаимодействия налетающего электрона с ионом в виде:

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + \int \frac{|\psi_{1s}(Z_{\text{eff}}, r')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' = -\frac{Z-1}{r} - \left(Z_{\text{eff}} + \frac{1}{r} \right) \exp(-2Z_{\text{eff}}r). \quad (7)$$

Применяя метод парциальных волн, запишем радиальное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (6)

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2k\eta}{r} \right] u_l = U(r)u_l, \quad (8)$$

где l – орбитальный угловой момент, $\eta = -m(Z-1)/k$ – параметр Зоммерфельда, $U(r)$ – эффективный потенциал вида

$$U(r) = -2m \left(Z_{\text{eff}} + \frac{1}{r} \right) \exp(-2Z_{\text{eff}}r). \quad (9)$$

Слагаемые в полученном представлении, аналогично (1), соответствуют кулоновской части с $\alpha = Z-1$, отвечающей за взаимодействие налетающего электрона с частично экранированным ядром, и короткодействующей части, в которой эффективный заряд Z_{eff} также учитывает частичную экранировку ядра одним из атомных электронов.

Можно показать, что радиальная волновая функция $u_l(k, r)$ выражается как линейная комбинация

$$u_l(r, k) = f_l(k, r) \chi_{kl}^{(-)}(r) - f_l(-k, r) \chi_{kl}^{(+)}(r), \quad (10)$$

где функции $\chi_{kl}^{(\pm)}$, в свою очередь, линейные комбинации регулярной $F_l(kr, \eta)$ и нерегулярной $G_l(kr, \eta)$ кулоновских функций

$$\chi_l^{\pm}(r) = G_l(kr, \eta) \pm iF_l(kr, \eta). \quad (11)$$

Тогда амплитудные функции $f_l(\pm k, r)$ будут удовлетворять дифференциальному уравнению

$$H_{kl}^{(+)}(r) \frac{d^2 f_l(k, r)}{dr^2} - \frac{dH_{kl}^{(+)}(r)}{dr} \frac{df_l(k, r)}{dr} - H_{kl}^{(+)}(r) U(r) f_l(k, r) = 0, \quad (12)$$

где

$$H_{kl}^{(+)}(r) = \chi_{kl}^{(+2)}(r) U(r). \quad (13)$$

Более подробно вывод уравнения (12) рассмотрен в [1]. Асимптотические значения амплитудных функций $f_l(\pm k, r)$ позволяют определить функции Йоста $F_l(\pm k)$:

$$F_l(\pm k) = \frac{e^{\mp i\sigma_l}}{C_l(\eta)} \lim_{r \rightarrow \infty} f_l(\pm k, r).$$

где

$$C_l(\eta) = \frac{\sqrt{\Gamma(l+1+i\eta)\Gamma(l+1-i\eta)}}{\Gamma(l+1)} \exp\left(-\frac{\pi\eta}{2}\right).$$

Отметим, что уравнение (13) с граничными условиями

$$f_l(k, 0) = \frac{1}{2}. \quad (14)$$

$$\left. \frac{df_l(k, r)}{dr} \right|_{r=0} = 0. \quad (15)$$

эквивалентно уравнению Шрёдингера (8) для процесса рассеяния.

Известно, что если функция Йоста $F_l(k_0)$ обращается в ноль при чисто мнимых значениях импульса

$$k = k_0 = +i\sqrt{2mE_0}, \quad (16)$$

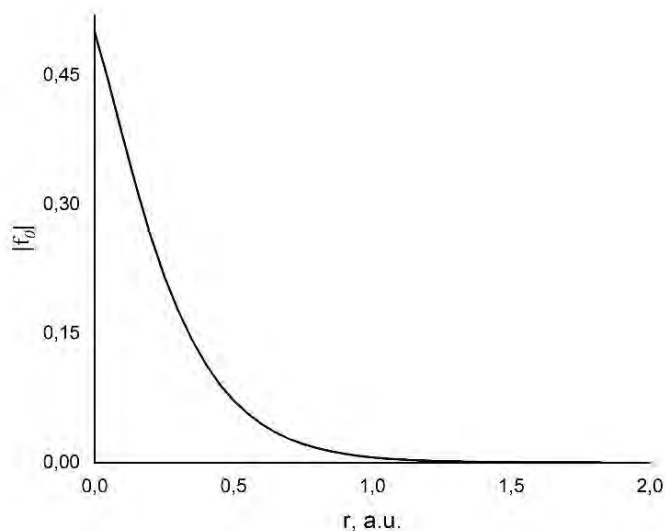
то такие значения k_0 соответствуют связанным состояниям рассматриваемой квантовой системы с энергией E_0 . Таким образом, разделяя гамильтониан на два слагаемых и можно определить искомые энергии двухэлектронной атомной системы как сумму

$$E = -\frac{Z^2}{2} - \frac{|k_0|^2}{2}. \quad (17)$$

Исходя из приведенных рассуждений, мы предлагаем следующий алгоритм расчета энергии основного состояния: находим значения k_0 , при которых решения уравнения (12) с граничными условиями (14) и (15) асимптотически стремятся к нулю на бесконечности; вычисляем энергию основного состояния иона и применяем формулу (17).

Применим алгоритм для расчета основного состояния атома гелия ($Z=2$). Для предотвращения расходимости численного алгоритма мы применяем начальные условия (14) и (15) в точке $r_0 = 10^{-10}$ а.е. При расчете эффективного потенциала принимаем, что $Z_{\text{eff}} = 1.6875$.

На рисунке показано поведение модуля амплитудной функции для импульса $k_0 = 1.344449i$ а.е. в диапазоне $r = 0 \div 2$ а.е.



Сходимость амплитудной функции $|f_0(k, r)|$

Из графика следует, что предлагаемый метод приводит к достаточно быстрой сходимости амплитудной функции к йостовской. Изменением амплитудной функции можно пренебречь уже при $r = 1$ а.е. Значения импульса и соответствующее им значение энергий связанных состояний атома гелия, результаты альтернативных расчетов [2], экспериментальные значения энергий [3] и отличие расчетов от экспериментальных значений ε приведены в таблице. Стоит отметить, что применение уравнения (12) позволяет получить очень хорошее соответствие в значении энергии основного состояния, что существенно лучше, чем весьма точные результаты из работы [2].

Энергии связанных состояний атома гелия

Состояние	Наш расчет			Alcala [1]		Эксп. [2]
	k_0 , а.е.	E , а.е.	ε , %	E , а.е.	ε , %	E , а.е.
(1s,1s), 1 1S_0	1.344449i	-2.90377	0.0018	-2.90260	0.039	-2.90372

ЛИТЕРАТУРА

1. Насыров В. В. Использование функции Йоста для расчета дискретного спектра атома гелия // Известия высших учебных заведений. Физика. 2022. Т. 65. № 1(770). С. 31-37.
2. Modeling a helium atom from a collision of an electron with an ionized helium atom / L. Alcalá Varrilla [et al.] // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1386. 012119.
3. K r a m i d a [et al.] // NIST Atomic Spectra Database (2021). URL: <https://physics.nist.gov/asd>.

РАСЧЕТЫ ХАРАКТЕРИСТИК ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ И ИОНОВ**В. И. Севериненко, С. М. Бурков**ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: figure0011@gmail.com

Методом R матрицы рассчитаны полные и парциальные сечения фотоионизации атомов Ar и Ne и их однозарядных ионов Ar⁺ и Ne⁺. Полученные данные применяются к расчету процессов последовательной двойной двухфотонной ионизации.

Исследование спектров фотоэлектронов является мощным инструментом для изучения фундаментальных процессов фотоионизации многоэлектронных атомных систем [1-3]. Данные процессы играют важную роль при исследовании свойств астрофизической и лабораторной плазмы и в других приложениях.

Автоионизационные процессы при фотоионизации, т.е. фотовозбуждение резонансных состояний, лежащих на фоне непрерывного спектра, с последующим их распадом, значительно изменяют сечение фотоионизации.

Детальный анализ поведения сечений был предложен Фано [4] и развит в ряде других работ, например [5-6].

Несмотря на то, что исследование автоионизационных состояний нейтральных атомов ведется уже давно и является достаточно изученной областью, аналогичные исследования многозарядных положительных ионов стали актуальными относительно недавно.

Это, прежде всего, связано с развитием экспериментальной техники, появлением новых лазеров, работающих в широкой области спектра и большой интенсивностью излучения.

Большое количество экспериментальной информации было получено с использованием лазеров на свободных электронах (FEL), работающих в области жесткого ультрафиолетового излучения (XUV) [7].

Облучение газообразной мишени интенсивным фемтосекундным импульсом FEL позволяет получить высокую плотность однозарядных положительных ионов. Эти ионы последовательно ионизируются вторым фотоном того же самого импульса, естественно если энергия фотона превышает порог ионизации однозарядного иона.

На рис. 1 видно, что механизм последовательной двойной двухфотонной ионизации (2PDI) доминирует среди процессов двойной ионизации в доступной области интенсивностей [8].

Это дает возможность рассматривать независимо первую и вторую стадии ионизации.

До недавнего времени исследование угловых распределений фотоэлектронов в 2PDI в основном предполагало нерезонансный (плоский) континуум положительного иона.

Тем не менее, в ряде процессов в 2PDI существенную роль играет механизм возбуждения автоионизационных состояний (АИС) атомов и ионов на первой и второй стадиях 2PDI.

Теоретические расчеты, опубликованные в [9], были выполнены в приближении изолированного резонанса и в предположении отсутствия связи открытых каналов.

Для уточнения теоретических результатов, были проведены расчеты (рис. 2) методом R-матрицы с помощью модифицированного пакета [10,11].

Модификация пакета состояла во внесении изменений в код программы, позволяющих работать с численными орбиталями, получаемыми в пакетах MCHF [12].

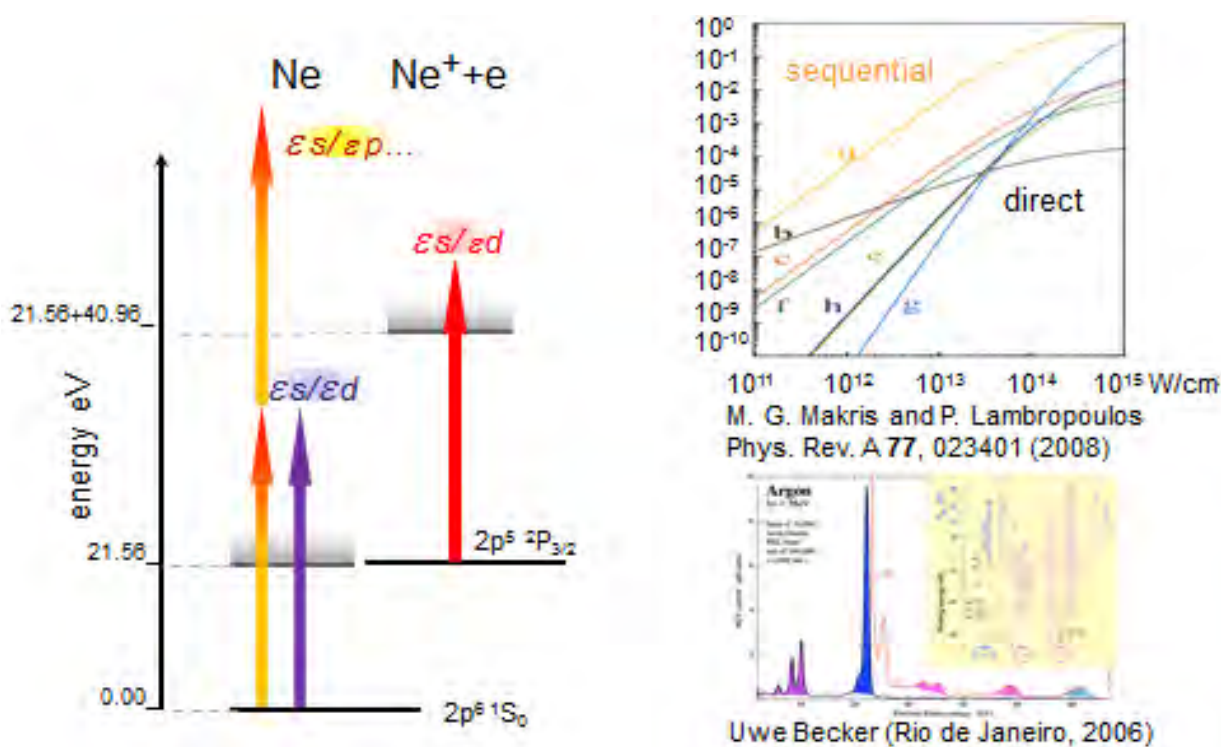


Рис. 1. Энергетическая схема процессов последовательной фотоионизации атома Ne

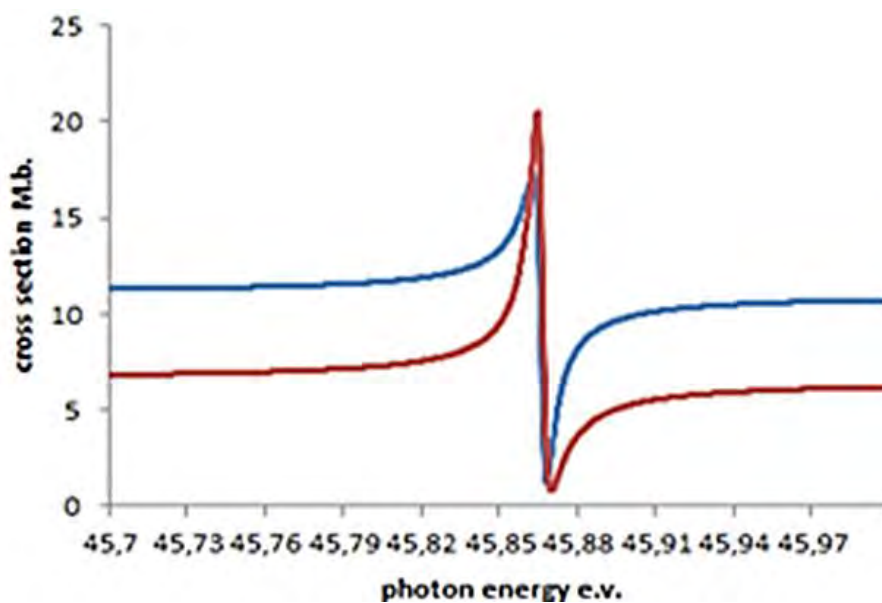


Рис. 2. Профиль 2s2p⁶ 3p(1P) резонанса атома Ne. Метод R-матрицы. Приближение двух состояний, синяя линия - формула длины (L), красная линия - формула скорости(V)

Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными и расчетами других авторов [9] показывает работоспособность модифицированного R-матричного комплекса программ. Далее данное программное обеспечение было использовано для расчета профилей частично-дырочного резонансного (рис. 3) комплекса 2s2p⁵(3P)3p(2D), 2s2p⁵(3P)3p(2P), 2s2p⁵(3P)3p(2S) иона Ne⁺.

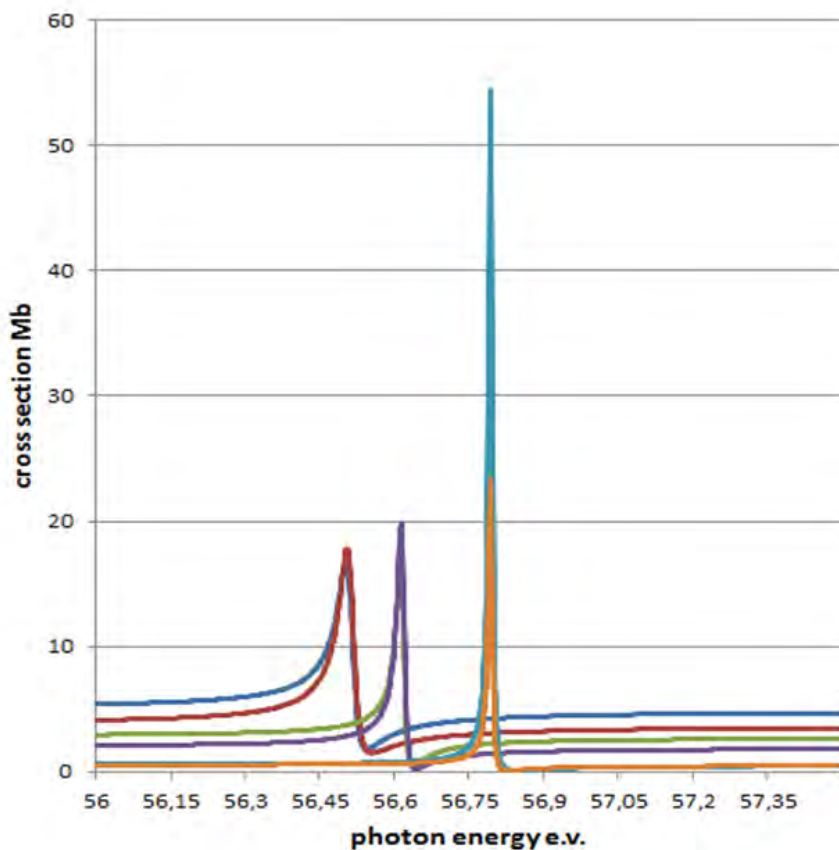


Рис. 3. Полное сечение второй стадии 2PDI в терминах 2D, 2P, 2S в окрестности резонансного комплекса: ---, --- длина и скорость $2s2p5(3P)3p(2D)$, ---, --- длина и скорость $2s2p5(3P)3p(2P)$, ---, --- длина и скорость $2s2p5(3P)3p(2S)$

Расчет выполнялся в приближении пяти состояний остаточного иона Ne^{++} . $2p4(3P)$, $2p4(1D)$, $2p4(1S)$, $2s2p5(3P)$, $2s2p5(1P)$.

Открытые каналы в данной области энергий привязаны к первым трем порогам, закрытые каналы, отвечающие за формирование резонансных профилей, соответствуют остаткам $2s2p5(3P)$, $2s2p5(1P)$. Было показано, что модель, использованная в статье [10], адекватно описывает исследуемый процесс. Улучшение модели за счет учета связи каналов не играет значительной роли.

Важную роль автоионизационных резонансных состояний в процессах 2PDI подтвердили эксперименты, выполненные на установке FLASH и соответствующие расчеты для Ar^+ [13, 14]. В данных работах изучалось влияние АИС на первой и второй стадиях 2PDI в достаточно узком диапазоне энергий 27.63 эВ – 29.4 эВ, т. е. между порогами $3p4(3P)$, $3p4(1D)$. В данном интервале энергий проявляются две ридберговские резонансные серии $3p4(1D)nd(2D)$ и $3p4(1D)ns(2D)$.

Следует отметить, что $n \geq 6$, так как состояния, имеющие квантовый номер $n < 6$, попадают в оптическую часть спектра и не являются автоионизационными. Энергетическая схема 2PDI приведена на рис. 4. На рис. 4 видно, что в данной области энергий, точнее в интервале (27.63 – 27.82) эВ, должны располагаться резонансные серии, обусловленные тонкой структурой уровня $3p4(3P)$. Интервал спин-орбитального расщепления составляет порядка 0.2 эВ.

Возможности современных измерительных приборов не позволяют измерить сечения с необходимым для детализации резонансной картины разрешением. В данной области энергий есть экспериментальные данные по спектру фотопоглощения Ar^+ [15].

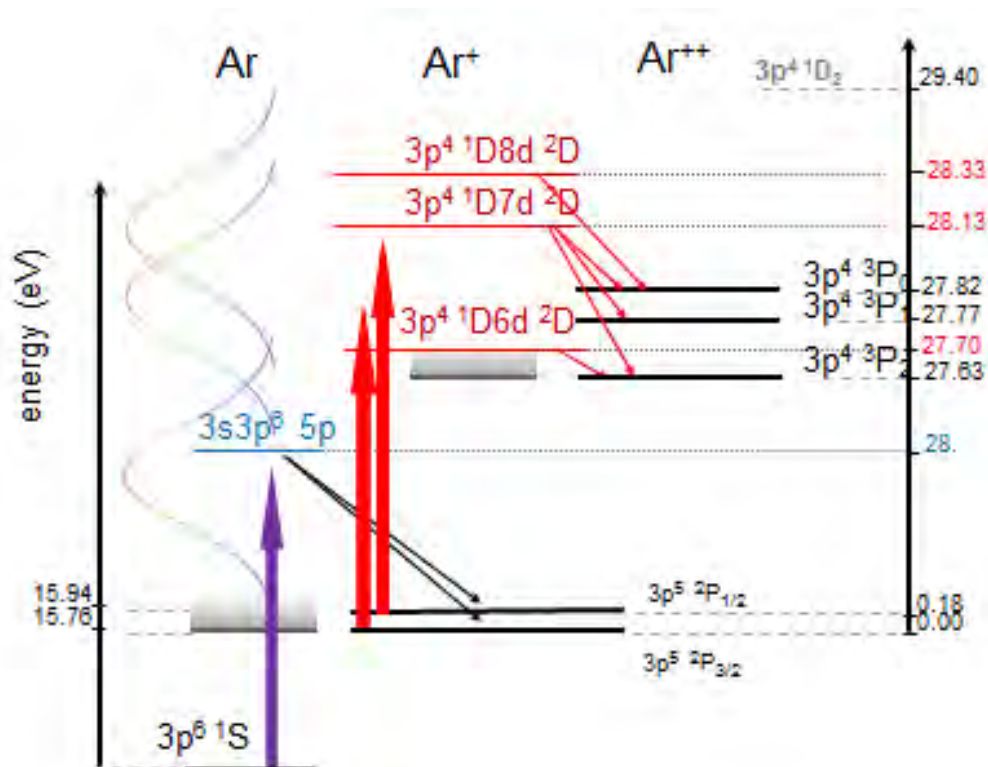


Рис. 4. Энергетическая схема 2PDI атомам аргона

В работе [15] приводится расшифровка резонансных серий, сходящихся к порогам $3p^4(1D)$ и $3p^4(1S)$. Результаты приведены на рис. 5.

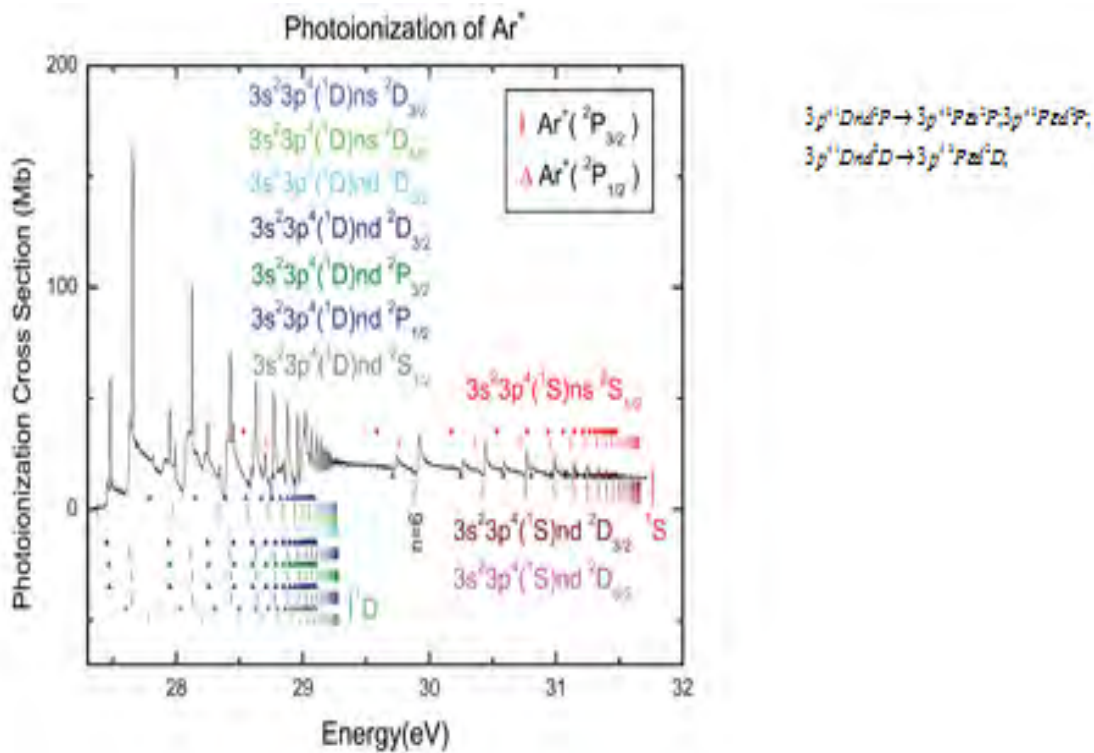


Рис. 5. Расшифровка резонансной структуры спектра фотопоглощения Ar^+

Как видно на рис. 5, учет спин-орбитального расщепления в данном случае необходим, однако, это не означает, что расчеты в LS связи будут некорректными в данной области энергий.

Чтобы доказать это утверждение, выполним численные расчеты первой и второй стадии 2PDI в аргоне методом R-матрицы в LS связи и JK связи с гамильтонианом Брейта – Паули. Результаты расчетов приведены на рис. 9.

Синяя и красная кривая соответствуют длине и скорости в LS связи, зеленая и фиолетовая JK в приближении Брейта – Паули. Как видно из рисунка отличия не значительны.

Таким образом, использование нерелятивистского приближения в случае 2PDI атома аргона вполне обосновано.

На рис. 6 представлена резонансная серия $3s3p6\ np(1P)$ атома аргона.

Кроме того, в рассматриваемой области энергий между первым и вторым резонансами присутствуют аномалии в сечении, называемые ложными резонансами.

На релятивистской кривой их два, на нерелятивистской – один.

Причинами возникновения ложных резонансов являются: использование коррекции Баттла, для ускорения сходимости R-матричных рядов и некорректное использование псевдосостояний.

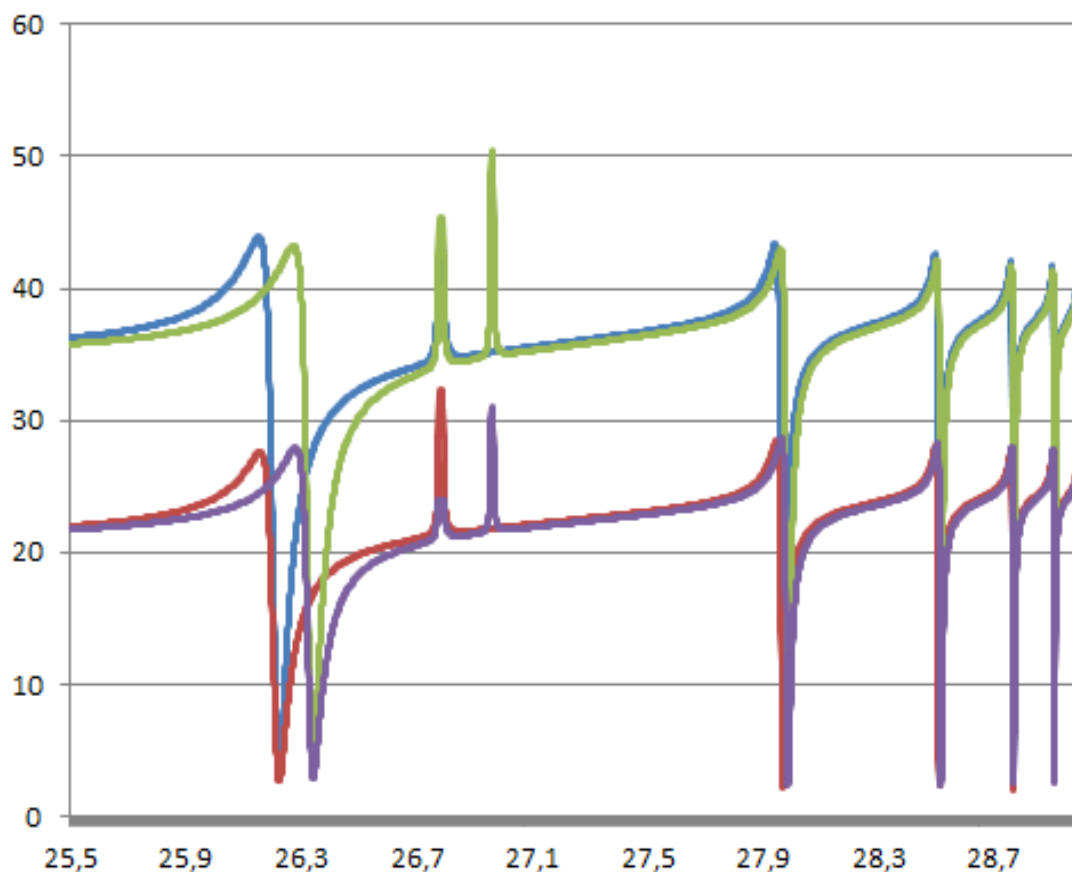


Рис. 6. Сравнение релятивистского и нерелятивистского приближения на первой стадии 2PDI атома аргона

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках проекта № 0818-2020-0005 с использованием ресурсов Центра коллективного пользования «Центр данных ДВО РАН».

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Schmidt V. *Electron Spectrometry of Atoms Using Synchrotron Radiation* // Cambridge University Press. 1997.
2. Hufner S. *Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications* // Springer. 2003.
3. Woicik J. C. *Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy (HAXPES)* // Springer. 2016.
4. Fano. U. Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts // *Phys. Rev.* 1961. V. 124. P. 1866.
5. Temkin A. *Autoionization: Recent Developments and Applications* // Plenum Press. 1985.
6. Balashov V. V., Grum-Grzhimailo A. N., Romanovsky E. A. *Autoionization: Recent Developments and Applications* // Moscow University Press. 1995. C. 93.
7. A soft X-ray free-electron laser beamline at SACLA: the light source, photon beamline and experimental station / S. K. Owada, K. Togawa, T. Inagaki, T. Hara, T. Tanaka, Y. Joti, T. Koyama // *J. Synchrotron Radiat.* 2018. V. 25(Pt 1). P. 282-288.
8. Laulan S., Bachau H. Correlation effects in two-photon single and double ionization of helium // *Phys. Rev. A.* 2003. V. 68. P. 013409.
9. Carpeggiani P. Complete reconstruction of bound and unbound electronic wavefunctions in two-photon double ionization // *Nat. Phys.* 2019. V. 15. P. 170-177.
10. Burke P. G., Taylor K. T. R-matrix theory of photoionization. Application to neon and // *J. Phys. B: Atomic and Molecular Physics.* 1975. V. 8. P. 2620.
11. Berrington K. A., Eissner W. B., Norrington P. H. RMATRX1: Belfast atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* 1995. V. 92. P. 290-420.
12. Froese Fischer C., Brage T., Johansson P. *Computational Atomic Structure (An MCHF Approach)* // Bristol: IOP Publishing. 1997.
13. Signatures of autoionization in the angular electron distribution in two-photon double ionization of Ar / S. Augustin, M. Schulz, G. Schmid, K. Schnorr, E. V. Gryzlova, H. Lindenblatt, S. Meister, Y. F. Liu, F. Trost, L. Fechner, A. N. Grum-Grzhimailo, S. M. Burkov, M. Braune, R. Treusch, M. Gisselbrecht, C. D. Schröter, T. Pfeifer, R. Moshhammer // *Phys. Rev. A.* 2018. V. 98. P. 033408.
14. Two-photon sequential double ionization of argon in the region of Rydberg autoionizing states of Ar⁺ / E. V. Gryzlova, A. N. Grum-Grzhimailo, M. D. Kiselev, S. M. Burkov // *Eur. Phys. J. D.* 2019. V. 73. P. 93.
15. Valence-shell photoionization of chlorinelike Ar⁺ ions / A. M. Covington, A. Aguilar, I.R. Covington, G. Hinojosa, C. A. Shirley, R. A. Phaneuf, I. Alvarez, C. Cisneros, I. Dominguez-Lopez, M. M. SantAnna, A.S Schlachter // *Phys. Rev. A.* 2011. V. 84. P. 013413.

**ЗАВИСИМОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ
НА ОСНОВЕ НИТРАТА РУБИДИЯ ОТ ХАРАКТЕРИСТИК МАТРИЦ ВНЕДРЕНИЯ**

С. В. Барышников

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
Благовещенск, e-mail: svbar2003@list.ru

Представлены результаты исследования диэлектрической проницаемости и коэффициента третьей гармоники, для нанопористых матриц Al_2O_3 , с различными размерами пор, заполненных нитратом рубидия. Обнаружено смещение фазовых переходов и увеличение температурного гистерезиса для $RbNO_3$ в порах окисных пленок Al_2O_3 . Природа увеличения температурного гистерезиса фазового перехода обсуждается в рамках теории Ландау-Гинзбурга.

Введение

Структуры на основе упорядоченных матриц (пористые стекла, опаловые матрицы, силикатные матрицы, пористые пленки оксида алюминия и других металлов), заполненные полярными веществами, могут использоваться для изготовления различных элементов наноэлектроники. При этом свойства частиц вещества в матрицах могут значительно отличаться от свойств соответствующих объемных материалов благодаря влиянию размерных эффектов и взаимодействию частиц со стенками пор и между собой. К настоящему времени имеется большое число работ, посвященных исследованию нанокомпозитов на основе пористых матриц, заполненных сегнетоэлектриками [1–10]. Исследования полярных наноструктур, полученных на основе пористого оксида алюминия, были приведены в [5–10]. В работах [4, 5] сообщалось о стабилизации сегнетоэлектрической фазы сегнетовой соли в пористом оксиде алюминия вплоть до температуры разложения (328 К), которая примерно на 30 К выше температуры верхнего фазового перехода в объемных образцах. В [6] было показано, что для сегнетовой соли в порах Al_2O_3 происходит расширение области существования сегнетоэлектрической фазы за счет повышения температуры верхнего и понижения температуры нижнего фазовых переходов. Изменение температур фазовых переходов в оксидных пористых матрицах наблюдалось также для TGS [4], DTGS [7], $SC(NH_2)_2$ [8], $NaNO_2$ [9], KNO_3 [10] и ряда других сегнетоэлектриков.

В настоящей работе мы приводим результаты исследований диэлектрической проницаемости и коэффициента третьей гармоники для нанокомпозитов на основе нитрата рубидия $RbNO_3$, внедренного в пленки Al_2O_3 с диаметрами пор 300 нм, 100 нм и 50 нм.

Образцы и методика эксперимента

Нитрат рубидия имеет четыре устойчивые формы. При комнатной температуре $RbNO_3$ имеет тригональную форму (фаза IV) и кристаллизуется из водного раствора в виде иголок вдоль оси c [11]. Эта фаза является устойчивой вплоть до 164 °С и по данным [11] является пироэлектрической с образованием 180-градусных пироэлектрических доменов. В температурном интервале 164–219 °С нитрат рубидия существует в кубической пироэлектрической фазе (фаза III). По данным [12] при фазовом переходе 164 °С проводимость $RbNO_3$ увеличивается на два порядка, и эта фаза обладает суперионной проводимостью. В интервале от 219

до 285 °С RbNO₃ находится в ромбоэдрической фазе (фаза II). Эта фаза определяется как антисегнетоэлектрическая [13]. Выше фазового перехода 285 °С RbNO₃ снова переходит в кубическую фазу (фаза I), которая существует вплоть до температуры плавления 305 °С.

Для получения нанокомпозитов использовался химически чистый RbNO₃ и оксидные пленки Al₂O₃, изготовленные фирмой «TopMembranes Technology» с различными размерами пор. Электронные фотографии пленок Al₂O₃ и их основные характеристики показаны на рис. 1. Внедрение нитрата рубидия в поры производилось из нагретого насыщенного раствора RbNO₃ при пониженном давлении. Степень заполнения пор, определенная по изменению массы пленок, составляла не менее 50 %. В качестве эталонных образцов использовались образцы RbNO₃ в виде таблеток с диаметром 10 мм и толщиной 1.5 мм, полученные прессованием при давлении $8 \cdot 10^3$ кг/см².

Для измерения комплексной диэлектрической проницаемости использовался цифровой измеритель иммитанса E7–25 с частотным диапазоном 20 Гц–1 МГц. В качестве электродов использовалась индий-галлиевая эвтектика. Наличие полярной фазы RbNO₃ фиксировалось по генерации гармоник при подаче на образец электрического поля с частотой 2 кГц и напряженностью ~50 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. В процессе эксперимента записывалась амплитуда третьей гармоники ($\gamma_{3\omega} = U_{3\omega}/U_{\omega}$). Более подробно методика нелинейных измерений описана в [14].

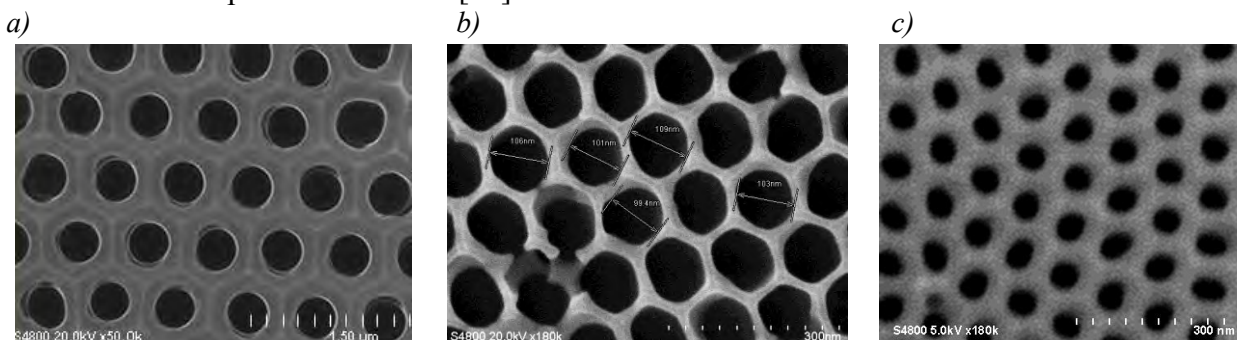


Рис. 1. а) Размер ячеек 450 нм, диаметр пор 300 нм, толщина пленки 50 мкм;
 б) Размер ячеек 125 нм, диаметр пор 100 нм, толщина пленки 5 мкм;
 в) Размер ячеек 100 нм, диаметр пор 50 нм, толщина пленки 1 мкм

Экспериментальные результаты и обсуждение

Температурные зависимости диэлектрической проницаемости $\epsilon'(T)$ и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}(T)$ для поликристаллического нитрата рубидия представлены на рис. 2. В ходе нагрева фазовый переход наблюдается при температуре 164 °С, в ходе охлаждения – при 153 К. Значение коэффициента третьей гармоники составляет порядка 0.01 и имеет минимум в районе фазового перехода. Так как RbNO₃ ниже 164 °С является пироэлектриком, минимум коэффициента третьей гармоники на фазовом переходе, вероятно, обусловлен обращением в ноль пироэлектрической поляризации.

На рис. 3 приведены температурные зависимости эффективной диэлектрической проницаемости $\epsilon^*(T)$ и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}(T)$ для нанокомпозита RbNO₃/Al₂O₃ с размером пор 300 нм. Как следует из графиков $\epsilon^*(T)$, для нанокомпозита увеличивается эффективная диэлектрическая проницаемость и появляется дополнительная аномалия при охлаждении в районе ~130 °С. Кроме этого, для нанокомпозита происходит увеличение на порядок коэффициента третьей гармоники. Рост значений эффективной диэлектрической проницаемости для композита, вероятно, обусловлен межслоевой поляризацией Максвелла-Вагнера. О появлении поляризации Максвелла-Вагнера свидетельствует также появление более сильной зависимости диэлектрических свойств от частоты. Возрастание коэффициента

третьей гармоники может свидетельствовать о том, что ограничение размеров частиц RbNO_3 до нанометрового диапазона приводит к переходу нитрата рубидия из пироэлектрического состояния в сегнетоэлектрическое. На рис. 4 приведены температурные зависимости $\epsilon^*(T)$ и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}(T)$ для нанокompозита $\text{RbNO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ с размером пор 100 нм. Как следует из графиков, для композита температуры фазовых переходов снижаются до 160 °C при нагреве и до 154 °C при охлаждении. Основное отличие $\epsilon^*(T)$ по сравнению с порами 300 нм заключается в том, что для пор 100 нм вторая аномалия при охлаждении отсутствует. Коэффициент третьей гармоники $\gamma_{3\omega}(T)$ при этом вблизи фазового перехода увеличивается примерно в 2,5 раза и имеет более резкий характер, чем для объемного образца.

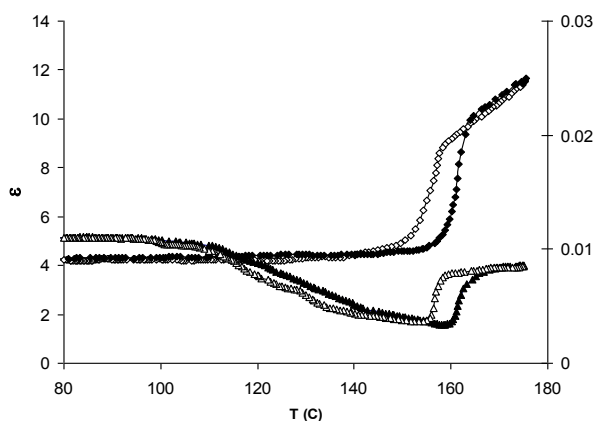


Рис. 2. Зависимости $\epsilon'(T)$ (◆ – нагрев, ◇ – охлаждение) и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ (▲ – нагрев, Δ – охлаждение) для объемного RbNO_3

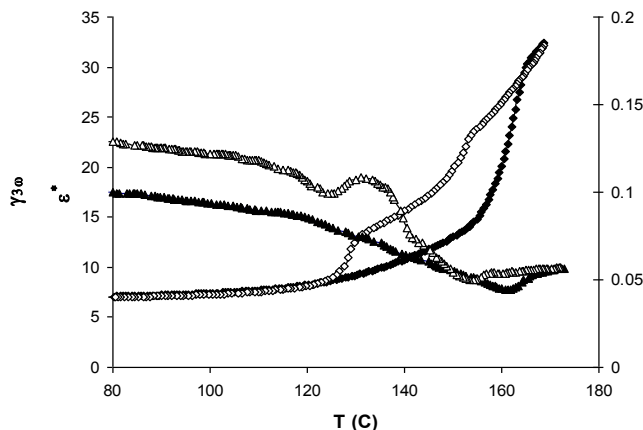


Рис. 3. Зависимости $\epsilon^*(T)$ (◆ – нагрев, ◇ – охлаждение) и $\gamma_{3\omega}$ (▲ – нагрев, Δ – охлаждение) для $\text{RbNO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ с диаметром пор 300 нм

На рис. 5 приведены температурные зависимости эффективной диэлектрической проницаемости $\epsilon^*(T)$ и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}(T)$ для нанокompозита $\text{RbNO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ с размером пор 50 нм.

Как следует из графиков $\epsilon^*(T)$, для этих образцов диэлектрической проницаемости имеет меньшее значение, что связано с уменьшением процентным содержанием нитрата рубидия на единицу объема композита. Кроме этого, при охлаждении наблюдается всего одна аномалия $\epsilon^*(T)$ в районе ~127 °C. Коэффициент третьей гармоники имеет тот же порядок, что для объемного образца.

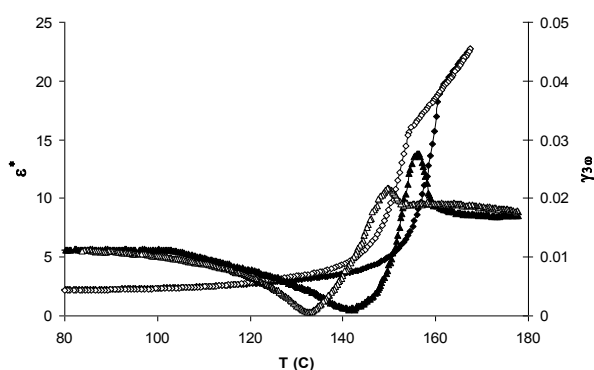


Рис. 4. Зависимости $\epsilon^*(T)$ (◆ – нагрев, ◇ – охлаждение) и $\gamma_{3\omega}$ (▲ – нагрев, Δ – охлаждение) для $\text{RbNO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ с диаметром пор 100 нм

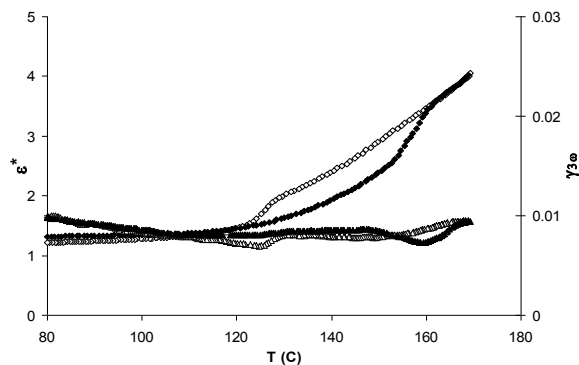


Рис. 5. Зависимости $\epsilon^*(T)$ (◆ – нагрев, ◇ – охлаждение) и $\gamma_{3\omega}$ (▲ – нагрев, Δ – охлаждение) для $\text{RbNO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ с диаметром пор 50 нм

Как показали дополнительные рентгенофазовые исследования, наличие двух аномалий $\varepsilon^*(T)$ для нанокompозита $\text{RbNO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ с диаметром пор 300 нм соответствует переходу кубическая-тригональная фаза, одна (~ 130 °C) для RbNO_3 в порах, вторая (~ 154 °C) для RbNO_3 , не вошедшего в поры. Таким образом, основные результаты исследований сводятся к увеличению температурного гистерезиса для пор 300 нм и 50 нм и отсутствие такого эффекта для композита с диаметром пор 100 нм.

Рассмотрим возможные причины изменения температурного гистерезиса фазового перехода нитрата рубидия для разных матриц Al_2O_3 . В рамках теории фазовых переходов Ландау плотность термодинамического потенциала объемного одноосного сегнетоэлектрического кристалла представляется в виде разложения в ряд по некоторому малому параметру, в качестве которого выбрана поляризация P [15]:

$$\Phi = F_0 + \frac{1}{2}\alpha P^2 + \frac{1}{4}\beta P^4 + \frac{1}{6}\gamma P^6 + \dots, \quad (1)$$

где $\alpha = \alpha_0(T-T_0)$, P – поляризация решетки, имеющая смысл параметра упорядочения, коэффициенты α_0 , β и γ зависят от температуры T . Разложение (1) справедливо вблизи точки перехода T_0 , причем при $\beta > 0$ и $\gamma \geq 0$ оно описывает фазовый переход второго рода, а при $\beta < 0$ и $\gamma > 0$ – переход первого рода. Для фазовых переходов первого рода существуют три характерные температуры: температура T_0 , при которой равны термодинамические потенциалы обеих фаз; температура T_0^- – абсолютная потеря устойчивости высокотемпературной фазы; температура T_0^+ – абсолютная потеря устойчивости низкотемпературной фазы. Разность этих температур определяет величину температурного гистерезиса. Согласно [16] для классического сегнетоэлектрика первого рода величина гистерезиса определяется соотношением:

$$(T_0^+ - T_0^-) = \beta^2 / 4\alpha_0\gamma. \quad (2)$$

Если соотношение (1) записать для матричной структуры в разложении потенциала Φ , необходимо учесть энергию, обусловленную неоднородностью поляризации F_1 и энергию, обусловленную диполь-дипольным взаимодействием полярных частиц в соседних порах F_2 :

$$F_1 = \sum_i \int_V \left(\frac{1}{2} \delta(\text{grad} P_i(r))^2 \right) dV_i \quad \text{и} \quad F_2 = \sum_{i,j} \int_V \int_V \left[\frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{p}_i)(\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{p}_j)}{r_{ij}^5} \right] dV_i dV_j, \quad (3)$$

где V_i , V_j и \mathbf{p}_i , \mathbf{p}_j – объемы и поляризация частиц RbNO_3 в соседних порах, соответственно, r_{ij} – является экстраполяционной длиной, которая определяется распределением частиц в образце.

Тогда из (1) и (3) получаем:

$$\Phi = \frac{1}{2}\alpha P^2 + \frac{1}{4}\beta P^4 + \frac{1}{6}\gamma P^6 + F_1 + F_2 + \dots \quad (4)$$

Теперь, используя соотношение (4) и проведя вычисления для определения гистерезиса, аналогичные проделанным в [16], получим:

$$(T_0^+ - T_0^-) = \frac{\beta^2}{4\alpha_0\gamma} \pm \frac{1}{\alpha_0} \left(\frac{\partial^2 (F_1 + F_2)}{\partial P^2} \right) \quad (5)$$

Отсюда следует, что учет неоднородности поляризации и диполь-дипольного взаимодействия полярных частиц может привести как к увеличению, так и уменьшению температурного гистерезиса фазового перехода в зависимости от вида неоднородности или ориентации поляризации частиц. Основное отличие между матрицами 300 нм, 50 нм и матрицами 100 нм заключается в том, что для первых двух поры находятся на относительно большом расстоянии, и диполь-дипольным взаимодействием можно пренебречь. Для матрицы с размером пор 100 нм расстояние между порами в два раза меньше диаметра пор, и для них нельзя пренебрегать диполь-дипольным взаимодействием. В частности, в [17], на примере порошков KNO_3 было обнаружено кооперативное поведение полярных частиц. Отдельные частицы KNO_3 вели себя как отдельные сегнетоэлектрические домены, причем в каждой ча-

стице фазовый переход происходил независимо от ожидаемой температуры Кюри. В то же время для частиц KNO_3 , находящихся в тесном контакте, была характерна тенденция к кооперативному поведению (они вели себя как единый большой сегнетоэлектрический домен), со свойствами близкими к монокристаллу.

Заключение

Таким образом, проведенные исследования диэлектрической проницаемости и коэффициента третьей гармоники для нанопористых матриц Al_2O_3 , с размерами пор 300 и 50 нм, заполненных нитратом рубидия, показали, что при нагреве происходит смещение фазового перехода $T_c \approx 164^\circ\text{C}$ на $3-4^\circ\text{C}$ в низкотемпературную область и увеличение температурного гистерезиса с 14 (для поликристаллического RbNO_3) до 33 К (для RbNO_3 в порах Al_2O_3). В отличие от этих результатов для матриц (100 нм) с малыми расстояниями между порами такой зависимости не наблюдается. Полученные результаты можно объяснить в рамках теории Ландау-Гинзбурга.

ЛИТЕРАТУРА

1. Эволюция NaNO_2 в пористых матрицах ФТТ / Ch. Tien, E. V. Чарная, С. В. Барышников, М. К. Lee, S.Y. Sun, D. Michel, W. Bohlmann. 2004. Т. 46. С. 2224-2228.
2. Диэлектрические свойства смешанных сегнетоэлектриков $\text{NaNO}_2\text{-KNO}_3$ в нанопористых силикатных матрицах / С. В. Барышников, Е. В. Чарная, А. Ю. Милинский, Е. В. Стукова, Ch. Tien, W. Bohlmann, D. Michel // ФТТ. 2009. Т. 51. С.1172-1176.
3. Ferroelastic phase transition in LiCsSO_4 embedded into molecular sieves / B. F. Borisov, E. V. Charnaya, A. L. Pirozerskii, C. Tien, M. K. Lee, S. V. Baryshnikov, A. S. Bugaev, D. Michel // Physics Letters A. 2010. V. 375. С.183-186.
4. Свойства нанопористого оксида алюминия с включениями триглицидсульфата и сегнетовой соли / О. В. Рогазинская, С. Д. Миловидова, А. С. Сидоркин, В. В. Чернышев, Н. Г. Бабичева // ФТТ. 2009. Т. 51. С. 1430-1432.
5. Yadlovker D., Berger S. Uniform orientation and size of ferroelectric domains // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 184112.
6. Ferroelectricity in rochelle salt nanoparticles confined to porous alumina / S. V. Baryshnikov, E. V. Stukova, A. Yu. Milinskiy, E. V. Charnaya, C. Tien // Ferroelectrics. 2010. V. 396. P. 3-9.
7. Linear and non-linear dielectric properties of dtgs in porous AL_2O_3 films / E. Stukova, S. Baryshnikov, T. Baryshnikova, A. Solnyshkin // Ferroelectrics. 2019. V. 543. P. 184-190.
8. Милинский А. Ю., Барышников С. В., Антонов А. А. Исследование фазовых переходов сегнетоэлектрика $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ в нанопористых матрицах на основе Al_2O_3 // ФТТ. 2017. Т. 59. С. 1759.
9. Dielectric and Repolarization Properties of Nanocomposites Based on Porous Matrix with Sodium Nitrite / O. V. Rogazinskaya, A. S. Sidorkin, N. G. Popravko, S. D. Milovidova, A. A. Naberezhnov, Grokhotova // Ferroelectrics. 2014. V. 469. P. 138.
10. Temperature range broadening of the ferroelectric phase in KNO_3 nanoparticles embedded in the pores of the nanoporous Al_2O_3 matrix / O. A. Alekseeva, A. A. Naberezhnov, E. V. Stukova, S. V. Baryshnikov, A. Franz // Ferroelectrics. 2021. V. 574. P. 8.
11. Bury P. C., McLaren A. C. Ionic diffusion in solid thallos and rubidium nitrates // Phys. Stat. Sol., 1969. V. 31. P. K5.
12. Salhotrae P. P., Subbarao A. C., Venkateswarlu P. Polymorphism of Rubidium Nitrate // Phys. Stat. Sol. 1968. V. 29. P. 859-864.
13. Dantsiger Ya. Dielectric parameters of rubidium nitrate // Soviet Phys. Solid State. 1966. V. 7. P. 1845-1848.
14. Ferroelectric phase transition in Langmuir-Blodgett films of copper phthalocyanine / S. G. Yudin, L. M. Blinov, N. N. Petukhova, S. P. Palto // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. 1999. V. 70. P. 633-640.
15. Гинзбург В. Л. Фазовые переходы в сегнетоэлектриках (несколько исторических замечаний) // УФН. 2001. Т. 171. С. 1091-1097.
16. Егоров В. М., Леманов В. В. Фазовый переход в кристаллах дисеринсульфата моногидрата по данным дифференциальной сканирующей калориметрии // ФТТ. 2006. Т. 48. С. 1838-1842.
17. Westphal M. J. Cooperative behaviour during ferroelectric transitions in KNO_3 powder, J. Appl. Phys. 1993. V. 74 P. 3131-3137.

МЕХАНИЗМЫ РАДИАЦИОННОГО ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В ОКСИДЕ ЦИНКА ПРИ КОМПЛЕКСНОМ ОБЛУЧЕНИИ

И. В. Верхотурова, В. В. Нецименко, А. И. Бурова

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
Благовещенск, e-mail: rusia@mail.ru

В настоящей работе приведены результаты исследования дефектообразования в пигментах на основе оксида цинка терморегулирующих покрытий, после комплексного облучения одинаковыми по энергии, но разными по типу заряженными частицами.

Оптические свойства оксида цинка, применяемого в качестве пигментов ТРП космических аппаратов под воздействием сложного по составу и энергиям ионизирующего излучения космического пространства, ухудшаются. Причиной этого являются возникающие радиационные дефекты. Для обеспечения стабильности оптических свойств необходимо знать, не только какие наведенные дефекты образуются в пигментах, но и на какой глубине они образуются, а также механизмы их образования.

В данной статье представлены результаты исследования механизмов радиационного дефектообразования в микропорошках оксида цинка после комплексного (последовательного) облучения протонами и электронами одинаковых энергий. Для установления механизмов исследовались, представленные в работах [1, 2] спектры диффузного отражения необлученных и облученных микропорошков ZnO, разложенные на индивидуальные полосы. Спектры диффузного отражения получены абсолютным методом (in situ) непосредственно сразу после облучения в комплексном имитаторе факторов космического пространства «КИФК» (Харбинский политехнический университет, Китай). Выбраны спектры оксида цинка, облученного при следующих режимах:

- отдельно только электронами или только протонами (при энергиях частиц 100 кэВ и $3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ для электронов и протонов соответственно);
- комплексно в двух режимах (при тех же значениях энергии частиц и флюенсах): первый – сначала электронами затем протонами, второй – сначала протонами затем электронами.

В работе [3] приведены результаты моделирования с помощью программ TRIM и CASINO взаимодействия протонов и электронов энергией 100 кэВ с однослойными мишенями из оксида цинка. Полученные результаты позволили определить вид потерь энергии заряженных частиц и глубину их проникновения в микропорошки. Что является весьма важным, так как на изменение оптических свойств пигментов влияют дефекты, образующиеся именно в приповерхностном слое микропорошков оксида цинка. Из результатов моделирования следует, что радиационные дефекты при облучении протонами будут образовываться в пределах поликристаллов оксида цинка, а при облучении электронами могут образовываться как в пределах зерна, так и в межзеренном пространстве.

Для установления механизмов радиационного дефектообразования в оксиде цинка при его комплексном облучении протонами и электронами сначала были изучены основные механизмы радиационного дефектообразования при отдельном облучении оксида цинка этими частицами. Для этого было проведено сопоставление механизмов дефектообразования, представленных в работе [4], с разложенными на индивидуальные полосы разностными спектрами диффузного отражения облученного оксида цинка, приведенными в работе [1].

Нещименко В. В. в работе [4] приводит схемы механизмов радиационного дефектообразования в микропорошках ZnO при отдельном облучении электронами и протонами, обусловленное в основном двумя процессами: преимущественно ионизационными (при данной энергии заряженных частиц) и смещением атомов решетки из узлов решетки. При ионизационных процессах происходит образование положительно или отрицательно заряженных атомов решетки в междоузлии, в результате многократной ионизации нейтральных атомов решетки и электростатического выталкивания этих заряженных ионов в междоузлие, с последующей их нейтрализацией.

Также происходит изменение зарядового состояния собственных дефектов в результате взаимодействия с термолизованными электронами, образование восстановленного водорода, образующего стабильные дефекты решетки или десорбция нейтрализованного кислорода после облучения и др. Но указанные автором работы [4] механизмы дефектообразования не учитывают то, что имеют место и более сложные процессы образования радиационных дефектов с участием более одной частицы, а в процессе облучения может происходить взаимная рекомбинация вакансий и междоузельных атомов, захват дефектов порами и дислокациями и другие процессы [4].

Действие указанных в работе [4] механизмов подтверждается, разложенным на индивидуальные полосы разностным спектром диффузного отражения оксида цинка, облученного электронами (рис. 1).

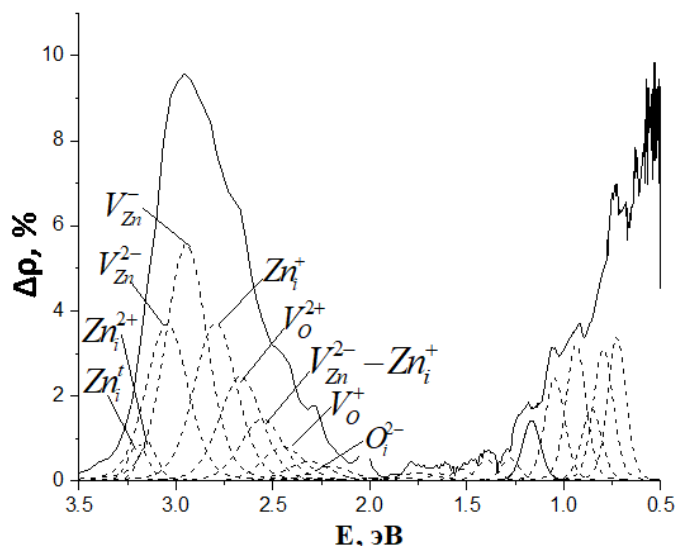
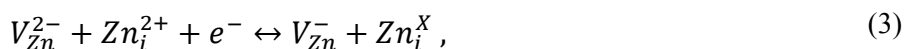
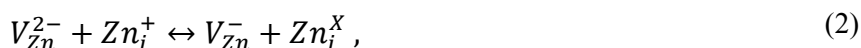
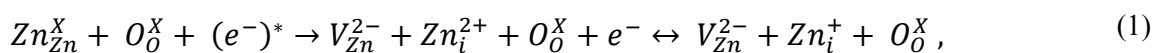


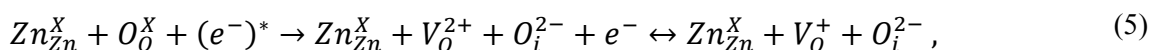
Рис. 1. Разностный спектр диффузного отражения оксида цинка, облученного электронами, разложенный на индивидуальные полосы

Из сравнения спектров необлученного и облученного электронами оксида цинка видно, что значительное снижение интенсивности полосы поглощения наведенных дефектов Zn_i^{2+} и V_{Zn}^{2-} и рост интенсивности полос наведенных дефектов Zn_i^+ и V_{Zn}^- в спектре облученного электронами оксида цинка подтверждает механизмы радиационного дефектообразования, происходящие по схемам (1)-(4):



где Zn_{Zn}^X , O_O^X – атомы цинка и кислорода в узлах решетки; $(e^-)^*$, e^- – ускоренный и термолонизованный электрон; Zn_i^{2+} , Zn_i^+ , V_{Zn}^{2-} , V_{Zn}^- , O_i^{2-} , O_i^- , V_O^{2+} , V_O^+ – междуузельные ионы, вакансии кислорода и цинка в различном зарядовом состоянии; Zn_i^X – междуузельный атом цинка в нейтральном зарядовом состоянии.

Взаимодействие электронов ионизирующего излучения в большей степени происходит с катионной подрешеткой оксида цинка, чем с анионной. Поскольку интенсивность полос поглощения кислородных вакансий и междуузельных дефектов, образующих при облучении по схемам (5) и (6), изменилась незначительно по сравнению с интенсивностью аналогичных полос в спектре необлученного оксида цинка:



Также в объеме ZnO на глубине пробега электронов происходит термолонизация и накопление свободных электронов.

Аналогичным образом действие, указанных в работе [4] схем механизмов радиационного образования в оксиде цинка при облучении только протонами, подтверждается разностным спектром диффузного отражения (рис. 2). Из спектра видно, что наибольший вклад в изменение оптических свойств оксида цинка вносят образующиеся наведенные дефекты катионной подрешетки оксида цинка.

Также из сравнения спектров необлученного и облученного протонами оксида цинка видно, возрастание интенсивности полос поглощения дефектов V_{Zn}^{2-} , Zn_i^{2+} , V_{Zn}^- и Zn_i^+ после облучения микропорошков подтверждает механизмы дефектообразования в катионной подрешетке, связанные с образованием ионизированных атомов и/или междуузельных ионов различного зарядового состояния с последующим изменением их зарядового состояния, описываемые схемами (7) – (9):

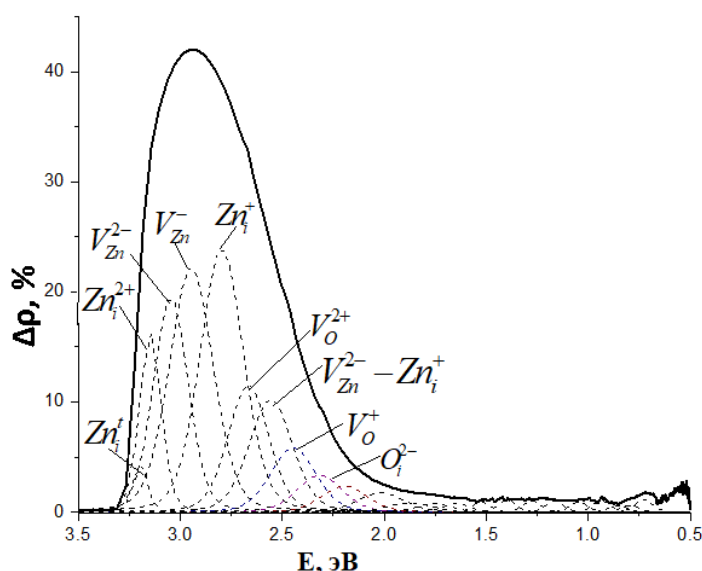
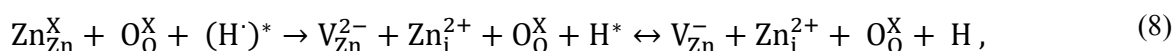
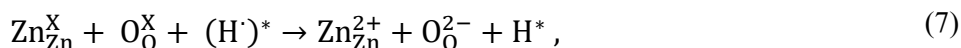


Рис. 2. Разностный спектр диффузного отражения оксида цинка, облученного протонами, разложенный на индивидуальные полосы

Взаимодействие протонов с анионной подрешеткой, как и в случае облучения только электронами, происходит менее выражено по сравнению с катионной подрешеткой.

Из спектра видно, что увеличение интенсивности полосы поглощения наведенных дефекта V_O^{2+} и появление полос междуузельного кислорода O_i^{2-} и вакансии кислорода V_O^+ , подтверждает механизмы, происходящие по схемам (10) и (11):



Также известен процесс десорбции нейтрального кислорода после облучения [4].

При исследовании деградации оптических свойств пигментов ТРП на основе оксида цинка важное значение имеет обоснование механизмов радиационного дефектообразования в случае, когда на материал комбинированно воздействует несколько видов ионизирующих частиц.

Из возможных комбинированных воздействий на микропорошки оксида цинка было рассмотрено два вида комплексного воздействия одинаковых по энергии, но разных по типу ионизирующих частиц (протоны и электроны):

1. Комплексное облучение (то есть последовательное) протонами затем электронами.
2. Комплексное облучение электронами затем протонами.

При этих видах комплексного воздействия попробуем установить механизмы дефектообразования в микропорошках оксида цинка.

При этом будем использовать, представленные на рис. 3 и 4, разностные спектры диффузного отражения оксида цинка, облученного комплексно, разложенные на индивидуальные полосы.

Видно, что комплексное воздействие приводит к образованию интегральной полосы поглощения аналогичной полосе, образующейся при облучении только протонами.

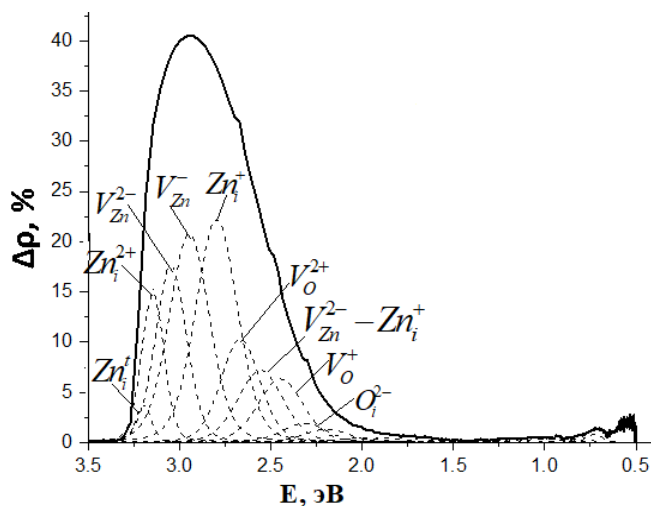


Рис. 3. Разностный спектр диффузного отражения оксида цинка, облученного комплексно электронами затем протонами, разложенный на индивидуальные полосы

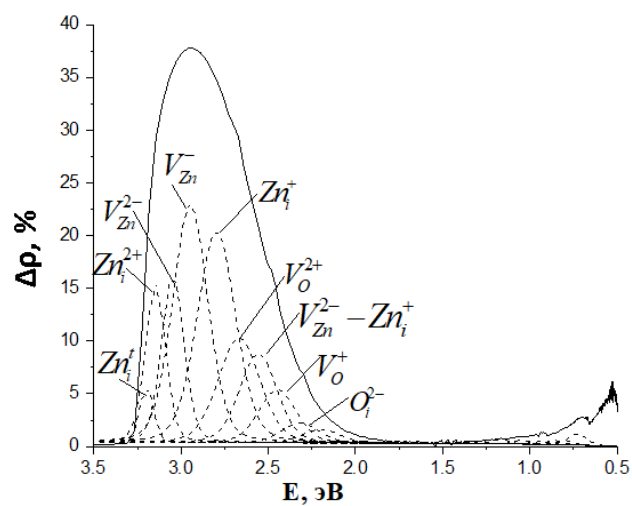


Рис. 4. Разностный спектр диффузного отражения оксида цинка, облученного комплексно протонами затем электронами, разложенный на индивидуальные полосы

Интенсивность этой полосы в максимуме при комплексном воздействии электронами затем протонами, уменьшилась на 5 % по сравнению с интенсивностью этой же полосы при облучении оксида цинка только протонами (рис. 2 и 3).

А при комплексном облучении сначала протонами затем электронами это уменьшение составляет 12 % (рис. 2 и 4).

Уменьшение интенсивности полосы может объясняться тем, что при определенном виде комплексного воздействия концентрация образующихся наведенных дефектов не одинакова, давая разный вклад в интегральную полосу поглощения.

Основываясь на полученных путем моделирования значениях глубины проникновения заряженных частиц в микропорошки оксида цинка можно предположить, что при комплексном облучении сначала электронами затем протонами первоначально будут образовываться наведенные дефекты по выше описанным механизмам характерным для облучения только электронами (схемы (1)-(6)).

Эти дефекты, располагающиеся на глубине от 8 до 24 мкм, которая превышает размер поликристалла оксида цинка, не дают вклад в интегральную полосу поглощения.

Это означает, что до 8 мкм будет практически структура поликристаллов оксида цинка без наведенных электронами дефектов.

Поэтому последующее облучение протонами при комплексном воздействии приводит к образованию и росту концентрации наведенных дефектов в основной катионной подрешетке согласно данным схемам (7)-(9) аналогичным как при облучении только протонами. Глубина расположения, которых не превышает размер поликристалла оксида цинка.

Это подтверждается значительным увеличением интенсивности индивидуальных полос поглощения этих дефектов (Zn_i^{2+} , V_{Zn}^{2-} , Zn_i^+ , V_{Zn}^- и комплекса $V_{Zn}^{2-} - Zn_i^+$) практически до значений как при облучении только протонами.

Интенсивность дефектов анионной подрешетки возросла только у дефектов V_O^{2+} и V_O^+ .

При комплексном же облучении сначала протонами затем электронами первоначально будут образовываться наведенные дефекты по выше описанным механизмам характерным для облучения только протонами (схемы (7)-(11)).

При последующем облучении электронами при комплексном воздействии происходит взаимодействие электронов со структурой оксида цинка, имеющей наведенные протонами дефекты.

Это приводит к уменьшению концентрации наведенных протонами некоторых дефектов катионной подрешетки, что подтверждается понижением интенсивности полос поглощения этих дефектов.

Так, интенсивности полос поглощения Zn_i^+ и V_{Zn}^{2-} уменьшились, а интенсивности полос поглощения дефектов V_{Zn}^- и Zn_i^X повышаются на 2% по сравнению со значением после облучения только протонами.

Интенсивность же полос поглощения остальных дефектов катионной и анионной подрешеток либо не изменилась, либо изменилась не более чем на 1 %.

Предположительно, наблюдаемое уменьшение концентрации дефекта Zn_i^+ изначально наведенного протонами, больше связано с взаимодействием этого дефекта с термолизованными электронами по схеме:



Термолизованные электроны образуются как в результате взаимодействия ускоренных электронов по схеме (1), так и в результате взаимодействия с атомами водорода по схеме:



Подтверждением данных двух механизмов является то, что интенсивность полосы поглощения в области от 0,75 эВ до 0,5 эВ при комплексном воздействии данного вида выше, чем при облучении только протонами.

Именно в этой области находятся полосы поглощения нейтрального междоузельного цинка Zn_i^X , свободных электронов и различных мод ОН-групп.

Результаты проведенного исследования позволили установить следующее.

Наведенные дефекты в микропорошках оксида цинка при облучении его протонами энергией 100 кэВ образуются в пределах поликристаллов, а при облучении электронами такой же энергией могут образовываться как в пределах зерна, так и в межзерненном пространстве.

При комплексном облучении сначала электронами затем протонами наведенные дефекты в оксиде цинка образуются в основном в катионной подрешетке по схемам аналогичным как при облучении только протонами.

Дефекты же, образованные по механизмам характерным для облучения электронами, при данном виде комплексного облучения, будут располагаться на глубине, превышающей размер поликристалла оксида цинка, не давая вклад в интегральную полосу поглощения.

Механизмы радиационного дефектообразования в оксиде цинка при комплексном облучении сначала протонами затем электронами на первом этапе облучения совпадают с механизмами при раздельном облучении протонами.

При последующем облучении электронами при комплексном воздействии происходит взаимодействие электронов как со структурой оксида цинка, имеющей наведенные протонами дефекты, так и с восстановленным водородом с образованием термолизированных электронов, активно взаимодействующих с дефектами катионной подрешетки и понижающих степень их ионизации.

Все это приводит к уменьшению концентрации наведенных протонами некоторых дефектов катионной подрешетки, что подтверждается понижением интенсивности полос поглощения этих дефектов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Верхотурова И. В., Нецименко В. В. Исследование совместного действия заряженных частиц // Вестник АмГУ. 2020. Т. 89. С. 45-49.
2. Верхотурова И. В., Нецименко В. В. Расчет концентрации наведенных центров поглощения в оксиде цинка // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: матер. XVII регион. науч. конф. (15-21 сентября 2019, г. Благовещенск). Благовещенск: Изд-во АмГУ, БГПУ, 2019. С. 70-72.
3. Верхотурова И. В. Синергетические эффекты в пигментах оксида цинка при воздействии ионизирующих излучений: магистерская диссертация // ФГБОУ ВО АмГУ. Благовещенск. 2020. 63 с.
4. Нецименко В. В. Структура, свойства и радиационная стойкость оксидных микро- и нанопорошков и отражающих покрытий, изготовленных на их основе: дис. доктора физ.-мат. наук: 01.04.07 // ФГБОУ ВО ТУСУР. Томск. 2016. 273 с.

ПОВЫШЕНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ОКСИДА ВИСМУТА ОБРАБОТКОЙ ПЛАЗМОЙ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РАЗРЯДА

М. С. Круглов¹, С. А. Пячин^{1,2}, Т. В. Бондарева¹, Н. В. Кожемяко^{1,3}

¹ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»

²ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»

³ФГБУН «Институт тектоники и геофизики им. Ю. А. Косыгина» ДВО РАН

Хабаровск, e-mail: kruglov_maxim@mail.ru

В работе представлены результаты исследования каталитической активности частиц оксида висмута, подверженных воздействию плазмой емкостного высокочастотного разряда низкого давления, при разложении органического красителя – метиленового синего в условиях его облучения УФ-видимым светом. Продолжительность плазменной обработки оксида висмута составляла 10 мин. Показано, что при использовании в качестве катализатора оксида висмута, облученного в плазме, скорость разложения красителя увеличивается. Представлены результаты изменения оптических свойств оксида висмута, подверженного плазменной обработке.

Применение полупроводниковых фотокатализаторов является многообещающим методом, управляемым солнечной энергией, для борьбы с загрязнителями воды [1]. Оксиды металлов среди полупроводниковых материалов являются лучшим выбором из-за их отличительных свойств, высокой стабильности и экономической эффективности [2]. Для разложения органических соединений потенциал валентной зоны оксида металла должен быть как можно ниже, чтобы обеспечить образование дырок (h^+) с высокой способностью к окислению [3]. Они могут эффективно разлагать адсорбированный на поверхности органический загрязнитель, а также способны сделать термодинамически благоприятным окисление поверхностной гидроксильной группы ($-OH$) и/или превращение H_2O в гидроксильный радикал ($\bullet OH$). Следовательно, потенциал валентной зоны оксида металла играют решающую роль в определении общей эффективности фотокатализа. Bi_2O_3 также считается привлекательным кандидатом в качестве катализатора из-за его глубокого потенциала валентной зоны $+3,1$ В по сравнению с обычным водородным электродом и запрещенной зоной $2,7$ эВ [4–6].

Одним из эффективных способов улучшения каталитических свойств оксидных соединений является плазменная обработка. Например, было показано, что Ni/MgO катализатор, полученный в плазме атмосферного высокочастотного разряда с последующим прокаливанием, обладает меньшим размером частиц и более высокой дисперсностью активного компонента, лучшей низкотемпературной активностью в реакциях разложения метана и углекислого газа [7]. В целом плазменный катализ является перспективной технологией очистки отходящих газов, характеризующейся более высокой энергоэффективностью, высокой скоростью минерализации и низким образованием побочных продуктов. Плазменные разряды влияют на свойства катализатора: изменение химического состава, увеличение площади поверхности или изменение каталитической структуры. [8]. Плазменная обработка должна способствовать переходу оксида висмута в неравновесное состояние, характеризующееся повышенной концентрацией электронно-дырочных пар и образованием дефектов кристаллической структуры. Поскольку метод активации оксида висмута воздействием низкотемпературной плазмой высокочастотного (ВЧ) разряда изучен не в полной мере, то проведение исследований в этом направлении имеет особый научный и практический интерес.

Цель научной работы заключалась в изучении влияния обработки частиц оксида вис-

мута плазмой высокочастотного газового разряда низкого давления на оптические и фотокаталитические свойства Bi_2O_3 .

Для проведения экспериментов были изготовлены покрытия из химически чистого порошка Bi_2O_3 , нанесенные на стеклянные пластины толщиной 2 мм. Образцы помещали в вакуумную камеру с двумя внешними дисковыми электродами, к которым подключали ВЧ генератор. Схема и принцип работы плазменной установки подробно описаны в статье [9]. Частота межэлектродного напряжения была равна 11,5 МГц, а амплитуда – около 2 кВ. Остаточное давление воздуха в камере поддерживалось на уровне 50–70 мТорр. Продолжительность плазменной обработки была равна 10 мин.

Оптические характеристики оксида висмута исследовали методом спектроскопии диффузного отражения с помощью спектрометрического комплекса на основе монохроматора МДР-41 в диапазоне длин волн от 400 до 800 нм с дискретностью 0,1 нм. Полученные спектры сглаживали, используя усреднение интенсивности отраженного излучения по семи близлежащим длинам волн. Коэффициент отражения R вычисляли как отношение интенсивностей отраженного света от оксида висмута и чистого оксида магния, который служил эталоном. На основе данных о зависимостях коэффициента отражения $R(\lambda)$ от длины волны была рассчитана функция Кубелка – Мунка, которая прямо пропорциональна коэффициенту поглощения и обратно пропорциональна коэффициенту рассеяния [7]:

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

Предполагая, что коэффициент рассеяния не зависит от длины волны, можно считать, что функция Кубелка - Мунка дает информацию о поглотительной способности исследуемого материала.

Ширина запрещенной зоны E_g полупроводника была оценена на основе анализа функции \sqrt{FE} от энергии фотона $E = \frac{hc}{\lambda}$ (h – постоянная Планка, c – скорость света) [8]. Значение E_g соответствует пересечению с осью абсцисс E прямой линии, проходящей через прямолинейный участок графика \sqrt{FE} .

Фотокаталитическую активность оксида висмута определяли по скорости разложения органического красителя – метиленового синего при облучении УФ-видимым светом дуговой ртутной лампы ДРК-120. Продолжительность облучения кюветы – 150 мин. В качестве сосуда использовали кварцевую кювету. В нее наливали краситель, который смешивали с водой таким образом, чтобы его начальная относительная объемная концентрация составляла 0,05 %. Затем кювету с водным раствором метиленового синего облучали светом ртутной лампы и через каждые 30 мин, пропуская лазерный луч сквозь него, измеряли оптическую плотность раствора по формуле:

$$D = \ln \frac{I_0}{I}, \quad (2)$$

где I_0 – интенсивность лазерного луча, падающего на кювету; I – интенсивность луча на выходе из кюветы. Источником лазерного излучения служил гелий-неоновый лазер ГН-5 с длиной волны 633 нм. Интенсивность луча, падающего и прошедшего сквозь раствор, определяли по фототоку датчика ФД-24К. Степень разложения органического красителя в результате облучения вычисляли по отношению разности между его начальной концентрацией C_0 и концентрацией C в определенном момент наблюдения к исходной концентрации:

$$\chi = \frac{C_0 - C}{C_0} \cdot 100 \%. \quad (3)$$

Оптическая плотность раствора D равна произведению концентрации красителя C , показателю поглощения k и толщине жидкости d , через которую проходил лазерный луч, т. е. $D = Ckd$. Величины k и d остаются неизменными во время облучения для одной и той же длины волны, поэтому практически степень разложения определяли с учетом выражения (3), используя данные об изменении оптической плотности раствора органического красителя:

$$\chi = \frac{D(t_0) - D(t)}{D(t_0)} \cdot 100 \% \quad (4)$$

Под действием облучения светом ртутной лампы величина D постепенно уменьшалась вследствие деструкции метиленового синего, а степень превращения χ увеличивалась.

В ходе исследований проведено сравнение кинетических кривых фоторазложения красителя для трех образцов: раствора без добавок, раствора с добавлением необработанного порошка Bi_2O_3 , раствора с добавлением порошка Bi_2O_3 после его обработки плазмой высокочастотного разряда.

После плазменной обработки образцов с покрытием из оксида висмута можно было визуально наблюдать, что поверхностный слой меняет окраску с желтого на темно-серый. На рис. 1 показаны спектры диффузного отражения оксида висмута до и после воздействия газового ВЧ разряда.

Оксид висмута отражает излучение длиной волны более 450 нм. После плазменной обработки коэффициент отражения оксида висмута значительно снижается практически во всем диапазоне видимой области спектра, т. е. возрастает поглощение света оксидом висмута. При этом граница области поглощения смещается незначительно в область меньших длин волн.

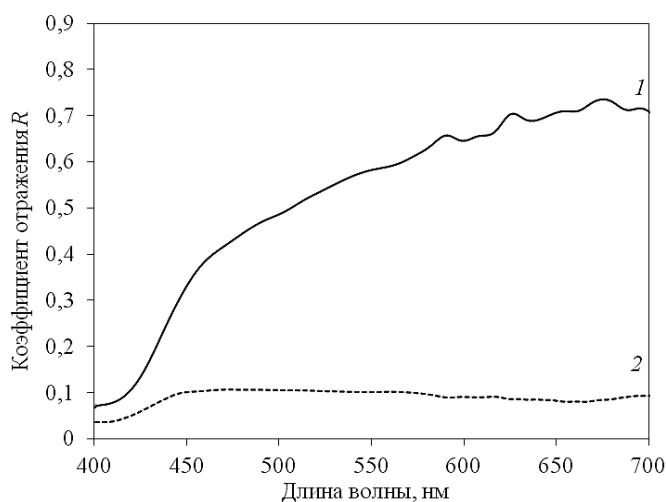


Рис. 1. Спектры диффузного отражения оксида висмута (1) до и (2) после плазменной обработки высокочастотным разрядом

Используя спектральные зависимости коэффициентов диффузного отражения, была определена функция Кубелка-Мунка, а затем рассчитана функция \sqrt{FE} , графики которых представлены на рис. 2. Значения ширины запрещенной зоны E_g оксида висмута были определены по точке пересечения прямой линии, проходящей через прямолинейный участок графиков, с осью абсцисс.

Было установлено, что значение E_g для оксида висмута равно 2,7 эВ, что близко к известным данным [5, 6]. После обработки Bi_2O_3 плазмой высокочастотного разряда происходит уменьшение энергии непрямых межзонных переходов до 2,6 эВ. Это упрощает образование электронно-дырочных пар при облучении оксида Bi_2O_3 светом УФ-видимого диапазона.

Ранее с помощью рентгеновского дифракционного анализа было показано, что фазовый состав слоев из оксида висмута после плазменной обработки не изменяется [10]. Таким образом, структурная перестройка исследуемого оксида висмута, который в исходном состоянии представляет собой $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ с моноклинной сингонией, не происходит.

Исследование кинетики изменения концентрации метиленового синего в присутствии катализаторов – порошка оксида висмута показаны на рис. 3.

Видно, что после плазменной обработки Bi_2O_3 обладает повышенной каталитической активностью – краситель разлагается быстрее.

Влияние продолжительности воздействия плазмы на реакционную способность Bi_2O_3 выражено не так сильно. Тем не менее, степень превращения метиленового синего при облучении повышается с 9 до 11 % при использовании висмутатного катализатора, обработанного плазмой ВЧ разряда в течение 5 (кривая 2) и 20 мин (кривая 3) соответственно, по сравнению с необработанным оксидом висмута (кривая 1).

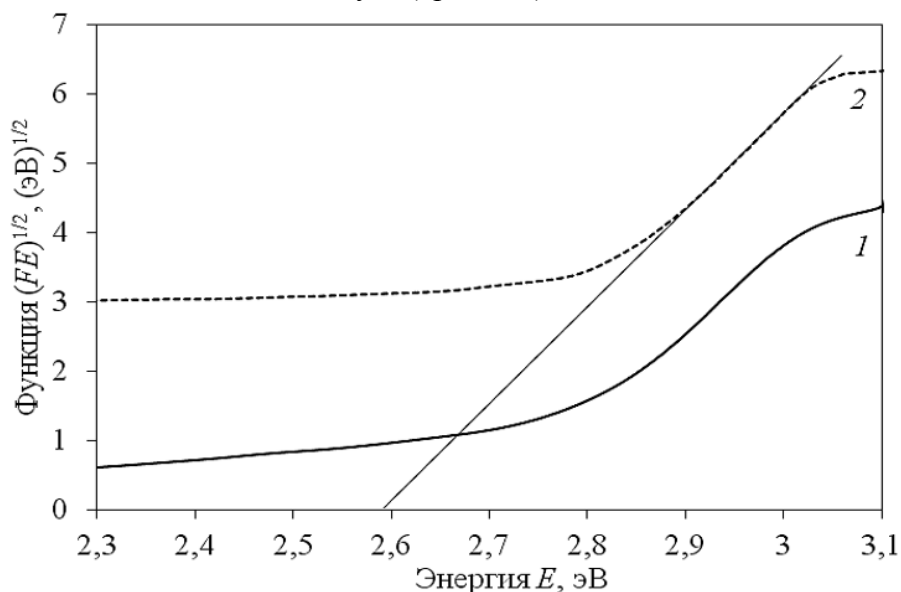


Рис. 2. Зависимость функции \sqrt{FE} от энергии фотона для оксида висмута (1) до и (2) после плазменной обработки высокочастотным разрядом

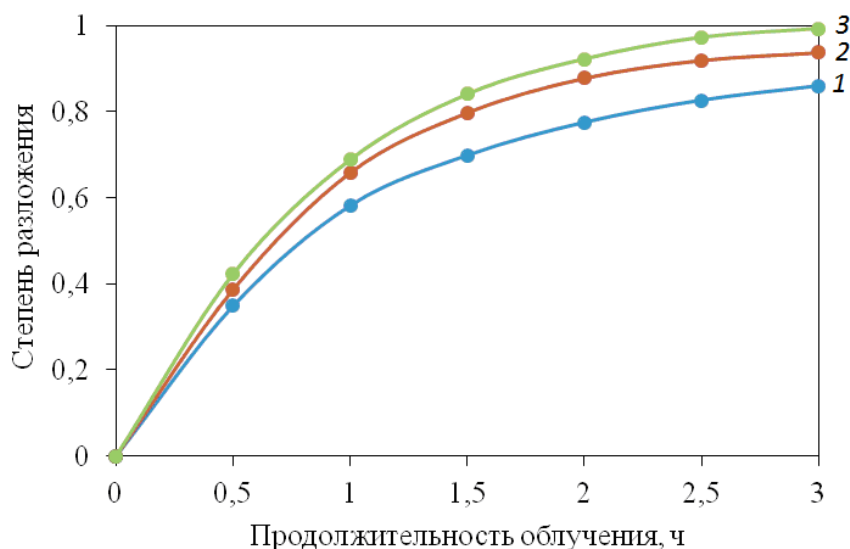


Рис. 3. Степень разложения метиленового синего в зависимости от продолжительности облучения светом ртутной лампы

Плазменная обработка оксида висмута приводит к изменению его оптических свойств - уменьшению коэффициента отражения при увеличении поглощения света, а также уменьшению ширины запрещенной зоны.

При использовании в качестве катализатора оксида висмута, подверженного воздействию плазмой, скорость разложения модельного красителя увеличивается.

В дальнейшем планируется продолжить данные эксперименты по выявлению наиболее подходящих параметров емкостного высокочастотного разряда для облучения оксида висмута и максимальному улучшению его фотокаталитических свойств.

Авторы благодарят Филиппину С. Д., Бусарову У. А. и Галстян Б. В. за помощь в проведении экспериментальных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. Sudrajat H., Sujaridworakun P. Correlation between particle size of Bi₂O₃ nanoparticles and their photocatalytic activity for degradation and mineralization of atrazine // *Journal of Molecular Liquids*. 2017. V. 242. P. 433-440. DOI: 10.1016/j.molliq.2017.07.023.
2. Babel S., Sekartaji P.A., Sudrajat H. TiO₂ as an effective nanocatalyst for photocatalytic degradation of humic acid in water environment // *Journal of Water Supply: Research and Technology-Aqua*. 2017. V. 66. Iss. 1. P. 25–35. DOI: 10.2166/aqua.2016.102.
3. Sudrajat H., Babel S. Comparison and mechanism of photocatalytic activities of NZnO and N-ZrO₂ for the degradation of rhodamine 6G // *Environ. Sci. Pollut. Res.* 23 (2016) 10177-10188.
4. Surface decoration of Bi₂WO₆ superstructures with Bi₂O₃ nanoparticles: an efficient method to improve visible-light-driven photocatalytic activity / H. Wang, S. Li, L. Zhang, Z. Chen, J. Hu, R. Zou, K. Xu, G. Song, H. Zhao, J. Yang // *CrystEngComm*. 2013. V. 15. P. 9011-9019.
5. Cheng L., Kang Y. Selective preparation of Bi₂O₃ visible light-driven photocatalyst by dispersant and calcination // *Journal of Alloys and Compounds*. 2014. V. 585. P. 85-93.
6. Photocatalytic degradation of methyl orange using α-Bi₂O₃ prepared without surfactant / S. Iyyapushpam, S. T. Nishanthi, D. Pathinettam Padiyan // *Journal of Alloys and Compounds*. 2013. V. 563. P. 104-107.
7. Ni/MgO catalyst prepared using atmospheric high-frequency discharge plasma for CO₂ reforming of methane / P. Qin, H. Xu, H. Long, Y. Ran, S. Shang, Y. Yin, X. Dai // *Journal of Natural Gas Chemistry*. 2011. V. 20. Iss. 5. P. 487-492.
8. Combining non-thermal plasma with heterogeneous catalysis in waste gas treatment: a review / J. Van Durme, J. Dewulf, C. Leys, H. Van Langenhove // *Applied Catalysis B: Environmental*. 2008, V. 78. Iss. 3–4. P. 324–333. DOI: 10.1016/j.apcatb. 2007.09.035.
9. 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.
10. Релаксация отражательной способности оксида висмута, подверженного воздействию плазмы ВЧ разряда / Т. В. Бондарева, С. А. Пячин, И. Н. Егоршин, М. С. Круглов, И. А. Астапов, Д. С. Штарев // *Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы XVIII региональной научной конференции (Хабаровск, 10–12 ноября 2020 г.)* Хабаровск : Издательство Тихоокеанского государственного университета, 2020. С. 17–19.

АТОМНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ПРИРОДНЫХ СУБМИКРОННЫХ ФОРМ ЗОЛОТА

Н. А. Леоненко¹, Г. Г. Капустина², Г. И. Мирошниченко²

¹ФГБУН «Хабаровский Федеральный исследовательский центра ДВО РАН Институт горного дела»

²ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»

Хабаровск, e-mail: g.kapustina@mail.ru

В работе рассмотрена возможность использования атомно-силовой микроскопии для изучения природных субмикронных форм золота с месторождений Дальневосточного региона. Исследование методом атомно-силовой микроскопии проведено с помощью Зондовой НаноЛаборатории NTEGRA – многофункционального аналитического измерительного комплекса, объединяющего возможности современного сканирующего зондового микроскопа, оптических методов исследования и тонкого спектрального анализа. Программный Пакет NT-MDT NOVA является программным обеспечением для управления прибором и обработки получаемых с их помощью данных. Исследование полученных образцов проведено полуконтактным методом атомно-силовой микроскопии. Выявлен кластерный характер поверхности субмикронных золотин, структурные особенности золота из хвостов обогащения техногенных россыпей. Такие исследования необходимы для дальнейшего решения минералогических задач.

Прогресс в нанотехнологии стимулировался развитием экспериментальных методов исследований, наиболее информативными из которых являются методы сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ). Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) – первый из семейства зондовых микроскопов – изобретен в 1981 году швейцарскими учеными Гердом Биннигом и Генрихом Рорером. В своих работах они показали, что это весьма эффективный способ исследования поверхности с пространственным разрешением вплоть до атомарного. Настоящее признание данная методика получила после визуализации атомарной структуры ряда материалов и, в частности, реконструированной поверхности кремния. В 1986 году Г. Биннигу и Г. Рореу присуждена Нобелевская премия по физике. Вслед за туннельным микроскопом, в течение короткого времени созданы атомно-силовой микроскоп (АСМ), магнитно-силовой микроскоп (МСМ), электронно-силовой микроскоп (ЭСМ) и многие другие. Сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ) – один из современных методов исследования морфологии и локальных свойств поверхности твердого тела с высоким пространственным разрешением. Атомно-силовой микроскоп (АСМ) изобретен в 1986 году Гердом Биннигом, Кэловином Куэйтом и Кристофером Гербером. В основе работы АСМ лежит силовое взаимодействие между зондом и поверхностью, для регистрации которого используются специальные зондовые датчики, представляющие собой упругую консоль с острым зондом на конце. Сила, действующая на зонд со стороны поверхности, приводит к изгибу консоли. Регистрируя величину изгиба, можно контролировать силу взаимодействия зонда с поверхностью. В общем случае данная сила имеет как нормальную к поверхности, так и латеральную, то есть лежащую в плоскости поверхности образца составляющие [1, 2].

Цель работы – определение специфических возможностей метода атомно-силовой микроскопии в исследовании морфологии природных форм золота, выявление структурных особенностей природного субмикронного золота из хвостов обогащения техногенных россыпей для дальнейшего решения минералогических задач.

Общей характерной особенностью различных техногенных россыпей Дальнего Востока является накопление в отвалах золота таких морфологических форм, которые не учитываются недропользователями. В техногенных образованиях, наряду с мелкими частицами металла (менее 0,25 мм), присутствуют пластинчатые, чешуйчатые, дендритовые индивиды со следами скольжения, зачастую крупных размеров – до 1,0–2,0 мм, а также сростки золота с другими минералами. Отличительным свойством мелкого, тонкого и пластинчатого золота является его плавучесть. Вместе с тем погруженное в минеральную матрицу, то есть экранированное ею от окружающих минералов такое золото практически не извлекаемо, и оно относится к «упорным» формам золота [3, 4].

В работе применена атомно-силовая микроскопия (АСМ). Исследования на атомно-силовом микроскопе проведены с помощью Зондовой НаноЛаборатории NTEGRA фирмы NT-MDT, г. Зеленоград – многофункционального аналитического измерительного комплекса. Существует три режима работы атомно-силового микроскопа: контактный (англ. contact mode), «полуконтактный» (англ. semi-contact mode или tapping mode), бесконтактный (англ. non-contact mode). Принцип работы атомно-силового микроскопа основан на регистрации силового взаимодействия между поверхностью исследуемого образца и зондом (рис. 1).

Зонд представляет собой наноразмерное острие, располагающееся на конце упругой консоли (кантилевер). На зонд со стороны поверхности действует сила, которая приводит к изгибу кантилевера. Изменение топологии поверхности образца под зондом приводит к изменению силы, действующей на зонд, а значит, и к изменению величины изгиба кантилевера.

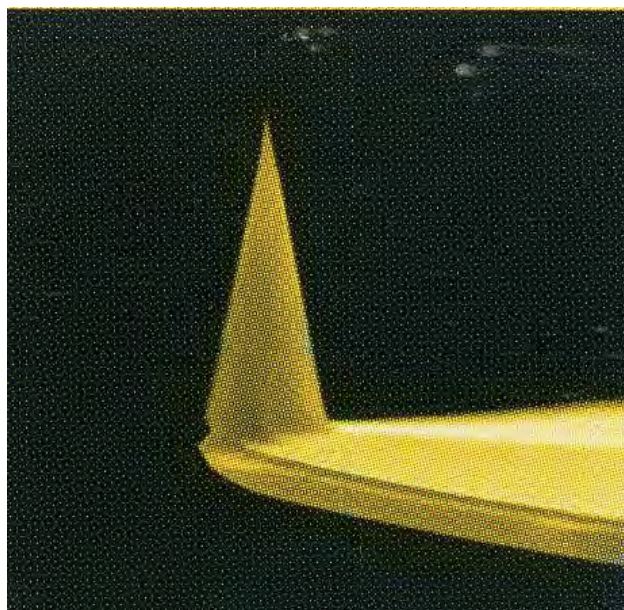
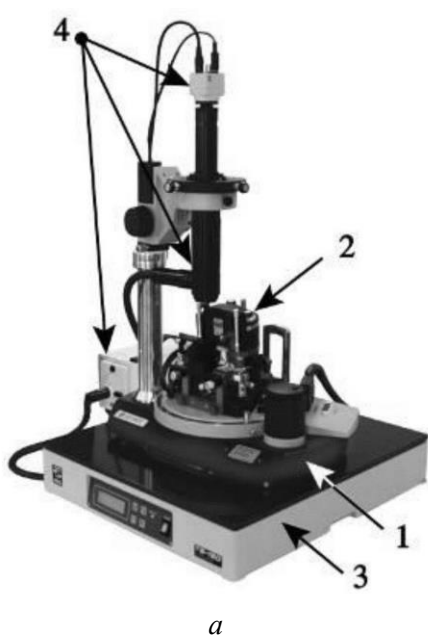


Рис. 1. а – основные блоки зондовой нанолаборатории: 1 – базовый блок; 2 – измерительная головка; 3 – система виброизоляции; 4 – система видеонаблюдения; б – зонд с кантилевером для полуконтактного метода исследования

Полуконтактным методом АСМ получены сканограммы, изучены рельефы поверхностей, измерены отдельные структуры и положения гетерограниц [5, 6]. Дополнительно на АСМ использован метод определения локальной жесткости образцов. Для интерпретации сканируемых изображений применялся пакет программы NT-MDT NOVA. Это программное обеспечение служит для управления прибором и обработки получаемых с их помощью данных. Дополнительно на АСМ использован метод модуляции сил образцов. Объем выборки кантилевера для всех образцов составлял – Amount of sampling – 65536 точек. На рис. 2–4 представлены сканограммы изображений золотин с различных месторождений Дальневосточного региона.

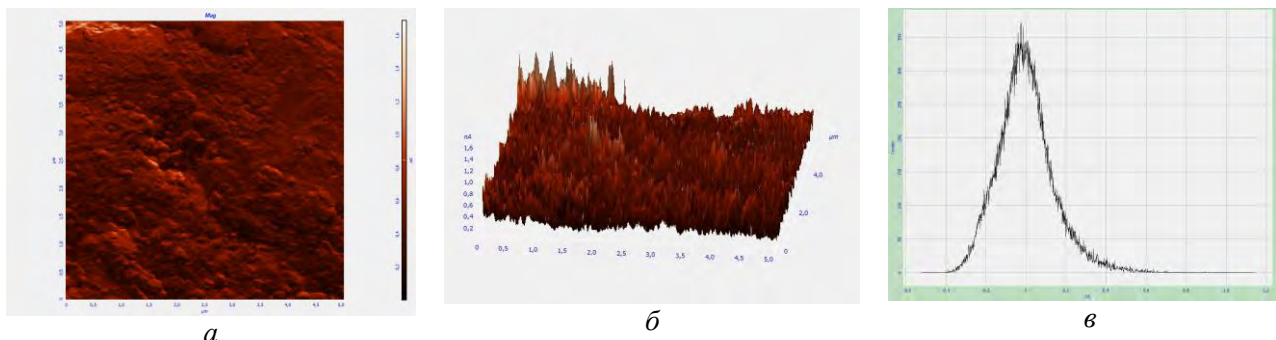


Рис. 2. Золотина с россыпи Соловьевского прииска Амурской области:
а – изображение рельефа поверхности методом локальной жесткости: модуляции сил;
б – 3D-изображение рельефа поверхности;
в – гистограмма средней шероховатости золотины, показатель Average Roughness, составляет Sa 0,1085 nA, Entropy 8,53217 по данным статистического анализа программы NOVA

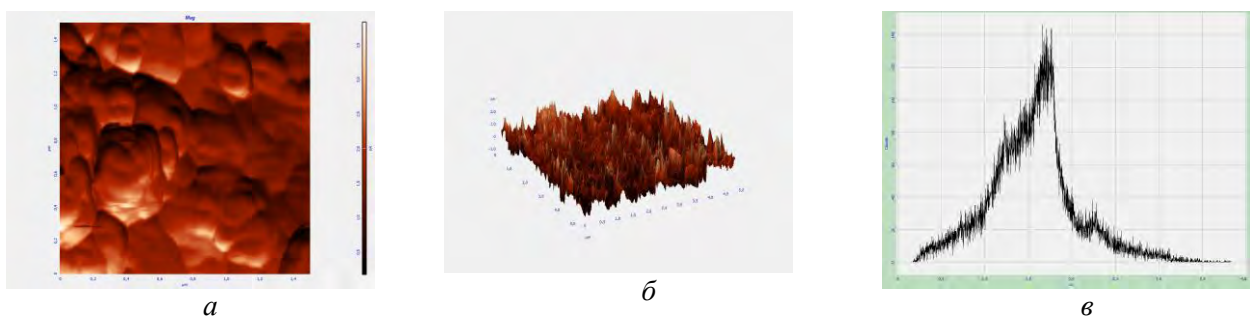


Рис. 3. Золотина из россыпного месторождения Магаданской области, р. Феникс:
а – изображение рельефа поверхности методом локальной жесткости: модуляции сил;
б – 3D-изображение рельефа поверхности;
в – гистограмма средней шероховатости золотины, показатель Average Roughness, составляет Sa 0,376348 nA, Entropy 10,3018 по данным статистического анализа программы NOVA

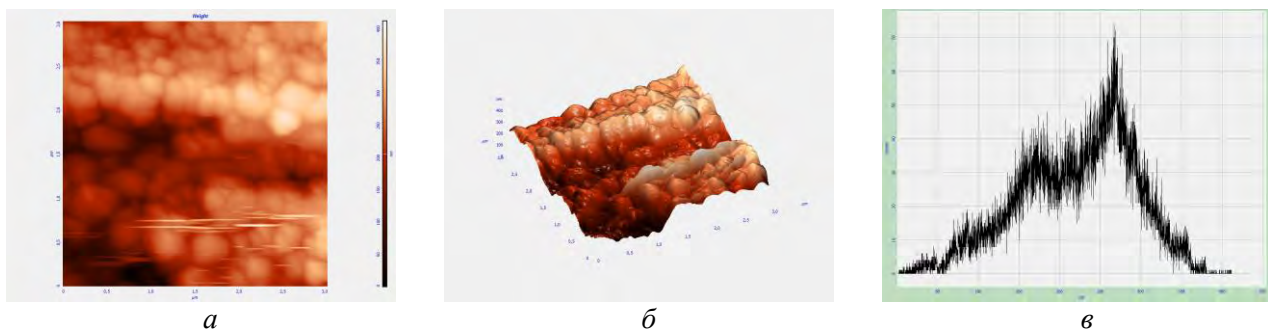


Рис. 4. Золотина с месторождения Херпучи Нижнего Приамурья:
а – изображение рельефа поверхности; *б* – 3D-изображение рельефа поверхности;
в – гистограмма средней шероховатости золотины, показатель Average Roughness, составляет Sa 58,0631 nm

В таблице приведены характеристики статистического анализа золотин, полученные программой NOVA.

Установлено, что морфологические свойства субмикронного золота одинаковые – тонкопластинчатое (плавучее золото). Выявлено кластеритовое строение тонкопластинчатого и ультрамелкого золота. При исследовании поверхностей тонкопластинчатого золота мето-

дом АСМ выявлено кластеритовое строение и определена среднеарифметическая шероховатость золотин по всей поверхности сканирования минералогических образцов: показатель Average Roughness, Sa. Данный показатель вполне можно соотнести с размерами кластеров, но на наноуровне – кластеры, зоны роста различны. Топографический анализ изображений выявил совершенно разные по размеру сферические и эллипсоидальные образования [7], причем золото каждого географического объекта имеет определенный специфический рельеф и структурные особенности поверхности, присущие данному географическому району, а размеры кластеров колеблются от 10 до 400 нм. Показатель энтропии, свидетельствует о степени упорядочения структурных особенностей золотин.

Статистический анализ поверхностей золотин программой NOVA

Название показателя	Рис. 1	Рис. 2	Рис. 3
Amount of sampling	65536	65536	65536
Max	1,14297 nA	3,81805 nA	411,384 nm
Min	-0,524944 nA	0,177016 nA	0 nm
Peak-to-peak, Sy	1,66792 nA	3,64104 nA	411,384 nm
Ten point height, Sz	0,310388 nA	1,98975 nA	206,479 nm
Average	0,00014978 nA	1,55308 nA	221,472 nm
Average Roughness, Sa	0,1085 nA	0,376348 nA	58,0631 nm
Second moment	0,143466	1,63224	232,317
Root Mean Square, Sq	0,143466 nA	0,502135 nA	70,1555 nm
Surface skewness, Ssk	0,748408	0,313379	-0,391678
Coefficient of kurtosis, Ska	1,92254	0,8835	-0,39418
Entropy	8,53217	10,3018	11,2259
Redundance	-5,02676	-3,65208	-0,293186

Значимость данных исследований заключается в разработке новых технологических подходов к извлечению субмикронных ценных компонентов, в частности, золота из техногенного минеральных сырья.

ЛИТЕРАТУРА

1. Миронов В. Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии : Учебное пособие для студентов старших курсов высших учебных заведений / ИФМ РАН. Н. Новгород, 2004. 110 с.
2. URL: <https://www.ntmdt-si.ru/resources/spm-principles/atomic-force-microscopy> (дата обращения: 01.07.2022)
3. Наноминералогия. Ультра- и микродисперсное состояние минерального вещества / Под ред. Н. П. Юшкина, А. М. Асхабова, В. И. Ракина. СПб.: Наука, 2005. 581 с.
4. Создание нетрадиционных технологий извлечения упорных форм золота из минерального сырья техногенных месторождений / В. С. Литвинцев, Т. С. Банщикова, Н. А. Леоненко, Л. Н. Шокина // Обогащение руд. 2009. № 3. С. 11-14.
5. Разработка научных основ извлечения субмикронных форм золота из техногенного сырья / Н. А. Леоненко, Е. А. Ванина, Е. М. Веселова, Г. Г. Капустина // Экологическая химия, Санкт-Петербург. 2013. 22(3). С. 162-168.
6. Атомно-силовая микроскопия при исследовании лазерной агломерации / Д. М. Смотровая, Г. И. Мирошниченко, Г. Г. Капустина, Н. А. Леоненко // ТОГУ-Старт: фундаментальные и прикладные исследования молодых. Материалы региональной научно-практической конференции. Хабаровск, 2021. С. 146-152.
7. Шарыпов Р. Э., Капустина Г. Г., Леоненко Н. А. Изучение процесса воздействия лазерного излучения на минеральные наномасштабные среды // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование. XVII региональная научная конференция, посвященная 150-летию открытия периодической таблицы химических элементов Д. И. Менделеева. 2019. С. 174-177.

ДИНАМИКА НАНОЧАСТИЦ В ЖИДКОФАЗНОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ НЕЛИНЕЙНОЙ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ВЯЗКОСТИ

А. И. Ливашвили, П. В. Виноградова, Г. В. Костина

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

Исследуется динамика концентрации наночастиц в наножидкости, которая подвергается воздействию светового поля с равномерным профилем интенсивности. При этом мы учитываем нелинейную зависимость коэффициента вязкости от концентрации. Получено точное решение обобщенного уравнения Бюргера в терминах бегущей волны. Получено соотношение, связывающее ширину фронта волны с ее параметрами.

Стремительный прогресс в области нанотехнологий предоставил исследователям широкий арсенал новых материалов с уникальными оптическими и физико-химическими свойствами для применений в биологии и медицине [1–4]. К числу таких материалов относят коллоидные суспензии или, как сейчас их принято называть, наножидкости (при исследовании оптических свойств наножидкости принимается, что длина световой волны, которой ее облучают, много меньше размеров частиц), широко применяются в различных сферах нанотехнологии.

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.

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

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. Геометрия задачи показана на рис. 1.

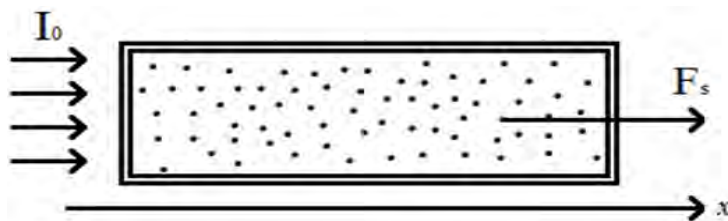


Рис. 1. Геометрия задачи

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

ная зависимость от концентрации наночастиц.

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

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V(C) \frac{\partial C}{\partial x} - U(C) \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (2)$$

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

Как известно, для полного описания процессов переноса в рассматриваемой системе уравнение (2) необходимо дополнить уравнением Навье - Стокса (для определения скорости V). В этом случае поставленная задача решалась бы численно, как это сделано в работе [15]. Мы используем другой подход, позволяющий найти аналитическое решение задачи. Для этого представим конвективную скорость в виде

$$V(C) = \frac{\eta(C)}{\rho(C)l}. \quad (3)$$

где $\eta(C)$ – коэффициент динамической вязкости наножидкости, $\rho(C)$ – ее плотность, l – характерная длина для системы, значение которой определится позже.

Зависимость коэффициента вязкости от концентрации будем считать нелинейной [5]

$$\eta(C) = \eta_0(1 + \gamma C + \alpha C^2), \quad (4)$$

где γ, α – постоянные коэффициенты и $\gamma, \alpha > 0$, $\alpha \gg \gamma$.

Зависимость концентрации от плотности будем считать несущественной: $\rho(C) \approx \rho_0$. Последнее слагаемое в (2) связано с наличием потока, вызванного электрострикцией частиц. Далее, $U(C) = \mu F_s$, 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:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\eta(C)}{l\rho} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{F_s}{6\pi\eta(C)a_0} \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (5)$$

Далее будем использовать приближение $(\eta(C))^{-1} \approx \eta_0^{-1}$. После перехода к безразмерным переменным и параметризации, получим:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{\eta_0}{\rho_0 D} (1 + \gamma C + \alpha C^2) \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{a_0}{\sqrt{b}} \frac{\partial C}{\partial y}, \quad (6)$$

где $\tau = \frac{F_s}{6\pi\eta_0 a_0^2} t$, $b = \frac{6\pi\eta_0 a_0^2}{F_s} D$, $y = \frac{x}{\sqrt{b}}$, $l \approx \sqrt{b}$.

Численные оценки дают: $\frac{\eta_0}{\rho_0 D} \gg \frac{a_0}{\sqrt{b}}$. Это дает возможность переписать уравнение (6) в виде

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{\eta_0}{\rho_0 D} \left[\alpha \left(C + \frac{\alpha}{2\gamma} \right)^2 + 1 \right] \frac{\partial C}{\partial y}. \quad (8)$$

Дальнейшее введение функции $W(y, \tau) = C + \frac{\alpha}{2\gamma}$ и обозначения $Q = \frac{\eta_0}{\rho_0 D}$, позволяет записать уравнение (8) в виде

$$\frac{\partial W}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} - Q(\alpha W^2 + 1) \frac{\partial W}{\partial y}. \quad (9)$$

Введем новые независимые переменные: $\tau = \tau$, $z = y - Q\tau$. Тогда получим:

$$\frac{\partial W}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} - Q\alpha W^2 \frac{\partial W}{\partial z}. \quad (10)$$

Последнее уравнение представляет собой обобщенное уравнение Бюргера. Если мы введем новую автомодельную переменную: $q = z - \lambda\tau$, то получим:

$$\frac{d^2W}{dq^2} + \lambda \frac{dW}{dq} - Q\alpha W^2 \frac{\partial W}{\partial z} = 0. \quad (11)$$

Его решение можно представить в виде [7]

$$W(q) = \left[A \exp(2\lambda q) + \frac{Q\alpha}{3\lambda} \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (12)$$

где A и λ – произвольные постоянные.

Профиль волнового решения в виде бегущей «ступеньки» (кинка) показан на рис.2

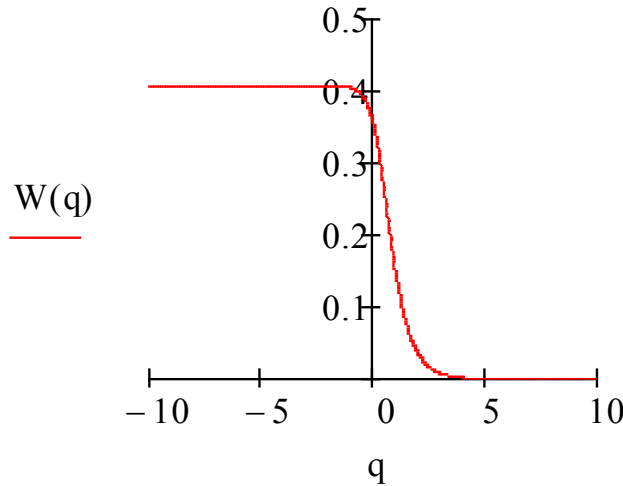


Рис.2. Профиль фронта бегущей волны (в условных единицах)

Из решения (12) следуют граничные условия:

$$W(q \rightarrow +\infty) = 0, \quad W(q \rightarrow -\infty) = W_0. \quad (13)$$

Заметим, что по смыслу, значение W_0 пропорционально величине концентрации наночастиц вдали от волнового фронта. Кроме того

$$\frac{dW}{dq}(q \rightarrow \pm\infty) = 0. \quad (14)$$

Определим параметр λ . Для этого вернемся к уравнению (11) и проинтегрируем его:

$$\frac{dW}{dq} + \lambda W - \frac{Q\alpha}{3} W^3 = const. \quad (15)$$

Из первого условия (13) и (14) следует, что $const = 0$. Далее, используя второе условие (13) и (14), находим:

$$\lambda = \frac{2Q\alpha W_0^2}{3}. \quad (16)$$

С учетом этого результата, решение (12) можно записать в виде

$$W(q) = \left[A \exp\left(\frac{4Q\alpha W_0^2}{3} q\right) + \frac{Q\alpha}{3\lambda} \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (17)$$

Ширину фронта можно оценить непосредственно из решения:

$$\delta q \sim \frac{3}{4Q\alpha W_0^2}. \quad (18)$$

Рассмотрим в уравнении (6) случай линейной зависимости ($\gamma=0$). В этом случае получим уравнение Бюргера:

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \tilde{W}}{\partial y^2} - Q\gamma \tilde{W} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial y}, \quad (19)$$

где $\bar{W} = 1/\gamma + C$. Решение уравнения (19) может быть представлено в виде бегущей волны в форме аналогичной «ступеньки» [8]. Оценим ширину фронта волны в этом случае, исходя из того, что волна образуется в результате взаимной компенсации эффектов нелинейности и диссипации. Тогда нелинейный и диссипативный члены должны быть одного порядка, то есть

$$Q\gamma \frac{\bar{W}_0^2}{2} \sim \frac{d\bar{W}}{dy}. \quad (20)$$

Обозначив W_0 в качестве амплитуды волны, а Δ – ее характерную ширину, из соотношения (20) получим: $Q\gamma \frac{\bar{W}_0^2}{2} \sim \frac{\bar{W}_0}{\Delta}$. Отсюда следует искомая оценка:

$$\Delta \sim \frac{2}{Q\gamma W_0}. \quad (21)$$

Сравнивая равенства (18) и (21), видим, что как в нелинейном, так и в линейном случаях ширина фронта волны тем больше, чем меньше безразмерный параметр Q . Полагая равенство амплитуд в обоих случаях, рассмотрим отношение

$$\frac{\delta q}{\Delta} \sim \frac{3}{8} \frac{\gamma}{\alpha} \frac{1}{W_0}. \quad (22)$$

Следуя работам [5, 6], положим в (22) $\gamma = 2$ и $\alpha = 100$. Тогда из (22) следует оценка:

$$\frac{\delta q}{\Delta} \sim 4 \cdot 10^{-3} \frac{1}{W_0}. \quad (23)$$

Отсюда заключаем: в зависимости от амплитудного значения волны W_0 , которое пропорционально концентрации наночастиц, могут выполняться неравенства: либо $\delta q < \Delta$, или $\delta q > \Delta$.

Подведем итоги. Учет квадратичной зависимости вязкости среды от концентрации не меняет вид профиля бегущей волны. Отличие от линейного случая проявляется в выражениях для ширины волнового фронта (см. формулы (17) и (20)). Заметим, что вклад в балансное уравнение (2) стрикционного потока, как показывают вычисления, невелик.

Авторы отдают себе отчет в том, что полученное решение в виде бегущих волн является частным решением. Дальнейшие наши усилия будут направлены на поиск аналитического решения задачи Коши и использование численных методов для исследуемого уравнения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Черепанов И. Н., Попов В. А. Экспериментальное исследование влияния концентрации на параметры наножидкости // Вестник Пермского университета. 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. сб. науч. тр. / под общей редакцией В. М. Самсонова, Н. Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т. 2013. Вып.5. С. 116-119.
3. Smorodin V.L. Traveling-wave convection in colloids stratified by gravity / V. L. Smorodin, L. N. Cherepanov, V. I. Muzykova, M. I. Shliomis // *Phys. Rev. E*. 2011. Vol. 84. P. 026305.
4. Рудяк В. Я., Минаков А. В. Современные проблемы микро и нанофлюидики // 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. // Вестник Пермского университета. Серия Физика. 2019. Т. 43. Выпуск 1. С. 26-31.
6. Полянин А. Д., Зайцев В. Ф. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики: Точные решения. М.: Физматлит, 2002. 432 с.
7. Рыскин Н. М., Трубецков Д. И. Нелинейные волны (Сер. Современная теория колебаний и волн) // М.: Наука. Физматлит. 2000. 272 с.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ БРОМИДА ДИИЗОПРОПИЛАММОНИЯ И НИТРАТА ЦЕЗИЯ

А. В. Павлов, Е. В. Стукова

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
Благовещенск, e-mail: katal75@yandex.ru

Исследованы температурные зависимости диэлектрической проницаемости в композите $(\text{CsNO}_3)_{0,5}/(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{0,5}$. Выявлено, что добавка частиц нитрата цезия к бромиду диизопропиламмония приводит к возникновению дополнительного максимума диэлектрической проницаемости при охлаждении на низких частотах. Фазовые переходы в композите размываются и смещаются в сторону низких температур по сравнению с исходными объемными компонентами композита.

В настоящее время сегнетоэлектрики находят широкое применение в различных областях электронной техники. Композиты на основе сегнетоэлектриков позволяют получить материалы с новыми диэлектрическими свойствами и управляемой температурой фазового перехода, за счет изменения объемных долей исходных материалов. Существует ряд новых и недостаточно изученных сегнетоэлектриков, исследование свойств которых вызывает широкий интерес.

Для нитрата цезия CsNO_3 ранее [1] было обнаружено наличие структурного фазового перехода первого рода с температурой перехода $T_k = 154$ °С. Однако ранние исследования нитрата цезия практически не выявили наличия петли сегнетоэлектрического гистерезиса, но обнаружили наличие спонтанной поляризации [1].

Нитрат цезия CsNO_3 при комнатной температуре обладает тригональной симметрией. Кристаллическая структура низкотемпературной фазы ранее была определена как полярная тригональная со спонтанной поляризацией $P_s \approx 1 - 2$ мкКл/см². Выше температуры Кюри $T_k = 154$ °С CsNO_3 переходит в кубическую структуру [1, 2].

Органический сегнетоэлектрик DIPAB при комнатной температуре принадлежит к полярной точечной группе и имеет относительно высокую точку плавления. Для DIPAB спонтанная поляризация составляет $P_s \approx 23$ мкКл/см², температура фазового перехода $T_k = 153$ °С [3]. Сегнетоэлектрическая моноклинная фаза $P2_1$ при температуре выше T_k переходит в неполярную фазу $P2_1/m$. Сегнетоэлектрический переход в $\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr}$ относится к переходам первого рода [4].

В данной работе исследуется влияние нитрата цезия на температуру фазового перехода и диэлектрические свойства бромид диизопропиламмония $\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr}$ (DIPAB) в составе композита $(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{0,5}/(\text{CsNO}_3)_{0,5}$.

Для получения образцов использовались порошки DIPAB и CsNO_3 с частицами размером 5-10 мкм. Порошки смешивались в равных объемных долях и тщательно перемешивались, затем из них прессовались образцы в виде пластин 6 x 10 мм и толщиной 3 мм при давлении около $6 \cdot 10^3$ кг/см².

Для измерения диэлектрической проницаемости образцов использовался цифровой измеритель импеданса E7-25 с частотным диапазоном 25 Гц – 10^6 Гц. В качестве электродов применялась серебряная паста. Измерения проводились в режиме нагрев – охлаждение со

скоростью ~ 2 градуса в минуту в температурном интервале от 25 °С до 160 °С, охватывающем фазовые переходы в CsNO_3 и $\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr}$. Температура фиксировалась электронным термометром Center 340 с хромель-алюмелевой термопарой.

Перед началом измерений образец композита в течение 20 минут прогревался для удаления адсорбированной воды при температуре 140 °С.

Исследование поверхности композита осуществлялось с помощью растрового электронного микроскопа TM1000.

Исходя из результатов исследования поверхности методом растровой электронной микроскопии (РЭМ), при смешивании компонентов DIPAB и CsNO_3 не образовалось твердого раствора. В композите $(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{0,5}/(\text{CsNO}_3)_{0,5}$ частицы нитрата цезия группируются и образуют ансамбли (рис. 1).

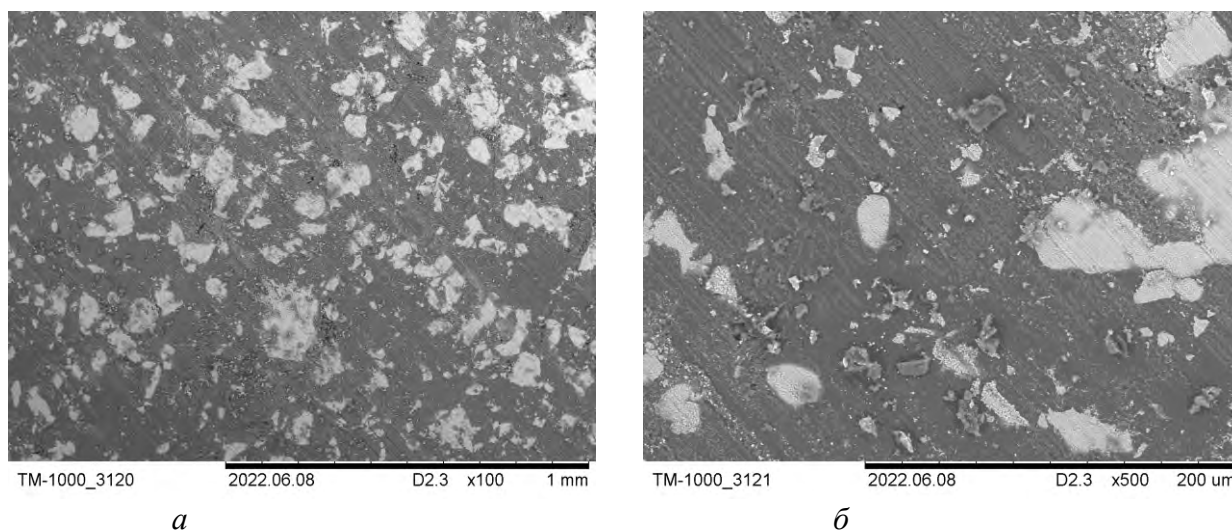


Рис. 1. РЭМ-изображение поверхности композита $(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{0,5}/(\text{CsNO}_3)_{0,5}$ при увеличении $\times 100$ (А) и $\times 500$ (Б)

На следующем этапе были исследованы диэлектрические свойства композитного образца. На рис. 2 представлены графики температурной зависимости диэлектрической проницаемости образца $(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{0,5}/(\text{CsNO}_3)_{0,5}$ на разных частотах.

Как видно из рис. 2 с повышением частоты исследования происходит снижение абсолютных показателей диэлектрической проницаемости композита бромид диизопропиламмония и нитрата цезия.

Для всех частот, на которых были выполнены измерения, в процессе нагрева на температурных зависимостях ϵ' наблюдается размытый максимум диэлектрической проницаемости в температурном интервале от 150 °С до 154 °С.

При охлаждении композитного образца максимум наблюдается при температуре от 149 °С до 150 °С для всех наблюдаемых частот. Максимум, соответствующий фазовому переходу размывается и смещается в сторону низких температур по сравнению с объемными нитратом цезия и бромидом диизопропиламмония, у которых температура перехода составляет 154 °С и 153 °С соответственно.

Помимо этого, в процессе охлаждения образца композита наблюдается дополнительный размытый максимум диэлектрической проницаемости при температуре 138 °С, пик которого наиболее выражен на малой частоте. Появление дополнительного максимума диэлектрической проницаемости при охлаждении характерно и для других композитов на основе бромид диизопропиламмония, как, например, было показано в [5].

Появление дополнительной аномалии диэлектрической проницаемости объясняется наличием диполь-дипольного взаимодействия между компонентами сегнетоэлектрического композита.

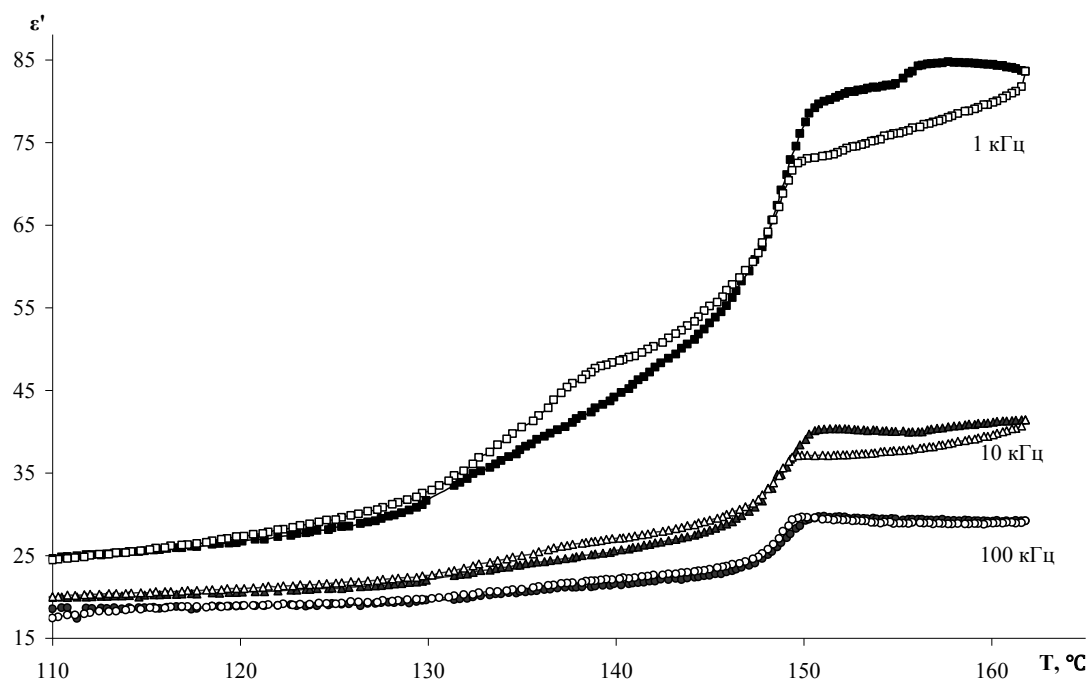


Рис. 2. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости $(\text{C}_6\text{H}_{16}\text{NBr})_{0.5}/(\text{CsNO}_3)_{0.5}$ на разных частотах при нагреве (темные маркеры) и при охлаждении (светлые маркеры)

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Takagi Y., Kimura S. and Takeuchi Y. Structural Phase Transition of CsNO_3 Crystal. Spontaneous Polarization // *Ferroelectrics*. 2003. V. 284. P. 129-135.
2. Диэлектрические свойства сегнетоэлектрического композита нитрат калия – нитрат цезия / С. В. Барышников, А. Ю. Милинский, Е. В. Стукова, А. А. Зеева // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2022. Т. 15. № 1. С. 7-15.
3. Diisopropylammonium bromide is a high-temperature molecular ferroelectric crystal / D.-W. Fu, H.-L. Cai, Y. Liu [et al.] // *Science*. 2013. V. 339. No. 6118. P. 425-428.
4. Барышников С. В., Стукова Е. В., Меределина Т. А. Сегнетоэлектрические свойства композитов на основе бромид диизопропиламмония и титаната свинца // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2019. Т. 127. № 4. С. 17-24.
5. Calorimetric and dielectric studies of ferroelectric composites based on diisopropylammonium bromide and lead titanate / S. V. Baryshnikov, E. V. Stukova, T. A. Meredelina, I. V. Egorova, A. V. Sachnenko // *Ferroelectrics*. 2020. V. 567, № 1. P. 67-73.

ИЗУЧЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ХЛОРИДА ПАЛЛАДИЯ В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ МЕТОДОМ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Л. А. Трофимова¹, Д. Ю. Кузьмина²

¹ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный медицинский университет»
Хабаровск, e-mail: lianatrofimova@yandex.ru

²МБОУ СОШ, с. Восточное

В работе представлены результаты исследования свойств системы поливиниловый спирт-хлорид палладия методом абсорбционной спектроскопии в диапазоне 160–600 нм.

В настоящее время комплексные соединения палладия, включая хлоридные, вызывают интерес в связи с необходимостью создания новых противоопухолевых препаратов, которые могли бы заменить имеющиеся дорогие и довольно токсичные, содержащие соединения платины [1]. Уже обнаружена радиозащитная активность у катионно-анионных комплексов палладия $(\text{АН}_n)_m[\text{PdCl}_4]$, где А – биологически активные амины: морфолин, N-метилморфолин и 2-метиламино-1-фенил-1-пропанол [2].

Данная ситуация способствует всестороннему изучению особенностей палладиевых соединений [3]. Наряду с химическими исследуются и оптические свойства хлорида палладия, находящегося в различных средах [4].

Абсорбционная спектроскопия, изучающая спектры поглощения электромагнитного излучения атомами и молекулами веществ в различных агрегатных состояниях, позволяет исследовать кинетику протекающих реакций и описывать некоторые процессы, такие как комплексообразование [5].

Целью настоящей работы являлось исследование с помощью метода абсорбционной спектроскопии изменений, происходящих в пленках системы «поливиниловый спирт (ПВС) – хлорид палладия», вызванных воздействием на образцы ультрафиолетового света и высокой температуры и оказывающих влияние на их оптические свойства.

Предметом изучения являлись электронные спектры поглощения (ЭСП) системы ПВС- PdCl_2 в диапазоне 160–600 нм.

Объектами исследования служили пленки, изготовленные из полимерно-солевых композиций: 1 % и 10 % водные растворы поливинилового спирта марки 16/1 с добавлением некоторого количества соли (12,5 мг, 25 мг, 50 мг, 75 мг, 100 мг, 200 мг на 10 мл раствора), которое подбиралось таким образом, наряду с толщиной образца, чтобы ослабление излучения максимально осуществлялось именно за счет поглощения.

ЭСП пленок в диапазоне 200–600 нм были получены на спектрофотометре СФ-2000, в котором источником видимого и инфракрасного излучения служит галогенная лампа, а ультрафиолетового излучения – дейтериевая. Световой сигнал в электрический преобразует многоэлементный приемник (ПЗС-линейка типа TCD 1304 AP).

Образцы имели толщину ~ 10 мкм и были получены из композиций на основе 10 % водного раствора ПВС.

Измерение спектров поглощения пленок в диапазоне 160–250 нм проводилось на установке для абсорбционных исследований в области дальнего (вакуумного) ультрафио-

лета с проточной водородной лампой открытого типа в качестве источника излучения и фотоэлектронным умножителем ФЭУ-106 в качестве приемника излучения.

Толщина исследуемых образцов, которые изготавливались из композиций на основе 1 % водного раствора поливинилового спирта, составляла в среднем ~ 2 мкм.

Облучение пленок ультрафиолетовым светом (УФО) проводилось в течение 15 минут и в течение 30 минут интегральным излучением водородной лампы и ртутной лампы высокого давления ДРТ-400. Чтобы проследить динамику процессов, протекающих в образцах, спектры измерялись непосредственно после воздействия, через 10 минут, через 4 суток и через 3 месяца.

Прогрев образцов осуществлялся в течение пяти минут при температуре 363К (90 °С). Измерение спектров производилось сразу после прогрева и затем еще дважды: через 6 дней и через 3 месяца.

ЭСП пленок изучаемой системы получали относительно пленок ПВС, которые имели такую же толщину и подвергались тем же воздействиям. Данный метод способствовал выявлению полос, за поглощение в которых ответственны структуры, содержащиеся в образце, либо образующиеся, но не являющиеся частью полимера.

Первые предположения об особенностях поглощающих центров можно сделать, анализируя «концентрационную зависимость», то есть, рассматривая спектры пленок, изготовленных из растворов, отличающихся массой соли, приходящейся на определенный объем (в данном случае на 10 мл).

Электронные спектры поглощения исследуемых образцов состоят из нескольких областей.

Максимумы большинства из них испытывают длинноволновый сдвиг (от 162 до 164 нм, от 169 до 172 нм, от 222 до 228 нм, от 310 до 342 нм) по мере увеличения содержания в пленках хлорида палладия. Такое поведение указывает на то, что данные области являются интегральными, то есть состоящими из нескольких полос, принадлежащих разным поглощающим структурам. По мере увеличения концентрации соли в образцах, возрастает и количество центров, поглощение которых приходится на более длинные волны.

Изменение количественного соотношения поглощающих структур разного вида способствует перераспределению оптической плотности, что, в свою очередь, и приводит к сдвигу максимумов.

Для указанных областей невозможно без математической обработки указать точное количество полос, входящих в состав каждой из них.

Исключение составляет участок 175–215 нм. В спектрах образцов с большим содержанием хлорида палладия (100 мг на 10 мл раствора) в данном диапазоне находится широкая неструктурированная полоса с максимумом 190 нм. По мере уменьшения концентрации соли в пленках (50 мг) в их спектрах на рассматриваемом участке длин волн проявляются в явном виде полосы с максимумами 178 нм, 188 нм и 200 нм.

В спектре образца с наименьшей концентрацией соли ПВС-PdCl₂(12,5 мг) уже различимы полосы с максимумами 178 нм, 188 нм, 196 нм, 205 нм. Полоса с $\lambda_{\max} = 200$ нм в образцах ПВС-PdCl₂(50 мг), по всей видимости, является суммарной полосой с $\lambda_{\max} = 196$ нм и $\lambda_{\max} = 205$ нм, а у образцов ПВС-PdCl₂(100 мг) полоса с $\lambda_{\max} = 190$ нм – интегральной всех четырех.

Область с $\lambda_{\max} = 222 \div 228$ нм состоит, по крайней мере, из полос с максимумами 212, 226 и 246 нм, которые отчетливо проявились в спектре системы ПВС-PdCl₂(100 мг).

Присутствие в спектрах области с постоянным максимумом 282 нм объясняется наличием поглощающего центра одного вида.

Широкая асимметричная полоса с максимумом 444 нм, занимающая диапазон 400–600 нм, ярко проявляется при больших концентрациях соли в образцах. При малых она практически отсутствует.

Изменения, протекающие в пленках под влиянием различных воздействий (УФО или прогрев) лучше всего прослеживаются по разностным кривым спектров поглощения, измеренным после оказания воздействия на образцы и до него.

Облучение ультрафиолетовым светом пленок ПВС(10%)-PdCl₂(12,5 мг) в течение 15 минут привело к уменьшению оптической плотности в диапазоне от 200 до 320 нм (полосы с $\lambda_{\max} = 222$ нм, $\lambda_{\max} = 282$ нм и с $\lambda_{\max} = 310$ нм). Но при этом увеличилось поглощение в области от 320 до 390 нм (асимметричная полоса с максимумом 334 нм).

Каких-либо заметных изменений в спектрах не произошло ни через 10 минут, ни через 4 суток. По истечении 3 месяцев, в течение которых образцы хранились в темноте при комнатной температуре, был зафиксирован рост поглощения по всему исследуемому диапазону. Отчетливо проявились полосы с максимумами 212, 266, 310 нм. Первая полоса отсутствовала в явном виде в исходных спектрах данной пленки, но уже была в исходном СП пленки с большим содержанием хлорида палладия.

Полоса с максимумом 266 нм также отсутствовала в исходном спектре. Она либо «маскировалась» из-за соседнего присутствия более сильных полос, либо воздействие ультрафиолетового излучения привело к образованию центров, поглощающих в этой области.

Проявление данной полосы спустя 3 месяца после облучения образцов, говорит о том, что процессы, вызванные УФО, продолжают длительное время.

УФО пленки ПВС(10%)-PdCl₂(25 мг) способствовало уменьшению поглощения в диапазоне от 210 до 312 нм (это полосы с $\lambda_{\max} = 226$ нм, $\lambda_{\max} = 282$ нм) и увеличению в области длин волн меньших 210 нм и в диапазоне от 312 до 420 нм (полоса с $\lambda_{\max} = 360$ нм).

Уже через 4 суток стало видно, что началось восстановление центров, ответственных за поглощение в диапазоне от 210 до 312 нм. В дальнейшем рост полосы с максимумом 226 нм прекратился, а рост оптической плотности в других полосах продолжился.

Такое же поведение наблюдается и у образцов ПВС(10%)-PdCl₂(50 мг).

У пленок с большим содержанием соли палладия (75, 100 и 200 мг) в области длин волн больших 300 нм происходит то же самое, что и у образцов с малым содержанием хлорида палладия. УФО в течение 30 минут образца ПВС(1%)-PdCl₂(50 мг) привело к общему увеличению оптической плотности на участке 163-218 нм. Растут преимущественно полосы, уже имеющиеся в исходном спектре, но испытывая bathochromный сдвиг максимумов на 3÷4 нм. Как и у толстых пленок, воздействие ультрафиолетового излучения вызвало уменьшение количества центров, отвечающих за поглощение в полосе с $\lambda_{\max} = 222$ нм.

Прогрев образцов во всех случаях сначала способствовал увеличению поглощения в диапазоне 300–600 нм, затем оптическая плотность уменьшалась, а спустя длительное время (3 месяца) опять фиксировался рост поглощения.

В диапазоне от 200 до 300 нм у пленок ПВС(10%)-PdCl₂(12,5 мг) наблюдалось уменьшение оптической плотности в области с максимумом 222 нм. У пленок ПВС(10%)-PdCl₂(25 мг) происходило увеличение оптической плотности по всему исследуемому диапазону.

Воздействие на толстые образцы ультрафиолетового света с последующим прогревом привело к увеличению поглощения в диапазоне от 200 до 600 нм.

Аналогичные воздействия на тонкие пленки ПВС(1%)-PdCl₂(12,5 мг) вызвали протекание процессов, которые в течение 5 суток привели к такому изменению спектра поглощения, что он стал почти «зеркальным» предыдущему.

У образца ПВС(1%)-PdCl₂(50 мг) оптическая плотность возросла на участке от 160 до 165 нм и в диапазоне от 180 до 250 нм. Исключение составила полоса с максимумом 170 нм, поглощение в которой уменьшилось.

Основываясь на результатах эксперимента и литературных данных [6], можно предположить, что в пленках системы, состоящей из поливинилового спирта и хлорида палладия, содержатся плоские комплексы палладия вида [Pd(H₂O)_{4-n}Cl_n]²⁻ⁿ (где n целые числа от 0 до 4), которые отвечают за большинство полос поглощения.

В связи с тем, что замена лиганда сильного поля на лиганд слабого поля (то есть молекулы воды на ион хлора) в координационной сфере иона-комплексобразователя приводит к уменьшению энергии соответствующего перехода с переносом заряда, то за длинноволновые полосы в каждой области поглощения отвечают комплексы с преимущественным содержанием ионов хлора. Возможно, за широкую полосу, соответствующую d-d переходам на участке 400–600 нм отвечает комплекс [PdCl₄]²⁻.

Проведенные исследования позволяют расширить знания о свойствах хлорида палладия, помещенного в полимерную матрицу. Результаты показали, что изучаемые образцы в различной мере являются свето- и термочувствительными. Процессы, инициируемые УФО и прогревом, протекают в них в течение длительного времени (несколько месяцев).

ЛИТЕРАТУРА

1. Денисов М. С., Глушков В. А. Биологически активные комплексы палладия(II) и N-гетероциклических ароматических лигандов (обзор литературы) // Вестник Пермского университета. Серия «Химия». 2018. Т. 8. Вып. 4. С. 388-411.
2. Сушков Н. И., Харламова С. И. Карбоксилатные комплексы палладия с морфолином и N-метилморфолином // Тезисы докладов I Конференции молодых ученых по общей и неорганической химии (г. Москва, 19-21 апреля 2011 г.). М.: Изд-во ИОНХ РАН, 2011. С. 76-77.
3. Спектрально-люминесцентные свойства циклометаллированных комплексов Pd(II) на основе метилового эфира цинхофена / Р. И. Байчуринов, И. Т. Дуланова, Ал. М. Пузык, М. В. Пузык // Оптика и спектроскопия. 2021. Т. 129. Вып. 11. С. 1387-1392.
4. Потехин В. В. Палладийсодержащие аквакомплексные системы в реакциях каталитического окисления неорганических и органических веществ. Кинетика и механизм реакций полимеров : автореф. дис. д-ра хим. наук : 02.00.01. С-Петербург, 2009. 37 с.
5. Методы оптической спектроскопии : Методическое пособие к задачам спецпрактикума кафедры химии нефти и органического катализа / О. А. Федорова [и др.]. М.: Изд-во МГУ им. М. В. Ломоносова, 2015. 117 с.
6. Аналитическая химия платиновых металлов / С. И. Гинзбург [и др.]. М.: Наука, 1972. 616 с.

ХАОТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ЗАРЯЖЕННЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В ГЕТЕРОКОНТАКТАХ

А. В. Филимонов^{1,2}, В. Б. Бондаренко²

¹ФГБУВОиН «Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж. И. Алферова» РАН
Санкт-Петербург, e-mail: filimonov@rphf.spbstu.ru

²ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

В работе исследуется высокотемпературная структура хаотического потенциала в гетероконтактах III-нитридов, обусловленного электростатическим полем заряженных дислокаций. С учетом пространственной дисперсии диэлектрического отклика двумерного электронного газа определена амплитуда хаотического потенциала в плоскости контакта. Показана зависимость его свойств от параметров системы. В частности, при наличии невырожденного двумерного электронного газа в гетероконтактах III-нитридов и плотности дислокаций 10^{10} см^{-2} (и более), величина амплитуды хаотического потенциала превышает значение тепловой энергии.

Введение

Гетероконтакты на основе нитридов элементов третьей группы (Al, Ga, In) являются на настоящий момент и в перспективе основой для синтеза твердотельных приборов силовой СВЧ электроники [1]. Обладая целым рядом очевидных преимуществ перед структурами на основе других соединений $A_{III}B_V$, указанные системы в силу технологических особенностей синтеза содержат ряд несовершенств, влияющих, например, на параметры полевых транзисторов с двумерным электронным газом высокой подвижности (HEMT) [2].

Выявленные при этом изменения параметров приборов, возможно, связаны с исходной дефектностью материалов и формируемых гетерограниц. Известно, что из-за рассогласования решеток III-нитридов и используемых подложек исходно возникают прорастающие дислокации несоответствия, которые во многих случаях оказываются электрически заряженными [3]. Рассеяние же электронов в канале HEMT-транзистора на заряженных дислокациях приводит к известному снижению их подвижности. Кроме того, влияние этого рассеяния может многократно возрасти на предельных значениях передаваемой мощности из-за снижения экранирующей способности двумерного электронного газа при высоких температурах, когда данная электронная подсистема перестает быть вырожденной. Отсутствие в этих условиях усреднения неоднородного поля заряженных дислокаций означает наличие флуктуаций напряженности и хаотического потенциала (ХП) в плоскости локализации двумерного электронного газа. При этом воздействие, обусловленное неоднородным электрическим полем системы линейно распределенных зарядов, ввиду конечности по величине плотности поверхностных состояний носит фактически самосогласованный характер. Наличие ХП влечет за собой появление «хвостов» плотности электронных состояний и частичной локализации носителей в проводящем канале HEMT-транзистора.

Распределение поля заряженных дислокаций

Для определенности рассмотрим In-содержащую структуру InAlN/GaN [4], сохраняющую свою стабильность при рекордно высоких температурах вплоть до 1000 °С. Дислокации несоответствия с поверхностной концентрацией N_{disl} будем представлять в виде нормально ориентированных к плоскости контакта линейных дефектов. При некоррелированной локализации указанных протяженных дефектов их распределение по количеству является пуас-

соновским с параметром $\langle N \rangle = N_{\text{disl}}S$, определяющим среднее количество этих дефектов на участке контакта площадью S . Поскольку каналный слой формируется на основе нелегированного (или компенсированного) GaN, объемный заряд в приконтактной области изгиба зон формируется в основном заряженными дислокациями. При больших изгибах зон данные протяженные дефекты в пределах области пространственного заряда можно считать равномерно заряженными с некоторой линейной плотностью максимальной величины λ . Если в гетероконтакте имеется делокализованный поверхностный заряд, то при высокой плотности поверхностных состояний D_s (более $10^{14} \text{см}^{-2} \text{эВ}^{-1}$) для определения параметров хаотического поля имеется возможность воспользоваться методом электростатических изображений [4]. Поле произвольно выбранной дислокации будем определять в цилиндрической системе координат, в которой ρ – радиальная координата, определяющая расстояние от дислокации в плоскости контакта. Несложный расчет дает величину напряженности поля заряженной дислокации в виде

$$F_i(\rho) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + L_0^2}} \right). \quad (1)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость среды, в которой находится i -ая дислокация, L_0 – ширина области пространственного заряда. При условиях сильного вырождения двумерного электронного газа дальнейшее изложение может быть связано с анализом выражения (1) с учетом характера распределения дислокаций. Среднее значение (1) на площадке радиуса R определяется из выражения

$$\langle F_i \rangle (R) = \frac{4\lambda}{\varepsilon R^2} \left(R - \sqrt{R^2 + L_0^2} + L_0 \right). \quad (2)$$

Характерную величину неоднородностей напряженности поверхностного поля можно оценить

$$\delta F(R) = \frac{4\lambda}{\varepsilon R} \sqrt{\pi N_{\text{disl}}} \left(R - \sqrt{R^2 + L_0^2} + L_0 \right). \quad (3)$$

Полученная функция (3) является монотонно убывающей и достигает своего максимального значения при $R \ll L_0$. Вычисляя точную верхнюю грань этого выражения (в пределе $R \rightarrow 0$), получаем амплитуду хаотического поля:

$$\delta F = \frac{4\lambda \sqrt{\pi N_{\text{disl}}}}{\varepsilon}. \quad (4)$$

Учитывая теперь линейную зависимость поверхностного заряда от напряженности поля $F = 4\pi\sigma/\varepsilon$, можно связать величину δU с параметрами системы:

$$\delta U = \frac{\lambda}{eD_s} \cdot \sqrt{\frac{N_{\text{disl}}}{\pi}}. \quad (5)$$

Потенциальная энергия поверхностного электрона в поле заряженной дислокации без реакции среды имеет вид

$$V_i(\rho) = e\lambda \cdot \ln \frac{\sqrt{\rho^2 + L_0^2} + \rho}{\rho}. \quad (6)$$

В области высоких температур (т.е. при классической статистике двумерного электронного газа) функция диэлектрического отклика имеет вид [10]:

$$\varepsilon(q) = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \cdot \left(1 + \frac{q_s(q)}{q} \right). \quad (7)$$

Здесь ε_1 и ε_2 - диэлектрические проницаемости контактирующих полупроводников, $q_s(q)$ - параметр экранирования в двумерной электронной системе. В случае больших изгибов зон для большинства гармоник справедливо также соотношение $q \ll q_s$, при котором функцию диэлектрического отклика (7) можно приближенно представить в виде [5]:

$$\varepsilon(q) \approx \frac{2\pi e^2 n_s}{kT \cdot q}. \quad (8)$$

Потенциальную энергию электрона в плоскости поверхности с учетом экранирования можно представить в виде:

$$U_i(\rho) = \frac{\lambda kT}{2\pi e n_s} \cdot \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + L_0^2}} \right). \quad (9)$$

Функциональная зависимость от радиальной координаты в (9) совпадает с аналогичной зависимостью в (1), что дает возможность повторить уже ранее использованный алгоритм вычислений уже непосредственно для определения амплитуды хаотического потенциала:

$$\delta U = \frac{\lambda kT}{e n_s} \cdot \sqrt{\frac{N_{disl}}{\pi}}. \quad (10)$$

Поскольку при параболическом законе дисперсии плотность поверхностных состояний исходно является константой, в присутствии хаотического потенциала плотность электронных состояний $D(E)$ имеет вид [6]:

$$D(E) = D_s \int_{-\infty}^E p(U) dU, \quad (11)$$

где $p(U)$ – плотность распределения хаотического потенциала.

Концентрация двумерного электронного газа в контакте определяется интегрированием по всем заполненным состояниям:

$$n_s = \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) f(E) dE. \quad (12)$$

Здесь для высокотемпературного предела следует выбрать больцмановский закон распределения $f(E) \approx \exp[(\mu - E)/kT]$, где μ - химический потенциал, отсчитываемый от дна невозмущенной поверхностной зоны электронных состояний. С учетом вида возмущенной плотности имеем:

$$n_s = D_s kT \cdot \exp \left[\frac{\mu}{kT} + \frac{1}{2} \left(\frac{\delta U}{kT} \right)^2 \right]. \quad (14)$$

Таким образом, для определения величины амплитуды хаотического потенциала получаем:

$$\delta U = \frac{\lambda}{e D_s} \cdot \sqrt{\frac{N_{disl}}{\pi}} \cdot \exp \left[-\frac{\mu}{kT} - \frac{1}{2} \left(\frac{\delta U}{kT} \right)^2 \right]. \quad (15)$$

Результаты расчета величин δU для типичных значений параметров системы представлены на рис. 1.

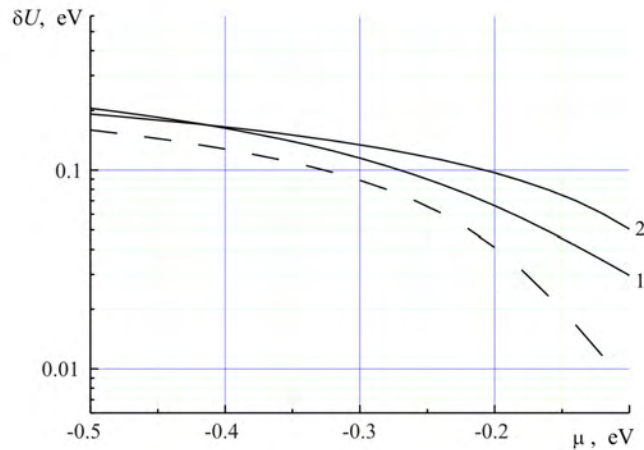


Рис. 1. Зависимости амплитуды хаотического потенциала заряженных дислокаций в гетероконтакте III-нитридов от величины химического потенциала для двух значений температуры, К: 600 (кривые 1 и пунктиры) и 1200 (2); $N_{\text{disl}} = 10^{10} \text{ см}^{-2}$ (1, 2) и 10^8 см^{-2} (пунктиры); $\lambda = 0.01$ СГСЭ, $D_s \approx 10^{14} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$

Выводы

При оценках значений δU для параметров хаотического потенциала в гетероконтактах на основе III-нитридов примем величину эффективной массы электрона в поверхностной зоне $m^* \approx 0.2m$ (m - масса покоя электрона) и соответствующее значение невозмущенной плотности поверхностных состояний $D_s \approx 10^{14} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$. Если при этом полагать, что концентрация дислокаций у границы раздела составляет порядка 10^{10} см^{-2} , несущих максимальный заряд на единицу длины около 0.01 СГСЭ, то при наличии невырожденного двумерного электронного газа в широком диапазоне отрицательных значений химического (при подаче запирающего напряжения на затвор транзистора – электрохимического) потенциала величины δU превышают значения тепловой энергии kT . В режимах работы НЕМТ-транзистора близких к отсечке амплитуда хаотического потенциала может составлять более 100 мэВ даже при существенно меньшей концентрации дислокаций (штриховая кривая на рис. 1). Соответствующие величины концентрации двумерного электронного газа при этом уменьшаются от исходных (около 10^{13} см^{-2}) на один-два порядка (рис. 2).

ЛИТЕРАТУРА

1. Сверхвысокочастотные полевые транзисторы на основе нитридов III группы / С. Б. Александров, Д. А. Баранов, А. П. Кайдаш [и др.] // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. № 10. С. 1275-1279.
2. Взаимосвязь надежности AlGaIn/GaN транзисторов с характером организации наноматериала / В. В. Емцев, Е. Е. Заварин, Г. А. Оганесян [и др.] // Письма в Журнал технической физики. 2016. Т. 42. № 13. С. 80-86.
3. Бондаренко В. Б., Давыдов С. Н., Филимонов А. В. Естественные неоднородности потенциала на поверхности полупроводника при равновесном распределении примеси // Физика и техника полупроводников. 2010. Т. 44. № 1. С. 44-47.
4. Status of the emerging InAlN/GaN power HEMT technology / F. Medjdoub, J. F. Carlin, C. Gaquière, N. Grandjean, E. Kohn // The Open Electrical and Electronic Engineering Journal. 2008 V. 2. P. 1-7.
5. Chaotic potential on the degenerated semiconductor surface / V. B. Bondarenko, S. N. Davydov, B. Nacke, A. V. Filimonov // Key Engineering Materials. 2019. Vol. 806. Pp. 17-23.
6. Бондаренко В. Б., Филимонов А. В., Kumar R. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 47. № 1. С. 12-14.

**СТРУКТУРА АМОРФНОГО СПЛАВА $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$
В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РЕЖИМОВ ПОЛУЧЕНИЯ****А. М. Фролов, Г. С. Крайнова, В. В. Ткачев, В. С. Плотников, С. В. Должиков, А. Ю. Ралин**ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет»
Владивосток, e-mail: froloff5@yandex.ru

В работе представлены результаты исследования электронно-микроскопических изображений структуры аморфного металлического сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$ в зависимости от технологических режимов закалки из жидкого состояния. Показано, что технология спиннингования при вариации параметров закалки позволяет получить аморфные состояния с разной степенью разупорядочения. Анализ структуры сплава в нанодиапазоне размеров неоднородностей позволил выделить три поддиапазона по интенсивности, вкладу в общую структуру, изменчивости: $\lambda_1 - (2,0-0,28)$ нм; $\lambda_2 - (0,28-0,2)$ нм; $\lambda_3 - (0,2-0,09)$ нм, длинно-, средне- и коротковолновый, соответственно.

В настоящее время аморфные металлические сплавы (АМС) представляют научный интерес при изучении физических свойств разупорядоченных систем. Магнитомягкие АМС, полученные быстрой закалкой из расплава, обладают высокой магнитной проницаемостью, что позволяет с успехом использовать их для изготовления магнитных головок, магнитных экранов, вторичных источников питания [1–4]. Эти сплавы обладают высокой прочностью и коррозионной стойкостью, что важно при их эксплуатации в агрессивных средах.

Экспериментально обнаружено [5–7], что АМС обладают скорее гетерогенной, чем гомогенной структурой, которая изменяется от наномасштаба до микромасштаба и это обстоятельство определяет большинство физико-химических и механических свойств этих материалов. Научные результаты свидетельствуют о наличии в аморфных металлических сплавах различного состава ближнего атомного порядка ($\sim 0,5$ нм), среднего атомного порядка ($\sim 2-3$ нм), локальных структурных неоднородностей мезоуровня ($\sim 200-3000$ нм) и технологических неоднородностей (до 200 мкм) в зависимости от условий получения (одно или двухвалковое спиннингование, скорость охлаждения, давление инертного газа в камере, давление газа, выдувающего расплав из тигля, температура расплав и т. д.) [8–10].

Цель данной работы – проследить изменение структуры лент, полученных быстрой закалкой из расплава (метод спиннингования) в диапазоне структурных неоднородностей (0,09–5,4) нм.

В работе исследуются ленты на основе кобальта (со средним составом $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$ ат. %), которые были получены методом одновалкового спиннингования в атмосфере аргона на медное колесо в установке Melt Spinner SC. В таблице представлены параметры получения для четырех представленных образцов.

Идентификация атомного упорядочения методом рентгеновской дифракции с использованием дифрактометра Bruker D8 Advance показала, что все сплавы находятся в рентгеноаморфном состоянии. На дифрактограммах присутствует одиночный диффузный пик на углах $2\theta - (57 \div 59)^\circ$ с периодом неоднородностей (0,1938 \div 0,2063) нм и отсутствуют кристаллические пики. Электронно-микроскопические изображения структуры быстрозакаленного сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$, полученные с использованием просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ), и являлись объектами для детального изучения.

Технологические и геометрические параметры спиннингованных лент

Образец	T (C)	h (мм)	ν (Гц) / ν (м/с)	P1 (мбар)	P2 (мбар)	t (мкм)	H (мм)
A	1420±2	0,15	50/31,4±0,1	400±5	600±5	21±2,5	10
B	1430±2	0,15	50/31,4±0,1	50±5	350±5	19,3±0,5	10
C	1430±2	0,15	60/37,7±0,1	60±5	400±5	16,1±1	10
D	1430±2	0,15	35/22,0±0,1	50±5	200±5	21,1±4,5	10

Здесь T – температура расплава, h – зазор, ν – частота вращения, ν / ν – линейная скорость вращения закалочного колеса, P1 – давлений в камере, P2 – давлений в тигле, t – толщина аморфной ленты, H – ширина ленты.

На рис. 1 приведено ПЭМ-изображение, характерное для всех исследуемых образцов. Наблюдаемая структура в литературе [11, 12] получила название «соль-перец» и в данном случае демонстрирует неоднородности с периодом (длиной волны) $\lambda \sim 0,2$ нм, рис. 1, а, б. Детальный анализ изображения позволяет визуализировать объединения коротковолновых периодичностей в более крупные неоднородности с периодом $\sim 0,7$ нм (рис. 1, б, стрелка 1) и $\sim 1,3$ нм и более (рис. 1, б, стрелка 2).

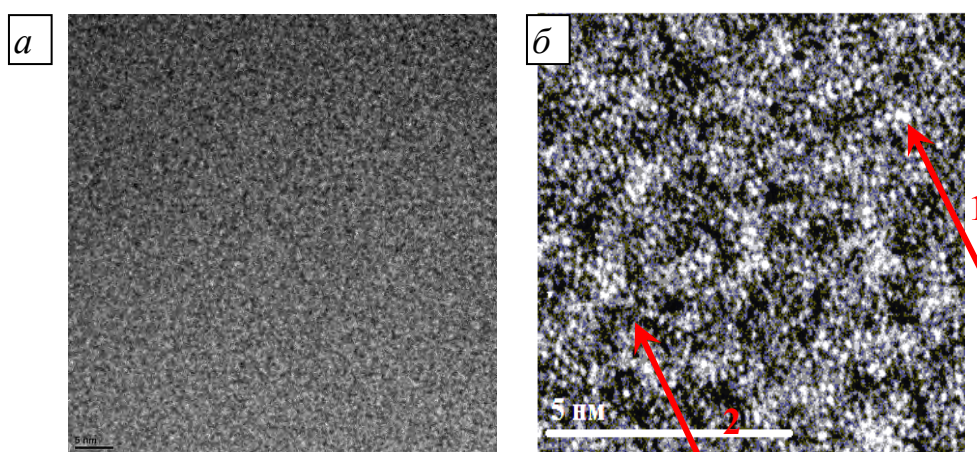


Рис. 1. Электронно-микроскопическое изображение структуры аморфного сплава состава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$ для образца № 3: а) общий вид; б) тонкая структура

Визуальный анализ изображений подобного рода весьма затруднителен, он также не позволяет оценить анизотропию структуры. Поэтому необходимо перейти к их спектральному представлению.

Спектры Фурье и рассчитанные по ним ИЧХ и ИПХ для четырех выбранных образцов приведены на рис. 2.

Спектры Фурье (ДКФ), рис. 2, полученные с электронно-микроскопических изображений, для всех образцов имеют вид диффузного гало, ограниченного в обратном пространстве размером 5 нм^{-1} ($\sim 0,2$ нм) и центрального пятна.

В центральной части спектра сосредоточены неоднородности больших размеров.

Яркие рефлексы на выделенном кольце для ДКФ всех образцов, говорят о том, что в структуре присутствует локальная анизотропия в определенном направлении. В целом можно говорить о спектре размеров как длинноволнового, так и более мелких диапазонов неоднородностей, вплоть до периодичностей $\sim 0,09$ нм.

Необходимо отметить, что для образцов № 11 и № 12, рис. 2, в, г, характерно наличие более мелких структурных образований.

Также в этих двух образцах широко представлены неоднородности средневолнового диапазона. Анализ ИЧХ, представленных в виде гистограмм на рис. 2, а-г, выявляет нетипичное поведение данной характеристики для образца № 12, рис. 2, г.

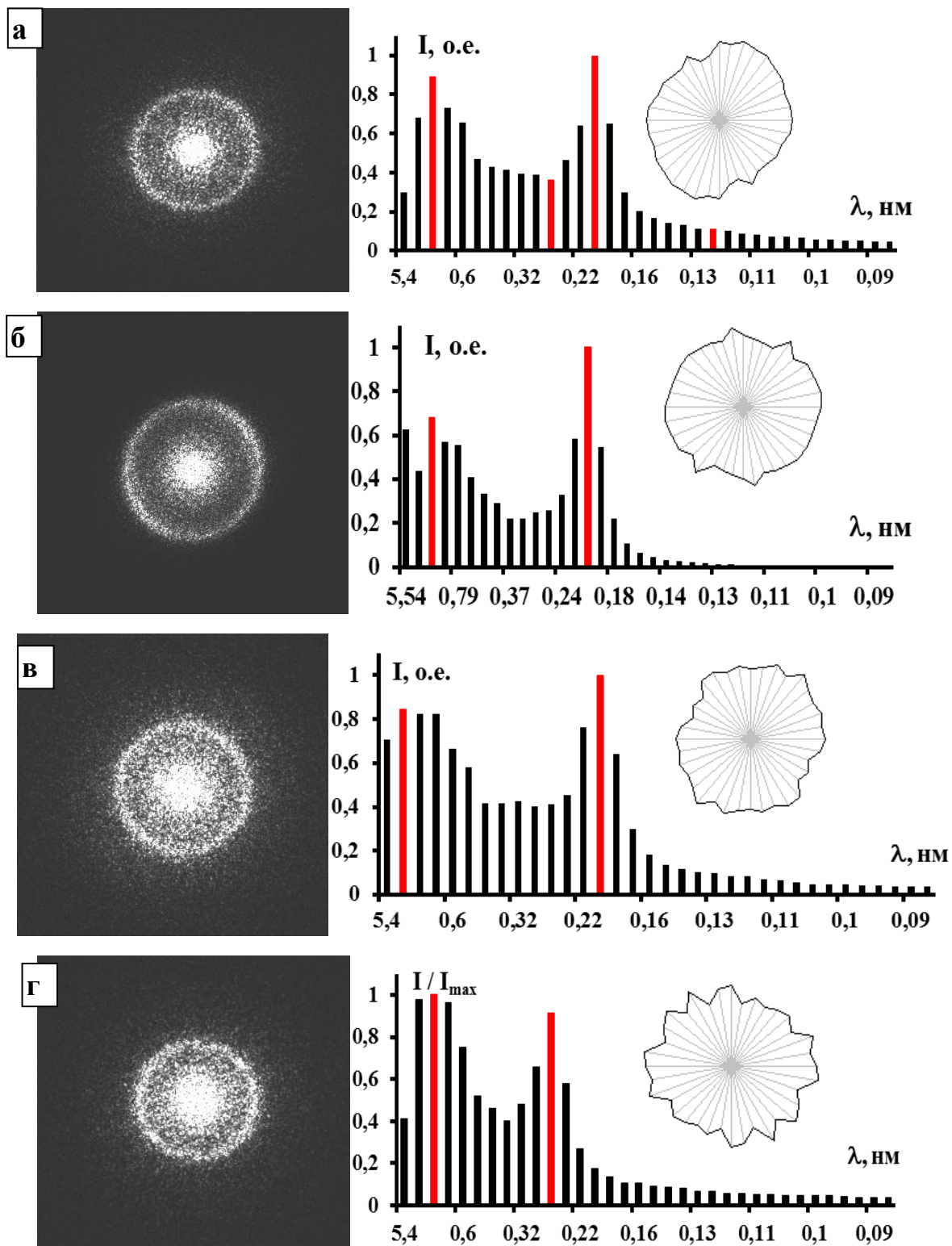


Рис. 2. ДКФ, ИЧХ и ИПХ от электронно-микроскопических изображений структуры аморфного сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$: а) образец А, б) образец В, в) образец С, г) образец D

Здесь мода, соответствующая $\lambda \sim 0,2$ нм, не является глобальной, а мода, определяющая границу диффузного гало на ДКФ, имеет длину волны неоднородностей $\lambda \sim 0,26$ нм.

Несколько перераспределена и интенсивность других мод по сравнению с ИЧХ структур представленных образцов.

Так, для образца № 3, рис. 2, а, присутствуют две выделенные моды (на рис. 2 выделены

цветом) – $\lambda \sim 0,2$ нм (интенсивность 100 %) и $\lambda \sim 1,08$ нм (интенсивность 89 %). Для образца № 9, рис. 2, б, – мода $\lambda \sim 0,2$ нм (интенсивность 100 %) и $\lambda \sim 1,08$ нм (интенсивность 68 %). ИЧХ образца № 11, рис. 2, в, содержит $\lambda \sim 0,2$ нм (интенсивность 100 %), $\lambda \sim 1,8$ нм (интенсивность 84 %), а также локальный максимум с $\lambda \sim 0,32$ нм (интенсивность 43 %).

В структуре образца № 12, рис. 2, з, произошло перераспределение интенсивностей структурных неоднородностей.

Здесь присутствуют выделенные моды – $\lambda \sim 0,26$ нм (интенсивность 87 %), $\lambda \sim 1,08$ нм (интенсивность 100 %) и $\lambda \sim 1,8$ нм (интенсивность ~ 100 %), то есть, длинноволновые неоднородности представляют значительную часть структуры образца.

Наблюдается особенность и в поведении образца № 9, рис. 2, б. На ИЧХ данного образца практически отсутствуют моды с размерами неоднородностей менее 0,12 нм.

Можно считать, что такие периодичности вносят незначительный вклад в образование структуры данного образца.

Его структура в основном представлена неоднородностями (0,12–5,4) нм.

Образование структуры в диапазоне масштабов (0,09–5,4) нм можно рассматривать в рамках фрагментарной модели [13]. Она предполагает, что аморфный сплав представляет собой «мозаику» из фрагментов тех структур, образование которых возможно согласно элементному составу вещества.

Возможна и фрактальная организация мозаик подобного рода [14]. В случае структуры образцов № А, № В, № С и № D, рис. 2, в указанном диапазоне размеров элементы мозаики отличаются при переходе от одного режима спиннингования к другому.

В работе [15] при исследовании ПЭМ-изображений сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$ при различных параметрах спиннингования установлено: плотность упорядоченных атомных кластеров с размером 5 нм изменяется от 4% до 8%, при изменении линейной скорости v медного колеса от 38 м/с до 22 м/с.

Результаты, представленные на рис. 2, свидетельствуют о том, что изменения затрагивают и меньшие масштабы, что хорошо прослеживается в диапазоне (0,2–5) нм.

Заметим, что диапазон скоростей v вращения охлаждающего диска в исследуемых образцах такой же: $v = 37,7$ м/с для образца № 11 и $v = 22$ м/с для образца № 12 (табл. 1.)

Для дальнейшего исследования весь диапазон периодичностей разбивался на поддиапазоны и прослеживался их вклад в общую картину ИПХ.

Этот анализ проводился для спектров всех четырех образцов, рис. 2, но проиллюстрирован будет на примере ДКФ от структуры образца № 3, рис. 3.

Показано отличие по анизотропии распределения структурных неоднородностей для семи выделенных поддиапазонов: I – 2,0 нм – 1 нм; II – 1 нм – 0,57 нм; III – 0,57 нм – 0,38 нм; IV – 0,38 нм – 0,28 нм; V – 0,28 нм – 0,22 нм; VI – 0,22 нм – 0,2 нм; VII – 0,2 нм – 0,15 нм.

Структура ИПХ всех выделенных поддиапазонов отличается и от интегральной, круговая диаграмма на рис. 2, а.

Здесь в целом можно говорить об изотропной структуре, с коэффициентом анизотропии ε , близким к единице.

Аналогичная картина наблюдается и для образцов № 9, № 11 и № 12: анизотропии распределения структурных неоднородностей для семи выделенных поддиапазонов отличаются как между собой, так и от интегральной.

Есть различие в поведении ИПХ и при фиксированном поддиапазоне каждого из образцов. Для первого поддиапазона (1 нм – 2,0 нм) всех образцов заметно отличие, как по направлению, так и по степени их анизотропности, рис. 4.

Стоит отметить, что первый поддиапазон наиболее наглядно демонстрирует изменение вида ИПХ, для других поддиапазонов эти изменения выражены не так явно и проявляются в основном в изменении угла наклона главных осей анизотропии к оси прокатки ленты.

Проведенный анализ ИПХ структуры в диапазоне (0,09–5,4) нм для образцов № 3, № 9, № 11 и № 12 позволяет сделать вывод, что анизотропия структуры складывается из анизотропии неоднородностей различного размера.

Причем вклад в интегральную анизотропию различен для разных поддиапазонов.

Анализ как ИПХ, так и ИЧХ показал, что в исследуемой структуре можно выделить три поддиапазона по интенсивности, вкладу в общую структуру, изменчивости: $\lambda_1 - (2,0-0,28)$ нм; $\lambda_2 - (0,28-0,2)$ нм; $\lambda_3 - (0,2-0,09)$ нм, длинно-, средне- и коротковолновый, соответственно (рис. 3).

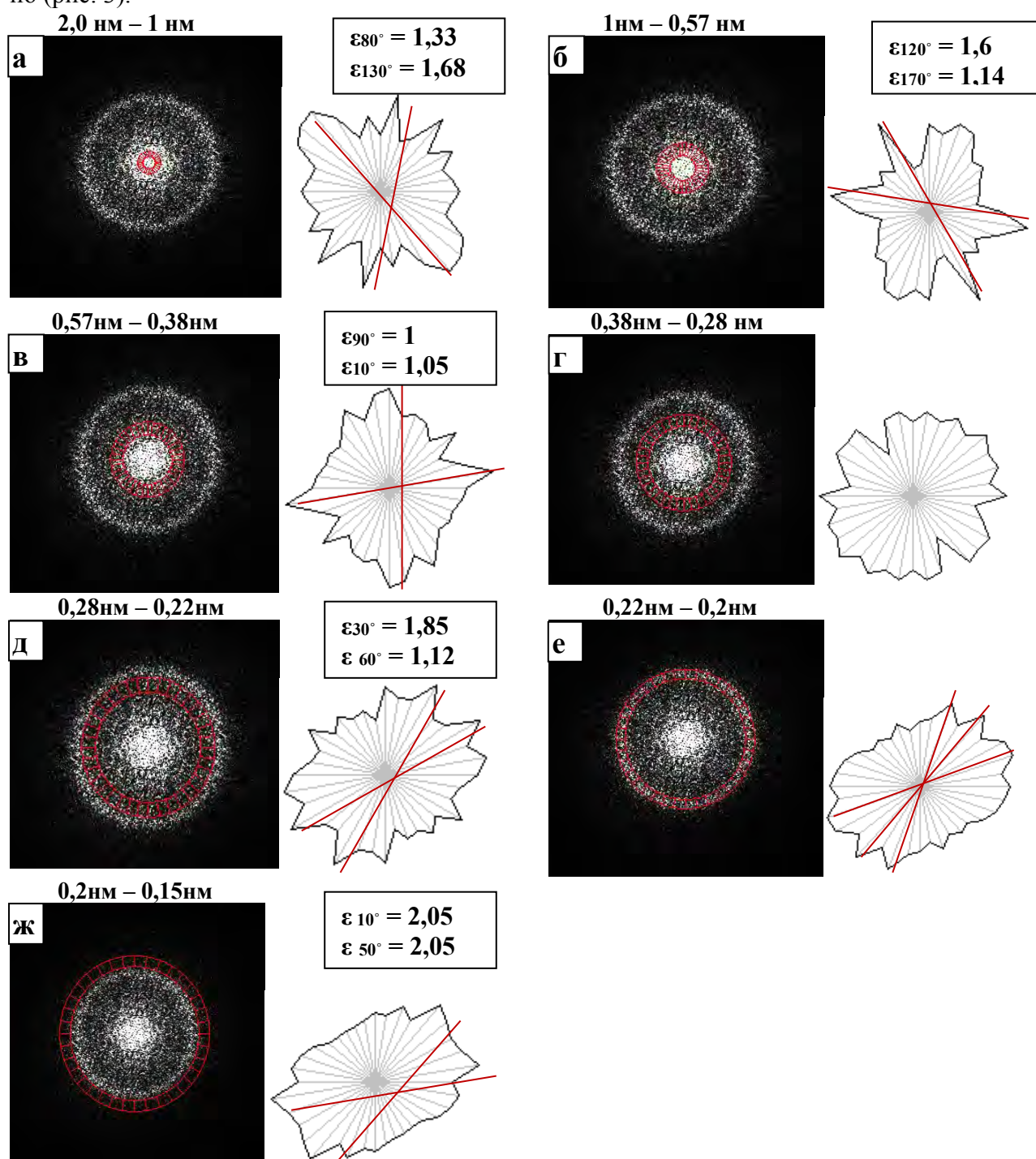


Рис. 3. Анализ анизотропии распределения структурных неоднородностей сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$, образец № 3

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 0657-2020-0005. Экспериментальные данные получены на оборудовании Центра коллективного пользования Дальневосточного федерального университета, регистрационный № 200556 (Владивосток).

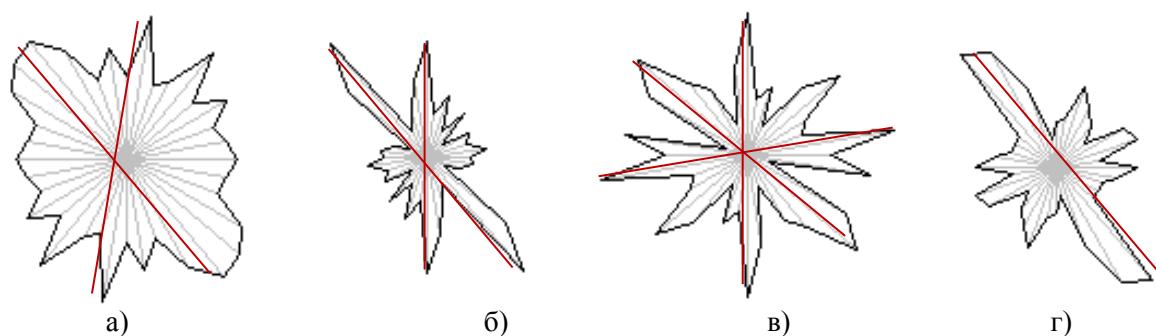


Рис. 4. Вид ИПХ для поддиапазона структурных неоднородностей (1 нм – 2,0 нм) сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$: а) образец А, б) образец В, в) образец С, г) образец D

ЛИТЕРАТУРА

1. Hawelek L. The structure and magnetic properties of rapidly quenched $\text{Fe}_{72}\text{Ni}_8\text{Nb}_4\text{Si}_2\text{B}_{14}$ alloy / L. Hawelek et al. // *Materials*. 2021. V. 14(1). P. 5-9.
2. Han Y. FeCo-based soft magnetic alloys with high Bs approaching 1.75 T and good bending ductility / Y. Han et al. // *J. of Alloys and Compounds*. 2017. V. 691. P. 364-368.
3. Liu C. Fe-B-Si-C-Cu amorphous and nanocrystalline alloys with ultrahigh hardness and enhanced soft magnetic properties / C. Liu et al. // *J. of Non-Crystalline Solids*. 2021. V.554.P. 120606.
4. Herzer G. Modern soft magnets: Amorphous and nanocrystalline materials // *Acta Materialia*. 2013. V. 61(3). P. 718-734.
5. Ilin N. V. Magnetic correlations peculiarities in amorphous Fe-Cu-Nb-Si-B alloy ribbons / N. V. Ilin et al. // *J. of Magnetism and Magnetic Materials*. 2022. V.541. P.168525.
6. Frolov A. M. Structural Heterogeneity of an Amorphous-Nanocrystalline Alloy $\text{Fe}_{77}\text{Cu}_1\text{Si}_{16}\text{B}_6$ in the Nanometer Range / A. M. Frolov et al. // *WSEAS Transactions on Applied and Theoretical Mechanics*. 2022. V.17. P. 8-14.
7. Пустовалов Е. В. Влияние технологических условий получения аморфных сплавов CoNiFeSiB на структуру и свойства / Е. В. Пустовалов Е. Б. Модин, А. М. Фролов, и др. // *Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и нейтронные исследования*. 2019. № 7. С. 42-50.
8. Фролов А. М. Анизотропия структурных неоднородностей быстрозакаленных сплавов / А. М. Фролов, Г. С. Крайнова, С. В. Должиков // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2018. № 4. С. 84-90.
9. Qiaoa J. C. Structural heterogeneities and mechanical behavior of amorphous alloys / J. Qiaoa et al. // *Progress in Materials Science*. 2019. V.104. P. 250-329.
10. Чухрий Н. И. Корреляция морфологии поверхностей быстрозакаленных лент и атомного разупорядочения в процессах спиннингования. / Н. И. Чухрий, Л. А. Юдина, А. М. Фролов, В. В. Юдин // *Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и нейтронные исследования*. 1999. №4. С.55-65.
11. Popova N. Impact of thermochemical treatment on structure and phase state of austenitic alloy. / N. Popova et al. // *AIP Conference Proceedings*. 2019. V. 2167. P. 020287.
12. Tonga X. Structural origin of magnetic softening in a Fe-based amorphous alloy upon annealing / X. Tonga et al. // *J. of Materials Science & Technology*. 2022. V.96. P.233-240.
13. Алейникова К. Б. Анализ структуры металлического стекла состава $\text{Al}_{87}\text{Ni}_{10}\text{Nd}_3$ с помощью фрагментарной модели / К. Б. Алейникова, А. А. Змейкин, Е. Н. Зинченко, В. М. Иевлев // *Физика и химия стекла*. 2012. Т. 38. № 1. С. 98-106.
14. Бакай А. С. Фрактальные структуры гетерофазных состояний жидкости // *Материаловедение*. 2009. В. 6. С. 2-7.
15. Pustovalov E.V. Atomic structure design of rapidly quenched amorphous cobalt-based alloys / E. V. Pustovalov, E. B. Modin, F. N. Fedorets // *Sol. St. Phenom*. 2017. V.256. P.569-574.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА НИТРАТА ЦЕЗИЯ, ВНЕДРЕННОГО В УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ

И. А. Чернечкин, А. Ю. Милинский

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
Благовещенск, e-mail: ser_nyb@mail.ru

В статье раскрывается актуальность исследования сегнетоэлектрических нанокompозитов. Представлен способ получения нанокompозита нитрат цезия – углеродные нанотрубки (CsNO₃/UNT). Приведены результаты исследований температурных зависимостей сигнала дифференциального термического анализа для объемного нитрата цезия и нитрата цезия, внедренного в углеродные нанотрубки. Описаны результаты терморентгенографических исследований для нанокompозита CsNO₃/UNT. Проведено сравнение результатов дифференциально термического анализа и терморентгенографических исследований.

Постоянно растущие требования к характеристикам различных материалов приводит к поиску новых конструкционных материалов, замене микрокомпозитов на нанокompозиты. В таких структурах взаимодействие с матрицей производится не на макро-, а на микроуровне. Нанокompозиты могут иметь упорядоченную внутреннюю структуру, что обеспечивает комплекс свойств, отличных от обычных композитов и от компонентов нанокompозита [1].

Композиты на основе сегнетоэлектриков, внедренных в наноразмерные матрицы, используются для создания элементов носителей с долговременной памятью, микроскопических источников питания, конденсаторов высокой емкости и различных датчиков, например, измерителей влажности [2]. Некоторые представители семейства нитратов KXO₃ (где X = K, Na, Cs, Rb, NH₄) в определенном температурном интервале проявляют сегнетоэлектрические свойства. Наиболее изученным, как в объемном, так и в наноструктурированном состоянии, представителем данного семейства является нитрат калия [3]. Интерес к данному веществу обусловлен его свойствами: относительно высоким значением спонтанной поляризации (~10 мКл/см²), прямоугольной петлей гистерезиса.

Нитрат цезия CsNO₃, также как и KNO₃, обладает сегнетоэлектрическими свойствами. В работе [4] была впервые определена величина спонтанной поляризации кристаллов CsNO₃, она составила 1 – 2 мКл/см² вблизи фазового перехода, что на порядок меньше, чем у нитрата калия. На основе нитрата цезия ранее были получены и исследованы композиты нитрат калия – нитрат цезия [5] и нанокompозиты нитрат цезия-пористое стекло [6].

Однако, насколько нам известно, на сегодняшний день работа [6] является единственной по исследованию наноструктурированного нитрата цезия.

Кристаллы нитрата цезия CsNO₃ при комнатной температуре (30 °С) обладают тригональной симметрией с постоянными решетки $a = 10,950 \text{ \AA}$, $c = 7,716 \text{ \AA}$, в образце основной фазой является тригональная модификация P31m. При повышении температуры до $T_c = 154 \text{ °C}$ происходит структурный переход первого рода в высокотемпературную кубическую фазу с параметром решетки $a = 8,980 \text{ \AA}$. Внедрение нитрата цезия производилось в нанопористые матрицы насыщенным раствором CsNO₃. В качестве нанопористых матриц использовались углеродные нанотрубки. Такой выбор матриц обусловлен большой анизотропией формы и уникальным набором свойств нанотрубок (механических, электрических, тепловых).

Большая диэлектрическая проницаемость углеродных нанотрубок (УНТ) объясняет их привлекательность для создания нанокompозитов с высокой диэлектрической проницаемостью [7]. В нашем эксперименте использовались многослойные нанотрубки производства фирмы Beijing Kaifa Special Material Manufacture co., LTD. – трубки малого размера вставле-

ны в трубки большего размера. Согласно производителю, внешний диаметр УНТ составляет 8-15 нм, а внутренний – 3-5 нм, длина – 3-12 мкм.

Раствор CsNO_3 был получен следующим образом: в тигель с дистиллированной водой насыпался порошок нитрата цезия и далее тщательно перемешивался до образования насыщенного раствора. В другой тигель помещались углеродные нанотрубки. Раствор капельно (по 5 капель) наносился на нанотрубки, после чего производилось перемешивание и повторение процедуры до полного заполнения раствором пор. Полученная смесь высушивалась при температуре около $150\text{ }^\circ\text{C}$. Для фиксации зависимости сигнала дифференциального термического анализа (ДТА) нанокompозита CsNO_3/UNT от температуры использовался дериватограф Linseis STA PT 1600. Наблюдения проводились в режиме «нагрев – охлаждение» со скоростью $2\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$ в интервале от комнатной температуры до $180\text{ }^\circ\text{C}$. Для сравнения проводились исследования свойств объемного CsNO_3 . На рисунках 1 и 2 показаны температурные зависимости ДТА для объемного CsNO_3 и нанокompозита CsNO_3/UNT соответственно. При нагревании пик для чистого нитрата цезия соответствует температуре приблизительно равной $155\text{ }^\circ\text{C}$, что отличается от температуры фазового перехода нанокompозита CsNO_3/UNT при нагревании, для него эта температура составляет $152\text{ }^\circ\text{C}$. При охлаждении нанокompозита температура, соответствующая фазовому переходу в сегнетоэлектрическую фазу ($145\text{ }^\circ\text{C}$), смещается в область низких температур на $5\text{ }^\circ\text{C}$ относительно температуры фазового перехода объемного CsNO_3 ($150\text{ }^\circ\text{C}$). Кроме того, при охлаждении наблюдается появление второго экстремума при $124\text{ }^\circ\text{C}$.

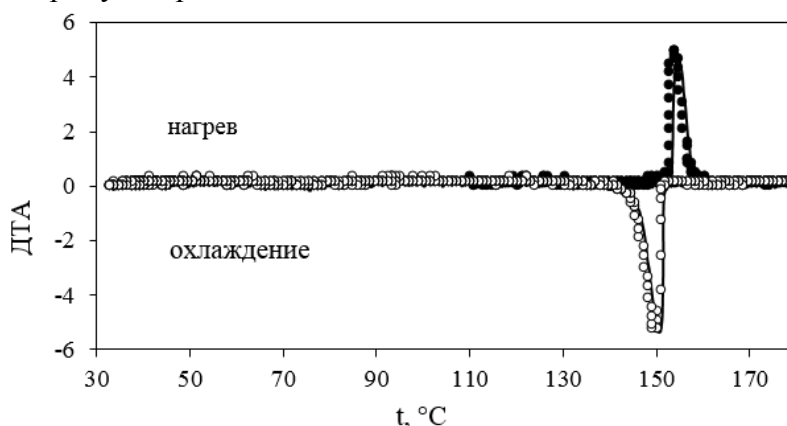


Рис. 1. Температурные зависимости сигнала ДТА для объемного нитрата цезия

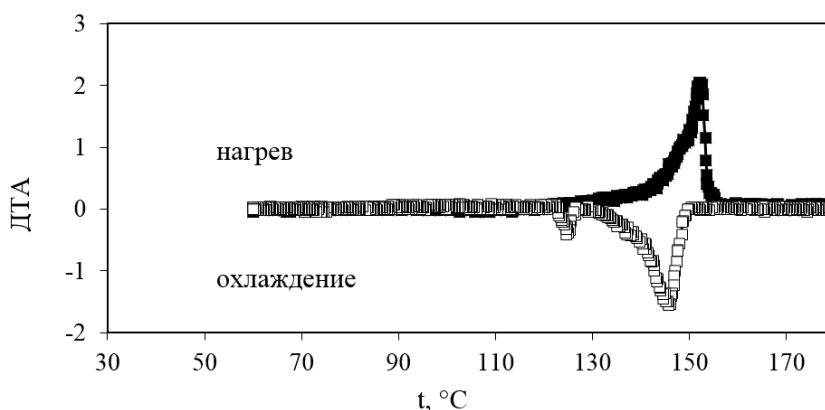


Рис. 2. Температурные зависимости сигнала ДТА для нанокompозита CsNO_3/UNT

Для подтверждения появления сегнетофазы в нанокompозите были проведены терморентгенографические исследования образцов на автоматическом порошковом дифрактометре Rigaku Ultima IV с термоприставкой.

Скорость нагревания составляла $2\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$. Идентификация фаз проводилась в программном комплексе PDXL-2, количественный фазовый анализ проводился методом Рит-

вельда. Результаты терморентгеновского исследования представлены на рисунке 3.

Фрагмент терморентгенограммы наглядно демонстрирует области фазового перехода нанокompозита нитрата цезия в углеродных нанотрубках между температурами 130 °С и 160 °С при нагревании и 155 °С – 140 °С при охлаждении.

Судя по скачку в позициях пиков в интервале температур 130–160 °С, происходит полиморфный переход из тригональной модификации в кубическую ($R\bar{3}c$, $a=8,98 \text{ \AA}$).

При охлаждении образца обратный переход из кубической модификации в тригональную происходит в интервале 155–140 °С.

Температуры переходов, зафиксированные терморентгенанализом согласуются с результатами дифференциально термического анализа.

Аномалия, выявленная при дифференциальном термическом анализе нанокompозита CsNO_3/UNT , в виде экстремума при 124 °С в процессе охлаждения образца по данным терморентгенанализа не зафиксирована. Следовательно, проявление данной аномалии не связано с изменением кристаллографической симметрии. Для определения природы аномалии требуются дополнительные исследования.

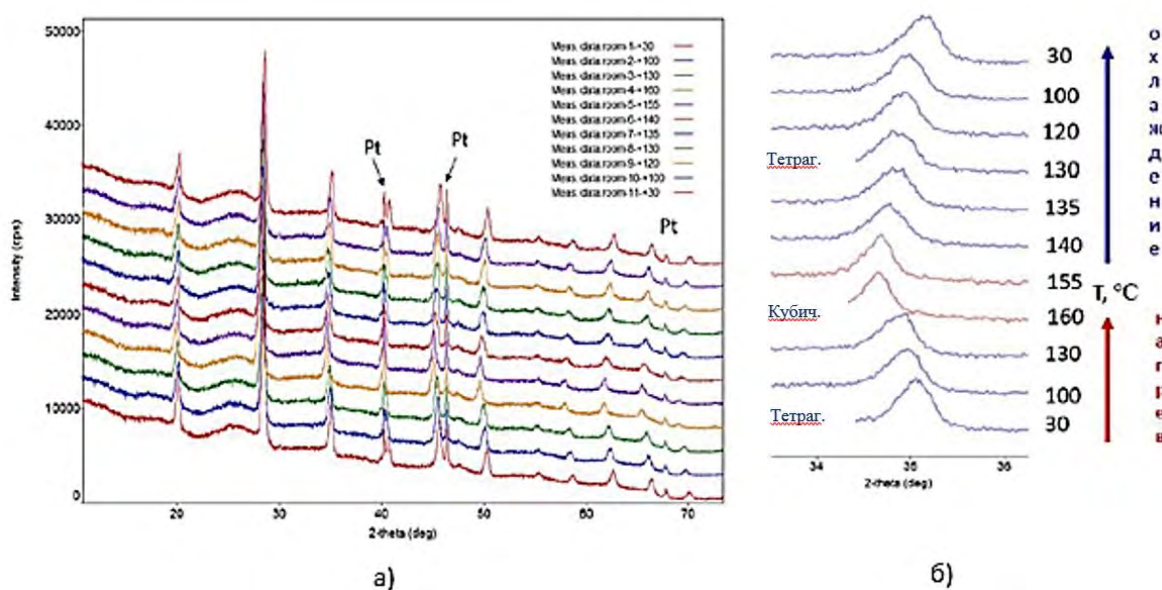


Рис. 3. Дифрактограммы образца CsNO_3/UNT в процессе нагревания от комнатной температуры до 160 °С и охлаждения от 160 °С до комнатной температуры (а) и фрагмент терморентгенограммы около 35°(б)

ЛИТЕРАТУРА

1. Фазовые переходы в KNO_3 , введенном в поры регулярной наноразмерной пленки MCM-41 / С. В. Барышников, Е. В. Чарная, А. Ю. Милинский, Ю. В. Патрушев // ФТТ 2013. Т. 55. Вып. 12. С. 2439-2443.
2. Phase diagrams of ferroelectric nanocrystals strained by an elastic matrix / A. I. Nikitchenko, A. V. Azovtsev, N. A. Pertsev // J. Phys.: Condens. Matter. 2018. V. 30. P. 015701 (1-9).
3. Chen A., Chernow F. Nature of Ferroelectricity in KNO_3 // Phys. Rev. 1967. V. 154, iss. 2. P. 493-505.
4. Lucas B. W. The structure (neutron) of phase II caesium nitrate at 298 K, CsNO_3 // Acta Crystallografica C. 1983. Vol. C39. Part 12. P. 1591-1594.
5. Диэлектрические свойства сегнетоэлектрического композита нитрат-калия-нитрат цезия / С. В. Барышников, А. Ю. Милинский, Е. В. Стукова, А. А. Зеева // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 1. С. 7-15.
6. Милинский А. Ю., Барышников С. В., Чернечкин И. А. Диэлектрические и тепловые свойства нанокompозита нитрат цезия – пористое стекло // Известия вузов. Физика. 2022 (принята к печати).
7. Designing BaTiO_3 carbon nanotube core-shell hybrids to achieve polyvinylidene fluoride composites with high dielectric properties. / B. Fan, M. Zhou, C. Zhang, Y. Liu, D. He and J. Bai // Mater. Res. Express. 2019. V. 6. P. 075071.

ФОРМИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРИНЦИПОВ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ КАК ОСНОВЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ БУДУЩИХ КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ СЛОЕВ Si И Ge

А. Н. Чибисов^{1,2}

¹ФГБУН «Вычислительный центр» ДВО РАН

²ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»

Хабаровск, e-mail: andreichibisov@yandex.ru

В работе описаны квантово-механические модели «квантовых вычислителей» состоящих из системы кубитов на основе примесных атомов фосфора и бора в кремнии и дырок в германии. Полученные результаты имеют перспективное значение для использования их в технологии проектирования квантовых кубитов.

Введение

В современной наноэлектронике, проблема создания квантовых компьютеров, является одной из важнейших технологических задач. Решение данной задачи позволит мгновенно решать такие сложнейшие задачи как проектирование современных материалов, создание новых видов лекарств, хранение и передача больших объемов информации и т. п. Перспективной платформой для создания данных машин может послужить кристаллический кремний. Способность управления квантовыми состояниями и реализация процессов передачи и преобразования квантовой информации на атомном уровне позволит создать квантовые вычислители.

В последнее время активный интерес проявляется к квантовым кубитам на основе ядерных спинов примесей фосфора в кристалле Si [1–3], технологическая схема которых была предложена еще Кейном (Kane) в 1998 году [4].

Спиновые состояния электрона, связанного с одним донором фосфора в кремнии, показывают долгое время согласованности и релаксации [5]. Впервые в работе Марелло [6] было сообщено об экспериментальной возможности считывания ориентации спина электрона в системе P:Si, что вызвало активный интерес в исследованиях ориентаций спинов квантовых кубитов [7, 8]. Авторы в работе [9] показали, что наблюдаются удивительные эффекты, которые возникают из-за квантования взаимодействия ядер-доноров фосфора. В [10] была продемонстрирована работа одно- и двухкубитовых операций в системе. Лаухт (Laucht) с соавторами описали порядок кодирования квантовой информации для системы P:Si [11].

В настоящее время исследователи пытаются достичь контролируемого перекрытия волновой функции для высокоточного считывания спинов на каждом кубите.

Так, в работе [12], были получены антикоррелированные спиновые состояния между двумя кубитами P, расположенными на расстоянии 16 ± 1 нм. Авторы показали, что обменное взаимодействие может быть «включено» и «выключено» с помощью электрического поля, управляющего двумя атомами фосфора.

В тоже время, акцепторная примесь бора в кремнии, обеспечивает более сильную спин-орбитальную связь (по сравнению с примесью фосфора), что делает ее интересным

кандидатом для квантовых кубитов, с возможностью их управления посредством электрического поля [13].

Электрическое поле позволяет переводить «бор-кубит» из включенного состояния в выключенное посредством сближения примесных энергетических уровней друг с другом, что позволяет управлять процессами хранения, преобразования и передачи квантовой информации. Мейренд (Maugand R.) и др. [14] показали, что дырки обладают необходимым спин-орбитальным взаимодействием.

В теоретических исследованиях [15] было также показано, что не только заполненные состояния зоны проводимости, но и вакантные состояния валентной зоны перспективны для реализации спиновых кубитов. По этим причинам более разумно использовать структуры с дырками для получения систем спиновых кубитов.

Среди прочих полупроводников более сильной, а также контролируемой спин-орбитальной связью обладает германий Ge [16, 17, 18].

Наибольший интерес представляют германиевые нанопроволоки типа NW, выращенные на поверхности кремния. Было показано, что в процессе анизотропного роста Ge на подложке Si(001) кластеры квантовых точек вытягиваются вдоль направлений [001] или [010] Si [19].

Основной задачей наших исследований является создание квантово-механической модели «квантового компьютера» состоящего из системы кубитов связанных друг с другом. Для теоретического проектирования такой модели исследуются следующие материалы: кремний с внедренными атомами фосфора и германий с наличием дырок.

Методы и детали расчетов

Все расчеты атомных структур, их полной энергии и зарядового распределения проводились с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO [20]. В работе использовались ультрамягкие, в полностью релятивистской форме псевдопотенциалы для германия, кремния, фосфора и бора в рамках обобщенно-градиентного приближения Perdew-Burke-Ernzerhof в приближении спин-орбитального взаимодействия.

При релаксации атомных структур элементарной ячейки, всем атомам предоставлялась полная свобода. Для учета зоны Бриллюэна использовались специальные наборы k-точек. Для элементарной ячейки обычно использовался набор $6 \times 6 \times 6$, для ультратонких слоев набор $2 \times 6 \times 1$. Энергия обрезания плоских волн составляла 680 эВ.

Значения межатомных сил, после структурной релаксации, не превышали значение 0,026 эВ/Å. Анализ атомной геометрии и распределения зарядовых и магнитных характеристик структур проводился с помощью пакета программ Vesta [21].

Результаты и их обсуждение

Анализ результатов показывает, что равновесная ориентация спина атома P в сфере Блоха соответствует следующим полярным координатам $(\theta; \varphi) = (176^\circ; 102^\circ)$ и квантовому состоянию $|1\rangle$ (рис. 1). Мы рассчитали магнитное локальное поле $B(\mathbf{r})$, локальную намагниченность $m(\mathbf{r})$ и плотность спинового тока, создаваемые избыточным электроном атома фосфора.

Результаты показывают, что для разных направлений спинов ($|0\rangle$ и $|1\rangle$ – квантовых состояний) имеется разное направление плотностей спинового тока $j(\mathbf{r})$.

Показано, что рассмотренная система с двумя кубитами бора, размещенными в решетке силицена (рис. 2), ведет себя как коммутатор, позволяющий производить операции над локальным распределением зарядовой плотности, электростатического потенциала и локальной намагниченности.

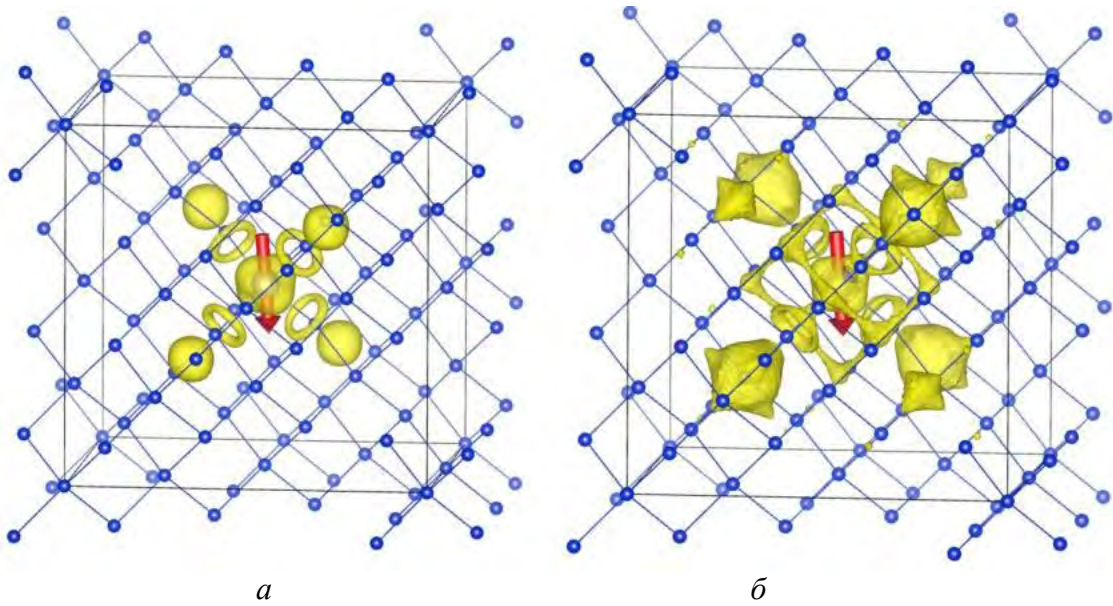


Рис. 1. *a* – ориентация $|1\rangle$ спина избыточного электрона атома Р и неколлинеарная намагниченность $m(r)$ (плотность $|\psi|^2$ локализации электрона) атомной системы P:Si; *б* – плотность спинового тока в системе

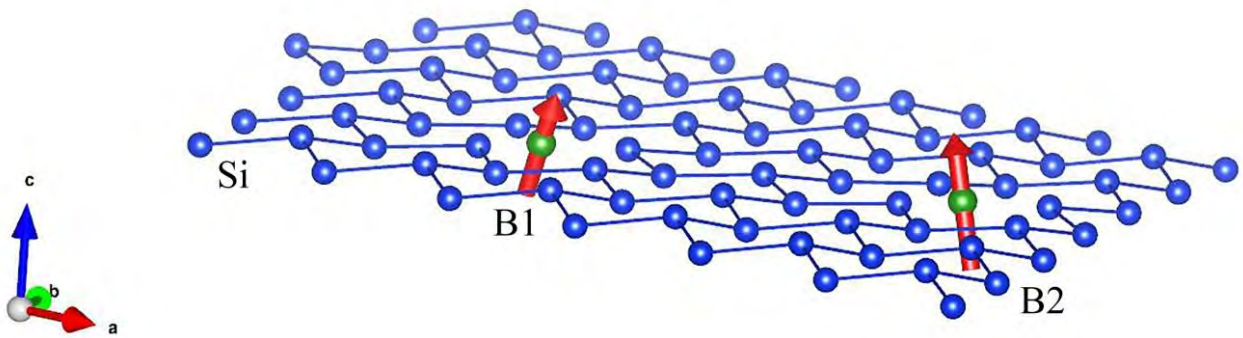


Рис. 2. Модель модифицированного силицена, содержащая 70 атомов кремния и 2 атома бора

Данная двумерная система и полученные результаты очень интересны и могут быть использованы технологами и экспериментаторами для оценки, проектирования и предсказания физических свойств двухкубитовой квантовой системы как логических вентилей для квантовых вычислителей.

В работе были детально исследованы атомная и электронная структура 2D-мерного слоя германия с кристаллографическим направлением (105) (рис. 3). Исследованы пространственные локализации дырочных состояний кубитов, выявлены выгодные квантовые состояния и приводится анализ магнитных структурных характеристик системы.

Показано, что для наноразмерного слоя германия с толщиной 0.27 нм его атомная структура трансформируется в структуру с моноклинной пространственной группой с симметрией P2/m. Эта трансформация сопровождается увеличением межатомного расстояния. В работе был проведен анализ квантовых состояний дырочных кубитов в системе при наличии в ней дырок с четным и нечетным числом. Результаты показывают, что для одной дырки выгодным квантовым состоянием на 0.72 мкэВ является состояние $|1\rangle$, с направлением спина вниз $s = -1$, по сравнению с состоянием $|0\rangle$, с направлением спина вверх $s = +1$. Четное количество дырок в системе не приводит к возникновению полной намагниченности.

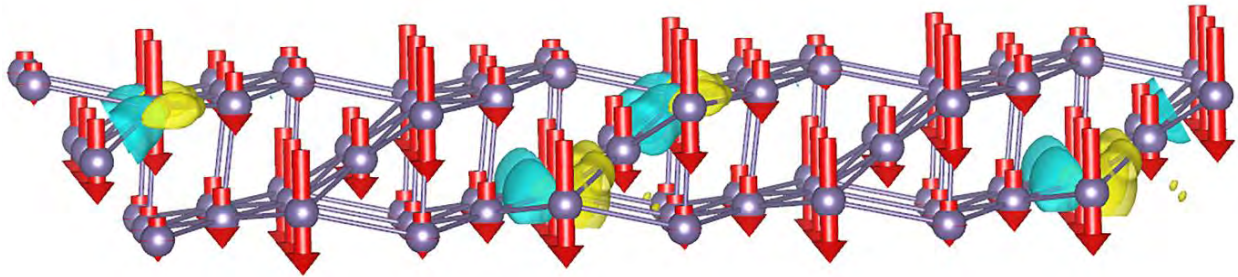


Рис. 3. Локализация дырочных состояний (одна дырка) в германии с квантовым состоянием $|1\rangle$, с направлением спина вниз $s = -1$, является наиболее энергетически выгодным состоянием на 0.72 мкэВ по сравнению с состоянием $|0\rangle$, со спином вверх $s = +1$. Направления спинов вниз $s = -1$ обозначены красными стрелочками

Образование трех дырок приводит к тому, что наиболее выгодным состоянием на 0.14 мкэВ становится квантовое состояние $|0\rangle$, с направлением спина вверх $s = +1$, по сравнению с состоянием $|1\rangle$, поэтому систему с тремя дырками проще переводить между квантовыми состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$, по сравнению с системой с одной дыркой. В работе показано, что для дырочных кубитов характерно условие трансляции их магнитных состояний через два параметра ячейки $2b$ вдоль оси Y .

Выводы

Полученные нами данные из квантово-механических расчетов могут послужить оценочными параметрами для расчета эффективной намагниченности в локальном окружении примесных атомов не только для описанных материалов, но других подобных атомных систем. Мы уверены, что полученные результаты имеют перспективное значение для использования их в технологии проектирования кубитов для будущих квантовых компьютеров.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005). Часть работы выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-01186.

ЛИТЕРАТУРА

1. STM investigation of epitaxial Si growth for the fabrication of a Si-based quantum computer / L. Oberbeck, T. Hallam, N. J. Curson, M. Y. Simmons. // *Clark Applied Surface Science* / 2003. V. 212–213. P. 319-324.
2. A single-atom transistor / M. Fuechsle, J. A. Miwa, S. Mahapatra, H. Ryu, S. Lee, O. Warschkow, L. C. L. Hollenberg, G. Klimeck, M. Y. Simmons. // *Nature Nanotechnology*. 2012. V. 7. P. 242-246.
3. Two-electron spin correlations in precision placed donors in silicon / M. A. Broome, S. K. Gorman, M. G. House, S. J. Hile, J. G. Keizer, D. Keith, C. D. Hill, T. F. Watson, W. J. Baker, L. C. L. Hollenberg, M. Y. Simmons // *Nature Communications* / 2018. V. 9. P. 980.
4. Kane B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer // *Nature* / 1998. V. 393. P. 133.
5. Spin readout and addressability of phosphorus-donor clusters in silicon / H. Buch, S. Mahapatra, R. Rahman, A. Morello, M. Y. Simmons // *Nature Communications*. 2013. V. 4. P. 2017.
6. Single-shot readout of an electron spin in silicon / A. Morello, J. J. Pla, F. A. Zwanenburg, K. W. Chan, K. Y. Tan, H. Huebl, M. Möttönen, C. D. Nugroho, C. Yang, J. A. van Donkelaar, A. D. C. Alves, D. N. Jamieson, C. C. Escott, L. C. L. Hollenberg, R. G. Clark, A. S. Dzurak // *Nature*. 2010. V. 467. P. 687-691.

7. A single-atom electron spin qubit in silicon / J. J. Pla, K. Y. Tan, J. P. Dehollain, W. H. Lim, J. J. Morton, D. N. Jamieson, A. S. Dzurak, A. Morello. // *Nature* / 2012. V. 489. P. 541-545.
8. Quantifying the quantum gate fidelity of single-atom spin qubits in silicon by randomized benchmarking / J. T. Muhonen, A. Laucht, S. Simmons, J. P. Dehollain, R. Kalra, F. E. Hudson, S. Freer, K. M. Itoh, D. N. Jamieson, J. C. McCallum // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2015. V. 27. P. 154205.
9. Impact of nuclear spin dynamics on electron transport through donors / S. K. Gorman, M. A. Broome, W. J. Baker, M. Y. Simmons // *Phys. Rev. B* / 2015. V. 92. P. 125413.
10. A two-qubit logic gate in silicon / M. Veldhorst, C. H. Yang, J. C. Hwang, W. Huang, J. P. Dehollain, J. T. Muhonen, S. Simmons, A. Laucht, F. E. Hudson, K. M. Itoh, A. Morello, A. S. Dzurak. // *Nature*. 2015. V. 526. P. 410-414.
11. A dressed spin qubit in silicon / A. Laucht, R. Kalra, S. Simmons, J. P. Dehollain, J. T. Muhonen, F. A. Mohiyaddin, S. Freer, F. E. Hudson, K. M. Itoh, D. N. Jamieson, J. C. McCallum, A. S. Dzurak, A. Morello // *Nature Nanotechnology*. 2017. V. 12. P. 61-66.
12. Two-electron spin correlations in precision placed donors in silicon / M. A. Broome, S. K. Gorman, M. G. House, S. J. Hile, J. G. Keizer, D. Keith, C. D. Hill, T. F. Watson, W. J. Baker, L. C. L. Hollenberg, M. Y. Simmons // *Nature Communications*. 2018. V. 9. P. 980.
13. Ruskov R., Tahan C. On-chip cavity quantum phonodynamics with an acceptor qubit in silicon // *Phys. Rev. B*. 2013. V. 88. P. 064308.
14. A CMOS silicon spin qubit / R. Maurand, X. Jehl, D. Kotekar-Patil, A. Corna, H. Bohuslavskiy, R. Laviéville, L. Hutin, S. Barraud, M. Vinet, M. Sanquer, S. De Franceschi // *Nature Communications*. 2016. V. 7. P. 1-6.
15. Kloeffel C., Loss D. Prospects for spin-based quantum computing in quantum dots // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 2013. V. 4. P. 51-81.
16. Hole spin coherence in a Ge/Si heterostructure nanowire / A. P. Higginbotham, T. W. Larsen, J. Yao, H. Yan, C. M. Lieber, C. M. Marcus, F. Kuemmeth. // *Nano Lett.* / 2014. V. 14. P. 3582-3586.
17. Spin-orbit interactions in inversion-asymmetric two-dimensional hole systems: A variational analysis / E. Marcellina, A. R. Hamilton, R. Winkler, D. Culcer. // *Phys. Rev. B*. 2017. V. 95. P. 075305.
18. The germanium quantum information route / G. Scappucci, C. Kloeffel, F. A. Zwanenburg, D. Loss, M. Myronov, J.-J. Zhang, S. De Franceschi, G. Katsaros, M. Veldhorst. // *Nature Reviews Materials*. 2021. V. 6. P. 926-943.
19. Monolithic growth of ultrathin Ge nanowires on Si(001) / J. J. Zhang, G. Katsaros, F. Montalenti, D. Scopece, R. O. Rezaev, C. Mickel, B. Rellinghaus, L. Miglio, S. De Franceschi, A. Rastelli, O. G. Schmidt // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 109. P. 085502.
20. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO / P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. B. Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A. D. Corso, S. De Gironcoli, P. Delugas, R. A. DiStasio Jr, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H-Y Ko, A. Kokalj, E. Küçükbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N.L. Nguyen, H-V Nguyen, A. Otero-de-la-Roza, L. Paulatto, S. Poncé, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, S. J. Baroni // *Phys.: Condens. Matter*. 2017. V. 29. P. 465901.
21. Momma K., Izumi F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data // *J. Appl. Crystallogr.* 2011. V. 44. P. 1272-1276.

ФОРМИРОВАНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК СИЛИЦИДА МАГНИЯ НА Si (111) И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА

И. О. Шолыгин, А. В. Поляков, И. А. Рябов, Д. В. Фомин

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
Благовещенск, e-mail: Sholygin435@gmail.com

В работе представлены результаты формирования тонких пленок силицида магния методом реактивной эпитаксии и исследования их методами электронной оже-спектроскопии и спектроскопии характеристических потерь энергии электронами. В ходе проведенных ростовых экспериментов были сформированы три пленки каждая толщиной 120 нм, при температурах подложек 200 °С для первого образца, 205 °С для второго и 210 °С для третьего. Анализ спектров СХПЭЭ показал, что процесс силицидообразования наблюдается в образцах, сформированных при температуре 200 °С и 205 °С.

Mg₂Si является полупроводником с шириной запрещенной зоны порядка 0,74 эВ [1]. Тонкие пленки, сформированные на различных подложках, включая Si, обладают люминесценцией в видимой (от 580 до 630 нм) и инфракрасной (от 1100 до 1500 нм) частях спектра при комнатной температуре [2]. Отличительной особенностью силицида магния является высокий коэффициент поглощения 95 % в спектральном диапазоне от 200 до 1800 нм, что в пять раз больше по сравнению с 17,6 % чистого Si [3]. Эффективность фотоэлектрического преобразования для структур с оптимальной толщиной и примесным легированием может достигать до 10–12 % для p-n и n-p (Si/Mg₂Si) и 22 % для p-n-p (Si/Mg₂Si/Si). Исследование фотоэлектрических свойств показало, что фоточувствительность наблюдается до 2100 нм, а светочувствительность при 1310 нм достигает нескольких десятков мА/Вт при небольшом обратном напряжении смещения [2]. Высокая термоэлектрическая мощность, фоточувствительность за пределами длин волн 1100 нм, нетоксичность и отсутствие редких или тугоплавких элементов делает Mg₂Si подходящим материалом для изготовления относительно дешевых оптоэлектронных приборов, термодатчиков массового потребления [3, 4]. Поэтому поиск недорогих технологии получения низкоразмерных структур Mg₂Si является в настоящее время актуальной задачей.

Формирование силицида магния нетривиальная задача, так как необходимо учитывать факторы, оказывающие влияние на структуру пленки. Для образования силицида магния нужно поддерживать постоянную температуру подложки около 200 °С, так как установлено, что скорость десорбции атомов магния с подложки увеличивается при более высоких температурах [4]. Также магний является щелочноземельным металлом и образует на поверхности оксидную пленку, даже после длительной дегазации источников в них содержится кислород, что хорошо видно из оже-спектров, где на всех сформированных слоях магния наблюдается повышенное содержание кислорода по сравнению со слоями кремния (см. рис. 1). Содержание примесей в сформированных образцах приводит к образованию нежелательных соединений, например с участием углерода или кислорода, что может негативно сказаться на термоэлектрических свойствах материала [5, 6].

В настоящее время в лаборатории физики поверхности научно-образовательного центра ФГБОУ ВО АмГУ отрабатывается формирование тонких пленок Mg₂Si на Si (111) послойным осаждением методом реактивной эпитаксии. Данный метод зарекомендовал себя с положительной стороны также и в других экспериментах [5, 7].

Тонкие пленки силицида магния в рассматриваемом эксперименте формировались в СВВ камере VARIAN прибора РН1 590 при давлении 10⁻⁷ Па методом реактивной эпитаксии. Для основы каждой пленки из промышленной шайбы КЭФ-100 с удельным сопротивлением 2–15

Ом·см вырезалась пластина кремния 15x5 мм. Источник кремния вырезался из шайбы FZN-100 с удельным сопротивлением 50-85 Ом·см и имел те же размеры, что и источник. Источником магния являлась стружка Mg чистотой 99,999 %, упакованная в танталовую трубку с проколом. Все подложки и источники прошли стандартную химическую очистку. Атомарно-чистая поверхность подложек Si(111) была получена с помощью прогрева при температуре $T=600^{\circ}\text{C}$ в течение 1 часа, затем проводился отжиг при температуре $T=1250^{\circ}\text{C}$ три раза в течение 3 с.

После дегазации подложек на первом этапе для всех образцов был сформирован слой Si толщиной 60 нм. На втором этапе на подложках формировался слой Mg толщиной 30 нм, а затем слой Si толщиной 10 нм. Послойное осаждение слоев Mg и Si для каждой пленки повторялось 6 раз, в результате были сформированы три образца с толщиной пленки по 120 нм. Единственное отличие в процессе формирования образцов заключалось в температурах под-С для первого, второго и третьего образцов соответственно. В процессе формирования отдельных слоев Mg и Si образцы исследовались методами оже-спектроскопии и спектроскопии характеристических потерь энергии электронами (СХПЭЭ). Оже-спектры всех этапов формирования образцов представлены на рис. 1.

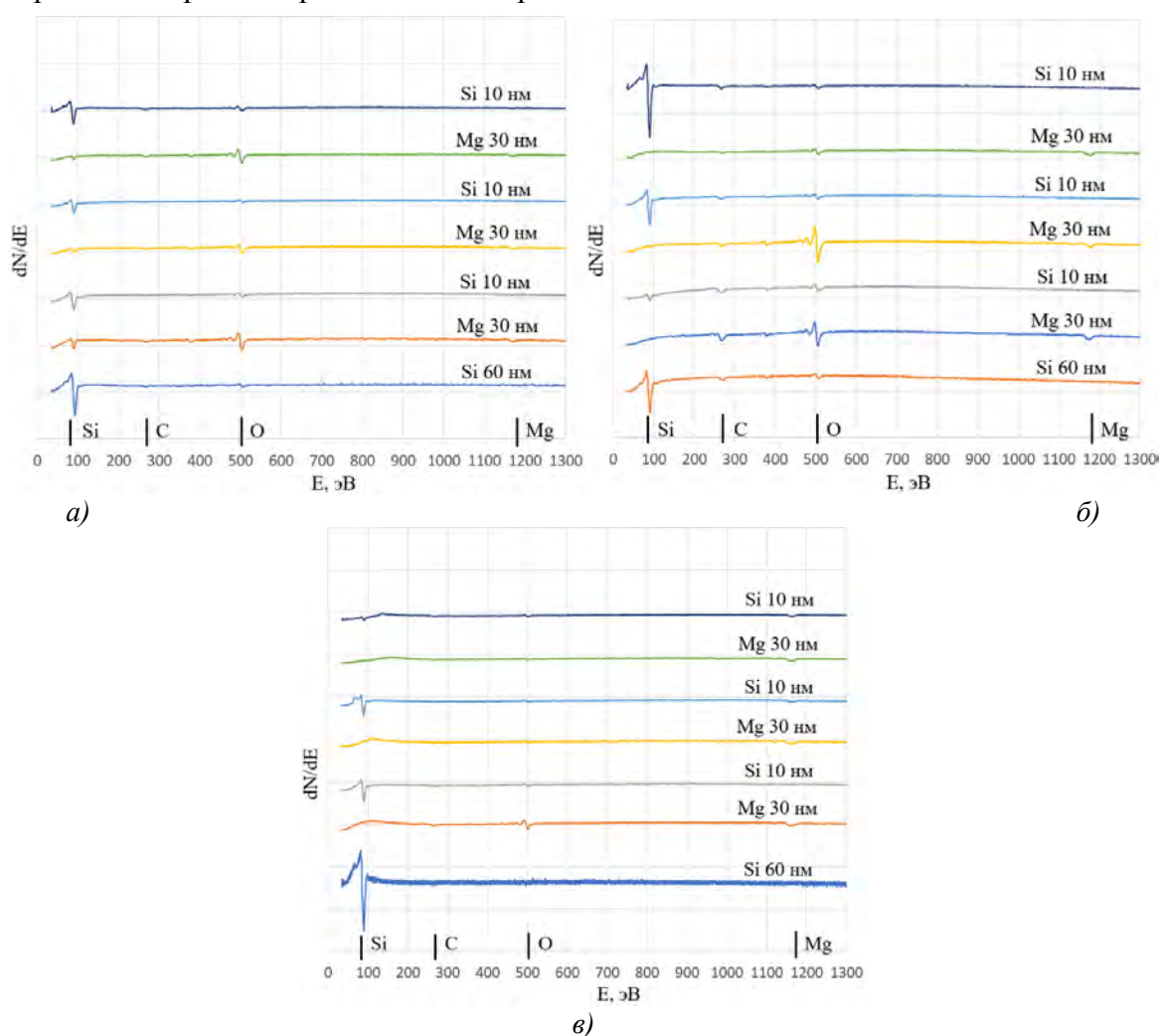


Рис. 1. Оже-спектры всех этапов формирования пленок Mg_2Si :
 а) образец: 1 $T = 200^{\circ}\text{C}$, б) образец 2: $T = 205^{\circ}\text{C}$, в) образец 3: $T = 210^{\circ}\text{C}$

В спектрах оже-электронов буферного слоя Si у всех трех образцов наблюдается ярко выраженный обратный пик большой интенсивности с энергией 92 эВ, который по атласу оже-спектров соответствует чистому кремнию. На всех этапах формирования слоев Mg у всех трех образцов наблюдается обратный пик малой интенсивности с энергией 1186 эВ, при-

надлежащий магнию, при этом интенсивность обратных пиков с энергией 1186 эВ наиболее высокая у образца, сформированного при температуре 205°C, также на образцах, сформированных при температурах 200°C и 205°C, на всех этапах формирования слоев Mg, наблюдаются отчетливо выраженные обратные пики с энергией 503 эВ, которые принадлежат кислороду, примечательно, что обратные пики, принадлежащие кислороду имеют значительно большую интенсивность на этапах формирования Mg, чем на этапах формирования Si. Можно заключить, что пленки, сформированные при температурах $T = 200^\circ\text{C}$ и $T = 205^\circ\text{C}$ имеют повышенное содержание кислорода. Помимо обратных пиков, принадлежащих Mg, Si и O также можно выделить, что на некоторых этапах формирования образцов присутствуют обратные пики малой интенсивности с энергией 272 эВ, которые по атласу оже-спектров принадлежат углероду [8]. После завершения формирования тонких пленок силицида магния все образцы были покрыты слоем аморфного Si в целях защиты пленок от окисления при извлечении из СВВ камеры. Спектры характеристических потерь энергии электронами представлены на рис. 2.

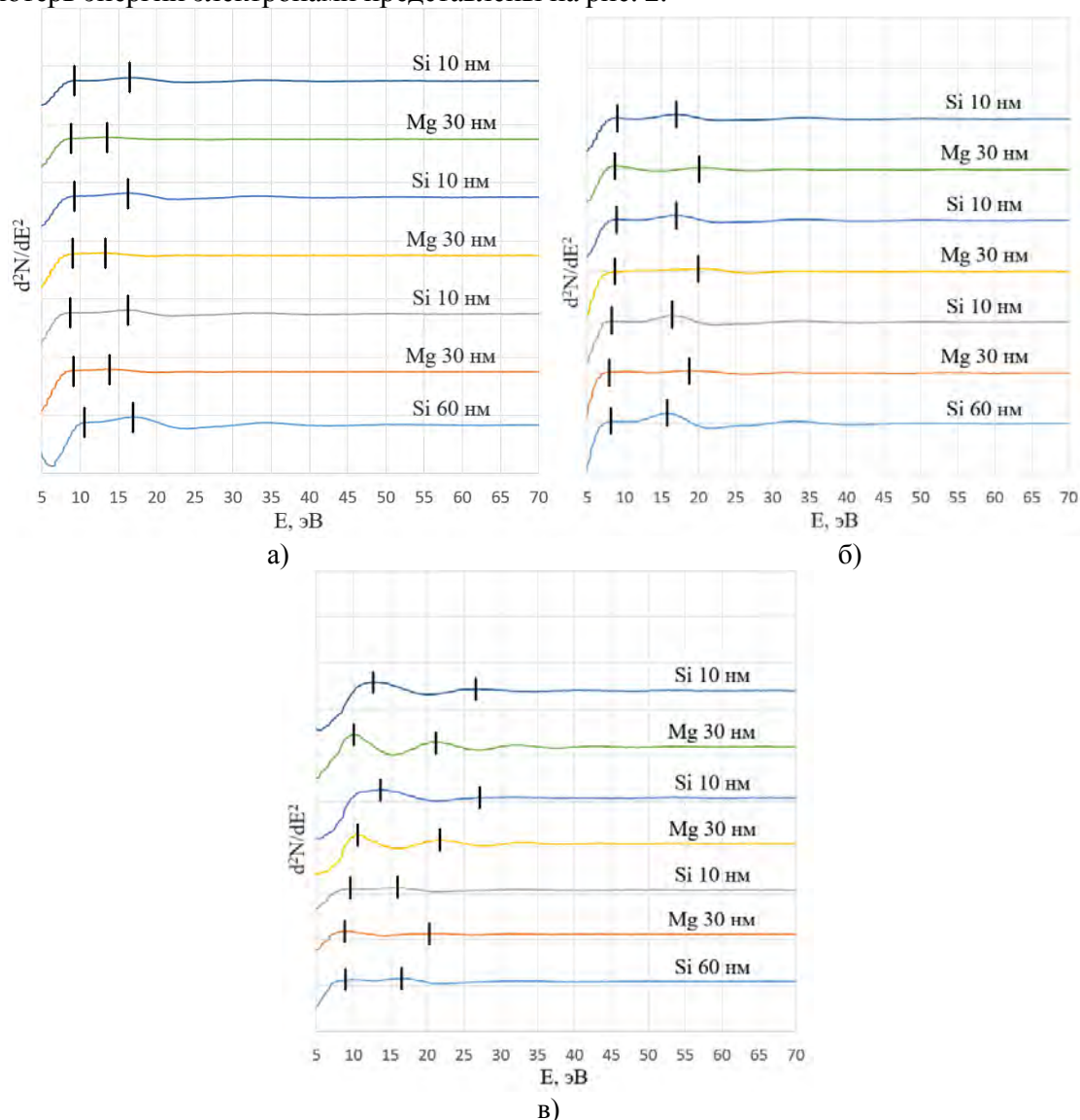


Рис. 2. Спектры характеристических потерь энергии электронами сформированных пленок: а) образец 1: $T = 200^\circ\text{C}$, б) образец 2: $T = 205^\circ\text{C}$, в) образец 3: $T = 210^\circ\text{C}$

Анализ спектров характеристических потерь энергии электронами буферного слоя Si образцов, сформированных при 205°C и 210°C показал, что на них присутствует два пика потерь с энергиями 7,8 и 16 эВ, которые, по литературным источникам, соответствуют возбуждению поверхностного и

объемного плазмонов кремния [9,10]. У образца, сформированного при $T = 200$ °С пики потерь оказались сдвинуты в большую сторону по энергии, очевидно из-за погрешности измерения.

На спектрах образца, сформированного при 200 °С, полученных после формирования первого и последующих слоев Mg, наблюдаются пики потерь с энергиями в районе 9 и 14 эВ, что по литературным источникам соответствует возбуждению поверхностного и объемного плазмонов. Наличие на спектрах потерь с энергиями 8 и 9 эВ свидетельствует о начале процесса силицидообразования [9, 10].

На спектрах образца сформированного, при 205 °С, полученных после формирования первого слоя Mg, наблюдаются пики потерь с энергиями 7,6 и 18,5 эВ, которые соответствуют возбуждению поверхностного и объемного плазмонов. Далее на всех этапах формирования отдельных слоев Si и Mg наблюдается незначительный сдвиг поверхностных и объемных плазмонов по энергиям в большую сторону, относительно справочных данных, и, уширение пиков потерь на этапах осаждения Si. Пики потерь с энергиями 8 и 9 эВ свидетельствуют о начале процесса силицидообразования.

На спектрах образца сформированного, при 210 °С, полученных после формирования первого слоя Mg, наблюдаются пики потерь с энергиями в районе 7,8 и 20,5 эВ, которые также соответствуют возбуждению поверхностного и объемного плазмонов. На 5 и 6 слоях Si наблюдается сильный сдвиг по энергиям в большую сторону относительно буферного слоя Si, 13 и 26,5 эВ для поверхностных и объемных плазмонов соответственно.

В результате проведенных послойных ростовых экспериментов с применением метода реактивной эпитаксии были получены 3 тонкие пленки толщиной по 120 нм, исследованные методами спектроскопии характеристических потерь энергии электронами и оже-спектроскопии. Анализ спектров оже-электронов показал, что тонкие пленки всех сформированных образцов содержат в своем составе атомы Mg и Si. Из результатов анализа спектров характеристических потерь энергии электронами установлено наличие силицидообразования у образцов, сформированных при температуре 200 °С и 205 °С.

ЛИТЕРАТУРА

1. Galkin N. G., Galkin K. N., Vavanova S. V. Multilayer Si (111) / Mg₂Si clusters / Si heterostructures: formation, optical and thermoelectric properties // E-journal of Surface Science and Nanotechnology. 2005. V. 3. P. 12-20.
2. Probing the Mg₂Si/Si (111) heterojunction for photovoltaic applications /A. Shevlyagin [et al.] // Solar Energy. 2020. V. 211. P. 383-395.
3. Mg₂Si is the new black: introducing a black silicide with 95 % average absorption at 200–1800 nm wavelengths / A. Shevelagin, V. Yaschemenko, A. Kuchmuzhar, A. Sergeev, E. Mitsai // Applied surface science. 2022.
4. Fabrication of Mg₂Si pn-junction Photodiode with Shallow Mesa-structure and Ring Electrode / T. Akiyama, N. Hori, S. Tanigawa, D. Tsuya, H. Udono // 011102 JAP Conf. Proc. 2017. V. 5. P. 011102.
5. Дубов В. Л., Фомин Д. В. BaSi₂ - перспективный материал для фотоэлектрических преобразователей // Успехи прикладной физики. 2016. Т. 4. № 6. С. 599-605.
6. Галкин Н. Г., Галкин Л. Н., Маслов А. М. Формирование, структура и оптические свойства многослойных материалов на основе кремния и наноразмерных кластеров Mg₂Si // Вестник ДВО РАН. 2005. № 6. С. 12-22.
7. 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 / D. L. Goroshko, N. G. Galkin, A. S. Gournik [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. 2009. V. 21. No 43. P. 435801.
8. Handbook of auger electron spectroscopy / Lawrence E. Davis, Noel C. MacDonald, Paul W. Palmberg, Gerald E. Riach, Roland E. Weber // Physical Electronics Industries, Inc. February, 1976.
9. 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.
10. Лифшиц В. Г., Луняков Ю. В. Спектры ХПЭЭ поверхностных фаз на кремнии. Владивосток: Дальнаука, 2004. 315 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОХОЖДЕНИЯ ПОТОКА ПРОТОНОВ И ЭЛЕКТРОНОВ С РАЗЛИЧНЫМИ ЧАСТИЦАМИ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

В. Ю. Юрина^{1,2}, В. В. Нещименко^{1,2}

¹ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет», Благовещенск

²ФГБОУ ВО «Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники»
Томск, e-mail: viktoriy-09@mail.ru

В данной работе представлены результаты моделирования прохождения протонов и электронов с энергией 100 кэВ на объемные и полые частицы оксида алюминия в программных комплексах «SRIM» и «Casino» v.3.2. Размер объемной частицы Al_2O_3 составляет 3 мкм, размер полый частицы Al_2O_3 – 900 нм с толщиной стенки 50 нм. Результат моделирования показало, что длина свободного пробега в полых частицах больше по сравнению с объемными частицами в 10 раз при воздействии протонами и 2,4 раза при воздействии электронами.

Под действием различных видов излучений в исследуемых материалах происходят акты реакционных столкновений на поверхности, вероятны процессы образования электронно-возбужденных квазимолекулярных частиц. Такие нарушения структуры приводят к образованию центров окраски, которые уменьшают отражательную способность оксида алюминия по всему спектру от края основного поглощения и до ближней ИК-области. Варьируя площадь удельной поверхности частиц возможно изменить конфигурацию образующихся центров поглощения и их распределение в толще материала, что приведет к изменению отражательной способности материала после воздействия ионизирующих излучений [1]. Моделирование воздействия ионизирующего излучения помогает увидеть для каких материалов (состоящих из полых или объемных частиц) пропускная способность будет выше, т.е. образование дефектов на поверхности сводится к минимуму. Чем глубже в материал проникнут потоки протонов или электронов, тем меньше будут изменения оптических свойств на наблюдаемой поверхности.

В данной работе представлены результаты моделирования прохождения протонов и электронов с энергией 100 кэВ на объемные и полые частицы оксида алюминия в программных комплексах «SRIM» и «Casino» v. 3.2.

Для проведения моделирования прохождения потока протонов с полыми и сплошными объемными частицами Al_2O_3 был использован программный комплекс «SRIM», название которого является аббревиатурой: «The Stopping and Range of Ions in Matter». В комплекс также входит «TRIM» «Transport of Ions In Matter» [2]. Он позволяет непосредственно задавать параметры и осуществлять моделирование необходимых процессов взаимодействия ионов с различными соединениями. Существуют ограничения, фактически моделируется прохождение пучка протонов через отдельные слои, а не сферы в целом. Тем не менее, слои представляют собой сечение сферы через ее центр, программа позволяет рассмотреть траекторию движения в шести плоскостях. Моделирование основано на применении метода Монте-Карло. Расчеты (смещения и каскада смещений) производятся по модели Кинчина и Пиза. Данная модель базируется на трех основных положениях: нет аннигиляции частиц, столкновение является упругим, расположение атомов в мишени не является случайным.

Для проведения моделирования прохождения потока электронов с объемными частицами, полыми сферами Al_2O_3 было использовано программное средство, «Casino» v. 3.2. Название программы представляет собой аббревиатуру, «*monte Carlo Simulation of electron trajectory in sOlids*». Метод Монте-Карло, вернее группа методов, позволяют моделировать случайные величины и процессы, численно интегрировать и решать интегральные уравнения второго рода [3].

Условия моделирования прохождения протонов в программном комплексе «SRIM»: энергия протонного пучка – 100 кэВ, диаметр протонного пучка – 1 нм, число бомбардирующих протонов – 10^4 , угол падения – 90° , число одновременно отображаемых траекторий – 1000, возникновения вторичного излучения нет, вещество материала – Al_2O_3 , размер объемной частицы составляет 3 мкм, размер полый частицы составляет 900 нм с толщиной стенки 50 нм, вещество внутри сферы при моделировании – газ O_2 .

Условия моделирования прохождения электронов в программном комплексе «Casino» v. 3.2.: Энергия электронного пучка – 100 кэВ, диаметр электронного пучка – 1 нм, число бомбардирующих протонов – 10^4 , угол падения - 90° , число одновременно отображаемых траекторий – 200, возникновения вторичных электронов нет, вещество материала – Al_2O_3 , размер сплошной частицы составляет 3 мкм, размер полый частицы составляет 900 нм с толщиной стенки 50 нм, общее число сфер при моделировании – 6.

На рис. 1 представлены результаты моделирования взаимодействия протонов с объемными микрочастицами (рис. 1, а) и полых частиц (рис. 1, б) оксида алюминия.

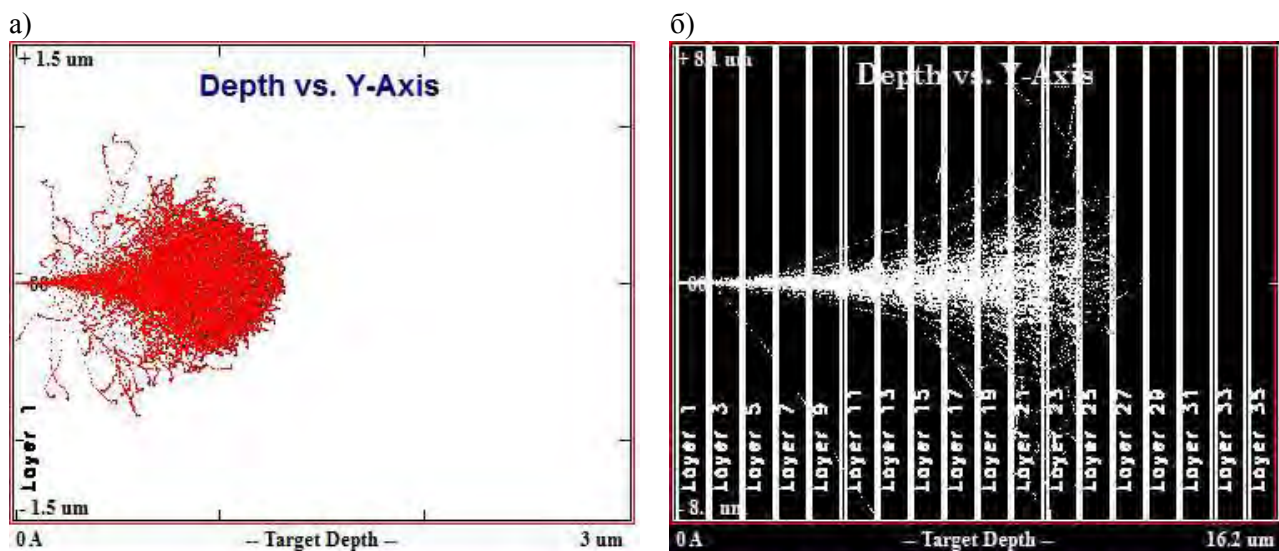


Рис. 1. Пробег протонов в микрочастице оксида алюминия размером 3 мкм (а). Пробег протонов в ансамбле из полых частиц оксида алюминия диаметром 900 нм с толщиной стенки 50 нм (б)

Анализ взаимодействия протонов показал, что глубина проникновения протонов с энергией 100 кэВ в объемной микрочастице (размер 3 мкм) достигает $\sim 1,3\text{--}1,35$ мкм, следовательно, радиационные дефекты сосредоточены в поверхностном слое. В полых частицах оксида алюминия протоны проникли на глубину 14 плотно упакованных полых частиц, что соответствует глубине проникновения на 145 мкм, что глубже чем слой материала, который обеспечивает регистрируемые оптические свойства.

Casino предоставляет информацию о траектории электронов, примерное значение энергии в каждой точке траектории. Рассмотрим, как изменяется траектория движения частицы, а также ее энергия на протяжении пути. На рис. 2, а и 2, б представлены траектории движения электронов после взаимодействия с мишенью в виде заполненной сферы Al_2O_3 с диаметром 3 мкм и полый сферы Al_2O_3 с диаметром 900 нм и толщиной стенок 50 нм.

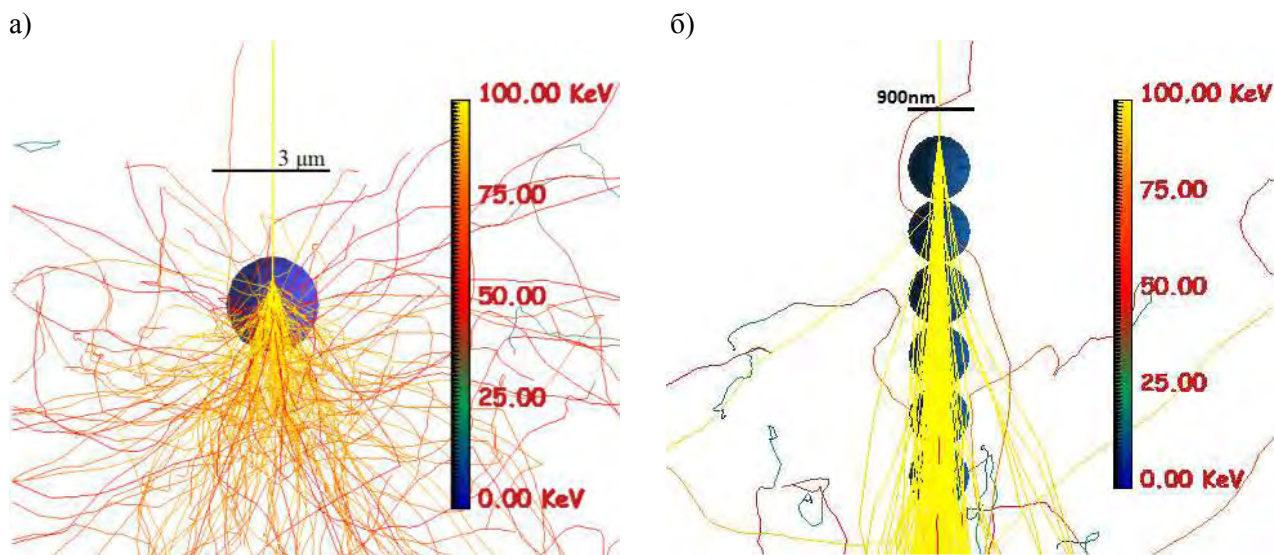


Рис. 2. Траектория электронов: а) после попадания в мишень, частица Al_2O_3 размером 3 мкм, б) после попадания в мишень, полая сфера Al_2O_3 900 нм с толщиной стенок 50 нм

Как видно, сплошные частицы с размером 3 мкм не эффективны, так как внутри материала задерживаются ионизирующие частицы, что приводит к образованию большой концентрации радиационных дефектов по сравнению с полыми частицами, в которых глубина пробега электронов больше.

Моделирование прохождения протонов и электронов с энергиями 100 кэВ на объемные и ансамбль полых частиц оксида алюминия показало, что длина свободного пробега в полых частицах больше по сравнению с объемными частицами в 10 раз при воздействии протонами и 2,4 раза при воздействии электронами.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (регистрационный номер научного проекта 122082600014-6).

ЛИТЕРАТУРА

1. Yurina V. Y., Neshchimenko V. V., Chundong L. Optical properties and radiation stability of Al_2O_3 microparticles, nanoparticles and microspheres // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2020. V. 14. № 2. P. 253-259.
2. Biersack J. P., Haggmark L. G. A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets // Nuclear Instruments and Methods. 1980. V. 174 (1-2). P. 257-269.
3. Михайлов Г. А., Войтишек А. В. Методы Монте-Карло (расширенный лекционный курс) : учебник. Новосибирск: НГУ, Кафедра вычислительной математики. 2011. 246 с.

УДК 546.02

**КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ КОЭФФИЦИЕНТАМИ ОТРАЖЕНИЯ
И ЗНАЧЕНИЯМИ ПОРИСТОСТИ СЛОЕВ МЕЗОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ
С РАЗЛИЧНОЙ МОРФОЛОГИЕЙ ПОВЕРХНОСТИ**

Н. Г. Галкин¹, Д. Т. Ян², К. Н. Галкин¹, А. В. Непомнящий¹

¹ФГБУН «Институт автоматики и процессов управления» ДВО РАН, Владивосток

²ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
Хабаровск, e-mail: dmitry_yan@mail.ru

Предложен способ оценки пористости слоев мезопористого кремния (мезо-ПК) из спектров отражения в области видимого и ближнего ИК-излучения на основе интерференционного метода с установленной толщиной пленки мезо-ПК и использования известной в литературе диаграммы пористость – бездисперсионный показатель преломления пористого кремния. Показано, что для расчета бездисперсионного показателя преломления необходимо использовать только пики максимумов и минимумов в интерференционной картине в диапазоне длин волн (450-900 нм). На основе спектров отражения образцов мезопористого кремния (мезо-ПК) с интерференционными особенностями в видимом и ближнем ИК-диапазоне и толщин по данным СЭМ-изображений их поперечных сколов проведена оценка значений показателей преломления. Обнаружено, что картины интерференции в слое мезо-ПК наблюдаются в ограниченном диапазоне толщин и со слабо развитой морфологией. В диапазоне толщин слоев пористого кремния до 6.5 мкм пористость возрастает при увеличении плотности тока анодирования и сохранении времени анодирования. При пористости слоя мезо-ПК ниже 20 % и значительных шероховатостях при толщине слоя мезо-ПК от 14.2 мкм и выше в спектрах отражения в видимом и ближнем ИК-диапазоне интерференционные особенности не появляются.

Открытие явления видимой фотолюминесценции пористого кремния (ПК) [1] определило развитие кремниевой фотоники в новых направлениях, среди которых можно выделить светоизлучающие структуры [2–7], фотонные кристаллы [8], фотодетекторы [9], антиотражающие покрытия для солнечных элементов [10] и ряд других. Вместе с тем, прогресс в развитии новых направлений в значительной степени зависит от физических и морфологических свойств пористого кремния, воспроизводимости его характеристик. Одной из важных характеристик пористого кремния является пористость. Используемые в настоящее время методы газовой и жидкостной порометрии [11] имеют существенные недостатки, такие, как загрязнение образцов при измерении, необходимость значительных затрат времени, получение информации лишь об открытых порах. При малых изменениях веса и толщины образца использование гравиметрического метода [12] и профилометра [13, 14] затруднительно и приводит к значительным расхождениям. Для определения показателя преломления используют эллипсометрию [15–17]. Также был предложен бесконтактный метод, основанный на измерении поглощения рентгеновских лучей, позволяющий получить более точные результаты [18]. Авторы статьи [19] провели расчет показателя преломления слоев пористого кремния в рамках модели эффективной двухкомпонентной среды, состоящей из кремния и пор. Для определения параметров слоя применялась многоугловая эллипсометрия. Исследователи обратили внимание на то, что изучение пористого кремния выбранным методом име-

ет особенности, связанные с несовершенством границы «пористый кремний-подложка» и неоднородностей в слое ПК, которые вносят погрешности, как в процесс регистрации оптического сигнала, так и на результаты расчетов. Анализ оптических характеристик проводился в соответствии с моделью Бруггемана [20], согласно которой пористый кремний в результате окисления состоит из 3 компонент: кремния, оксида кремния и пор. Уравнение Бруггемана [20] имеет следующий вид:

$$F(f - x) + G \cdot 2,27x + V(1 - f - 1,27x) = 0, \quad (1)$$

где F , G , V – функции, связанные с показателями преломления кремния, оксида кремния и пористого кремния, соответственно, а f и x – объемные доли кремния и оксида кремния.

Авторы статьи [19] определили объемные доли оксида кремния x для известных значений n из соотношения:

$$x = \frac{fF + (1-f)V}{F + 2,27G + 1,27V}. \quad (2)$$

В соответствии с измерениями значений n методом эллипсометрии и рассчитанных значений пористости слоев была определена графическая зависимость между пористостью слоя и показателем преломления ПК [19].

Вышеизложенное приводит к выводу о том, что применение бесконтактных методов (в частности, оптических) для определения пористости слоев кремния в дальнейшем является более перспективным, так как они не взаимодействуют с веществом и являются неразрушающими.

Целью представленной работы явилось установление взаимосвязи между коэффициентом отражения, коэффициентом преломления и показателем пористости для слоев мезопористого кремния с различной морфологией для определения пористости слоев кремния.

Предлагаемый метод может рассматриваться как экспресс-метод для оценки пористости тонких слоев, получаемых анодированием с различной плотностью тока и длительностью анодирования.

Для получения мезопористого кремния был использован двухсторонне полированный монокристаллический кремний p -типа с ориентацией (100) и удельным сопротивлением 1-2 Ом·см. На обратную сторону подложки осаждали в вакууме при комнатной температуре слой алюминия толщиной 15 нм.

Значения толщин слоев для поперечного скола пористого кремния определялись с использованием сканирующего электронного микроскопа Hitachi S-3400. Спектры отражения образцов мезо-ПК регистрировались в диапазоне 200-900 нм на спектрометре Hitachi U-3010 с интегрирующей сферой, а в диапазоне длин волн 900-25000 нм – на Фурье-спектрофотометре Bruker Vertex 80v.

Углы падения света на образец составляли 7° для Hitachi U-3010 и 11° – для Bruker Vertex 80v.

В результате анодного травления монокристаллического кремния p -типа проводимости в растворе концентрированной фтористоводородной кислоты и изопропилового спирта (1:1) при плотности тока 10 мА/см² [21] и продолжительности травления 10, 15 и 30 минут получены образцы (образцы 3-1, 3-5 и 3-6, соответственно) с различной толщиной пористого слоя. Дополнительно было проведено анодирование образца (3-3) с другой плотностью тока (20 мА/см²) в течение 20 минут.

Для первой серии образцов были определены значения толщин слоев для поперечного скола с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) (рис. 1). Видно, что слои пористого кремния состоят из вертикальных колонн с малой пористостью, поэтому их

можно квалифицировать как мезо-пористый кремний (мезо-ПК), имеющий достаточно резкую границу раздела с монокристаллической подложкой.

Невысокий контраст изображений связан с зарядкой слоев мезо-ПК электронным пучком при длительном сканировании в процессе регистрации изображения (рис. 1).

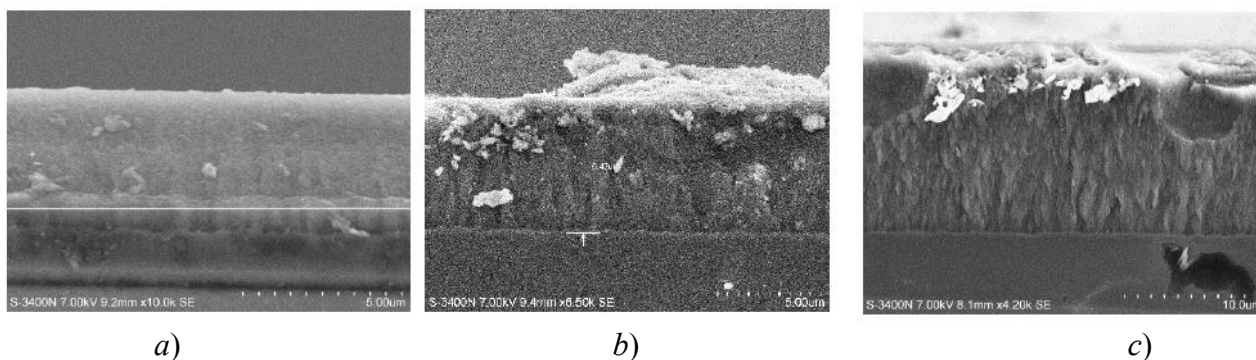


Рис. 1. СЭМ-изображения поперечных сколов образцов со слоями мезопористого кремния, полученных в результате анодного травления:
а) №3-1, $t = 10$ мин.; б) №3-5, $t = 15$ мин.; в) №3-6, $t = 30$ мин.

Зависимость значений толщины слоя пористого кремния от продолжительности анодного травления представлена на рис. 2.

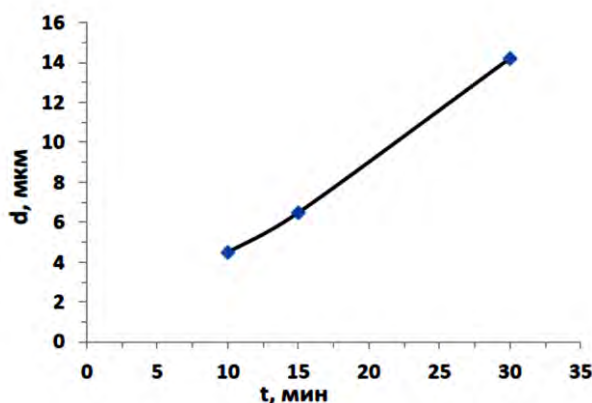


Рис. 2. Зависимость толщины слоя мезопористого кремния от продолжительности анодного травления при плотности тока 10 mA/cm^2

Видно, что наблюдается почти линейный рост толщины слоя мезопористого кремния с увеличением времени анодирования. Полученные значения толщин хорошо совпадают с данными для предполагаемых толщин с данной плотностью анодирования [21, 22]. Поскольку толщины слоев мезо-ПК изменяются от $4,48 \text{ мкм}$ до $14,2 \text{ мкм}$ (рис. 2), а подложка кремния является прозрачной в области длин волн больше $1,1 \text{ мкм}$, то следует ожидать появление интерференции от слоя мезо-ПК при длинах волн менее 2 мкм в спектрах отражения полученных двухслойных образцов.

По периоду интерференционной картины с известной толщиной слоя можно восстановить показатель преломления (бездисперсионный) слоя мезо-ПК.

Используя величину показателя преломления и анализ оптических характеристик пористого кремния в соответствии с моделью Бругемана [20] и данными работы [19], можно восстановить значение пористости слоя мезо-ПК.

Расчет значений показателя преломления для образцов ПК, полученных при различной продолжительности анодного травления, выполняли в соответствии с методикой, приведенной в [23] и учитывающей оптическую разность хода.

При нормальном падении света на пленку оптическая разность хода равна:

$$\Delta = 2dn \pm \frac{\lambda}{2}. \quad (3)$$

где n – бездисперсионный показатель преломления пленки, а d – ее толщина.

В случае падения света под углом α ($\alpha=7^\circ$ или 11° в используемых спектрофотометрах при разных диапазонах длин волн) соотношения между соседними максимумами и минимумами в спектре отражения с интерференционными особенностями имеют вид:

$$\Delta_{max} = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2\alpha} \pm \frac{\lambda_1}{2} = k\lambda_1; \quad (4)$$

$$\Delta_{min} = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2\alpha} \pm \frac{\lambda_2}{2} = k\lambda_2, \quad (5)$$

где α – угол падения света на пленку, а λ_1 и λ_2 – длины волн, соответствующие максимуму и минимуму в спектре отражения, соответственно.

После преобразования выражений (4) и (5) получим:

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2\alpha} = \frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1}. \quad (6)$$

Тогда показатель преломления определяется по формуле:

$$n = \sqrt{\sin^2\alpha + \left(\frac{\lambda_1\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1}\right)^2 \cdot \frac{1}{(2d)^2}}. \quad (7)$$

Расчеты бездисперсионного показателя преломления по формуле (7) проведем для всех анодированных образцов со слоями мезо-ПК из спектров отражения в ближнем и/или среднем ИК-диапазонах и определим величину пористости в соответствии с диаграммой, приведенной в статье [19]. Используем все различимые пары максимум – минимум в спектрах отражения для определения показателя преломления и оценки его среднеквадратичного отклонения. Результаты расчетов представим в таблице.

Расчетные величины показателя преломления, погрешности и оценка пористости для различных образцов ПК

Образец № / Sample no.	n	σ	ρ , %
3-1	-	-	-
3-3	1.20	0.12	56
3-5	3.19	0.04	20
3-6	-	-	-

На рис. 3 представлены спектры отражения образца №3-1 ($j = 10 \text{ мА/см}^2$, $t_{\text{тр}} = 10 \text{ мин}$, $d \approx 4.48 \text{ мкм}$) в видимом и ИК-диапазоне.

В спектре отражения образца №3-1 в видимом диапазоне характерной интерференции не наблюдается (рис. 3, *a*), что связано с достаточно высоким поглощением и малой пористостью данного слоя мезо-ПК в области видимого и ближнего ИК-излучения.

В пользу этого говорит достаточно высокий коэффициент отражения ($R = 0,16-0,18$) при длинах волн 600–900 нм (рис. 3, *a*), значения которого в два раза меньше, чем для объемного монокристаллического кремния [24].

Выраженные интерференционные особенности наблюдаются в спектре отражения в ИК-диапазоне в области длин волн 8–37 мкм (рис. 3, *b*), что свидетельствует об интерференции как в слое мезо-ПК, так и в модифицированном слое кремниевой подложки, поскольку оба

обладают прозрачностью в данном диапазоне волновых чисел, связанной с малым коэффициентом поглощения в кремнии, так и в мезо-пористом кремнии [1, 7, 22, 24].

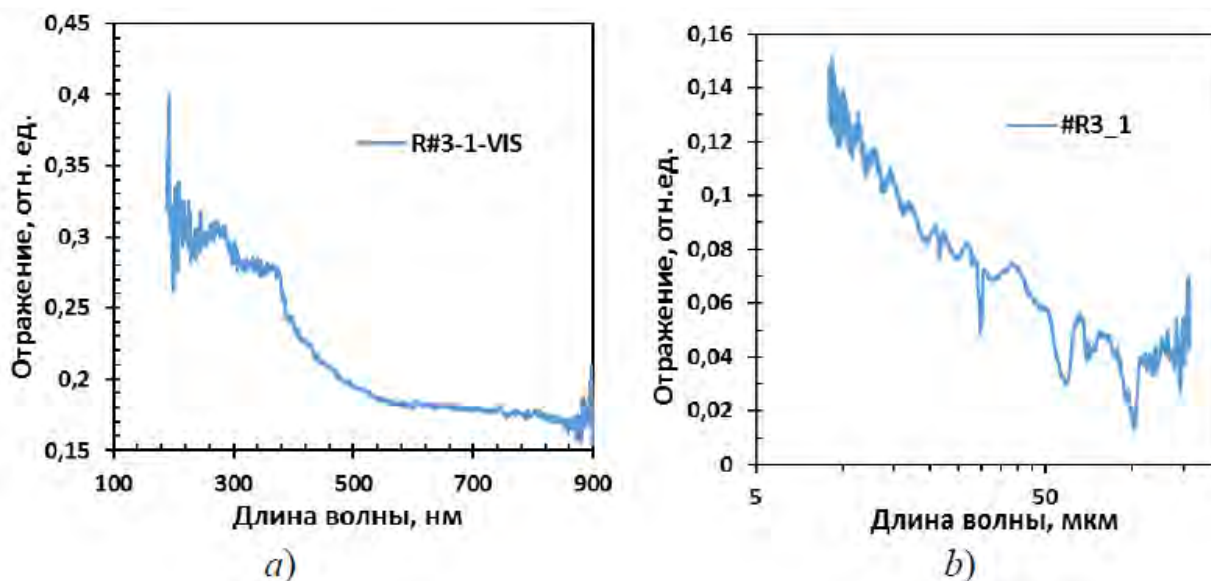


Рис. 3. Спектры отражения образца №3-1: в видимом (а) и инфракрасном (b) диапазонах длин волн

Это позволяет использовать формулу (5) для расчета показателя преломления для каждой из пяти пар максимумов и минимумов в спектре отражения в ИК-области при длинах волн 10–25 мкм (рис. 3, b), расчетов средней величины показателя преломления и возможной ошибки.

Использование толщины только слоя мезо-ПК по данным СЭМ-картин поперечного среза (рис. 1, a) показало крайне высокое и не реалистичное значение показателя преломления ($n_0 = 13.9$), что свидетельствует о наличии в кремниевой подложке после анодного травления некоторого модифицированного слоя с несколько меньшей величиной бездисперсионного показателя преломления по сравнению с монокристаллическим кремнием ($n_0 = 3.42$ [24]) и толщиной примерно в 4 раза большей, чем толщина мезо-ПК. Только в этом случае может наблюдаться интерференция в указанном диапазоне длин волн (рис. 3, b).

Следовательно, основной вклад в интерференцию в области среднего ИК-диапазона вносит модифицированный слой кремниевой подложки, а не слой мезо-ПК.

Отражение в ближней ИК-области, отображает вклад слоя мезо-ПК, но его пористость достаточно мала (менее 10 % [19]), что незначительно повышает прозрачность слоя мезо-ПК и не приводит к формированию интерференции в нем.

На рис. 4 представлены спектры отражения образца №3-5 ($j = 10 \text{ mA/cm}^2$, $t_{\text{тр}} = 15 \text{ мин}$, $d \approx 6,5 \text{ мкм}$) в видимом и ИК-диапазоне.

Поскольку, исходя из данных на рис. 2, после 15 минут анодирования увеличилась толщина слоя мезопористого кремния в образце №3-5, и, по-видимому, его пористость, то интерференционные особенности в спектре отражения начали наблюдаться уже в ближнем ИК-диапазоне длин волн (700–900 нм, рис. 4, a).

В среднем и дальнем ИК-диапазонах (рис. 4, b) также наблюдаются интерференционные особенности от 9 мкм до 18 мкм.

При переходе от среднего к дальнему ИК-диапазону (более 20 мкм) в спектре отражения также появляются пики, связанные с поглощением на оптических фонах, как в работе [21]. Расчеты коэффициента преломления слоя мезо-ПК были проведены для максимумов и минимумов в спектре отражения в ближнем ИК-диапазоне по шести парам максимумов и минимумов (716–853 нм, рис. 4, a).

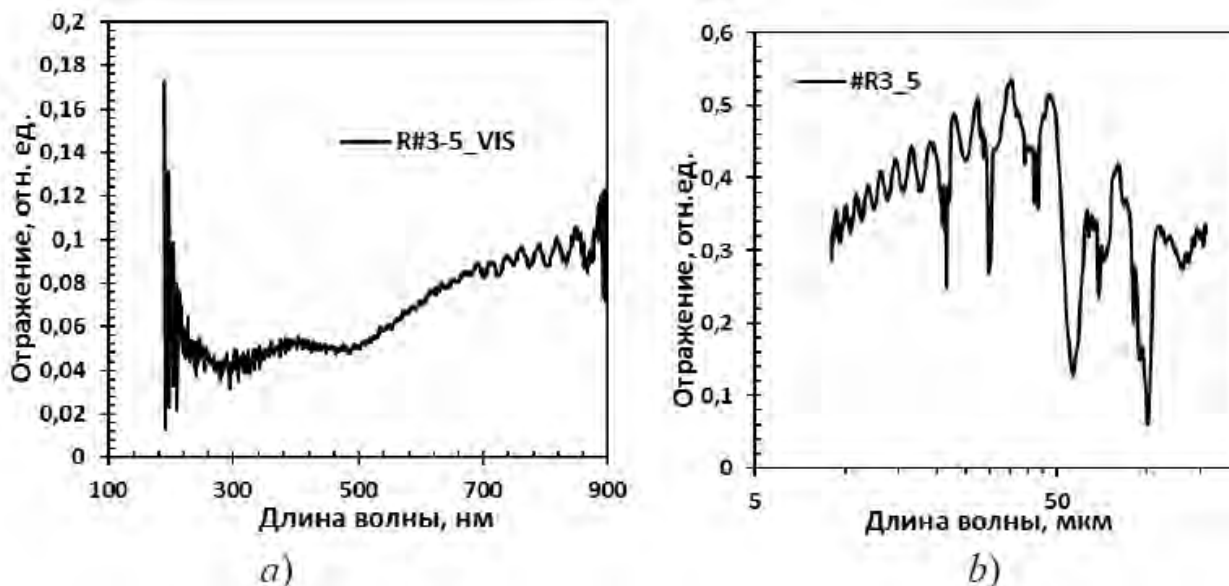


Рис. 4. Спектры отражения образца №3-5: в видимом (а) и инфракрасном (б) диапазонах длин волн

Определенные значения среднего показателя преломления и его среднеквадратичного отклонения показаны в таблице.

Полученные значения показателя преломления позволили определить величину пористости в слое мезо-ПК в образце №3-5 из диаграммы в работе [19]: 20 % (таблица).

Расчеты по интерференционным особенностям в среднем ИК-диапазоне (9–18 мкм, рис. 4, б) показали, что основной вклад, как и для образца №3-1 (рис. 3, б), вносит модифицированный слой кремниевой подложки, а не слой мезо-ПК, который полностью прозрачен.

В этом случае отражение определяется в основном модифицированным слоем кремниевой подложки с уменьшенным без дисперсионным показателем преломления, а величина коэффициента отражения $R = 0.3–0.5$ (рис. 4, б) сопоставима с отражением от монокристаллического кремния в этом диапазоне длин волн [24].

На рис. 5 представлены спектры отражения в видимом и ближнем, среднем и дальнем ИК-диапазонах для образца №3-6, сформированного при следующих режимах анодирования: $j = 10 \text{ mA/cm}^2$ и $t_{\text{ap}} = 30 \text{ мин}$.

Согласно данным СЭМ (рис. 1, с), толщина слоя мезопористого кремния при данном режиме анодирования равна 14,2 мкм.

В видимом и ближнем ИК-диапазоне длин волн (рис. 5, а) наблюдаются слабые колебания в спектре отражения (выше 700 нм), которые связаны с началом интерференционных особенностей, но определить их период не представляется возможным из-за ограничения диапазона использованного спектрофотометра.

В среднем и дальнем ИК-диапазоне интерференционные особенности также отсутствуют (рис. 5, б) и сильно уменьшается величина коэффициента отражения, что определяется потерями на отражение при неоднородном рельефе поверхности слоя мезо-ПК и срывом интерференционного сложения за счет отсутствия плоской границы раздела в верхнем слое мезо-ПК.

Данные потери приводят к снижению коэффициента отражения до 6–8 % в видимом и ближнем ИК-диапазоне длин волн (рис. 5, а) и в среднем и дальнем ИК-диапазоне длин волн до 0.5–2 % (рис. 5, б).

Для столь толстых и развитых поверхностей уже нельзя применять методику оценки коэффициента преломления по формуле (7) (см. таблицу).

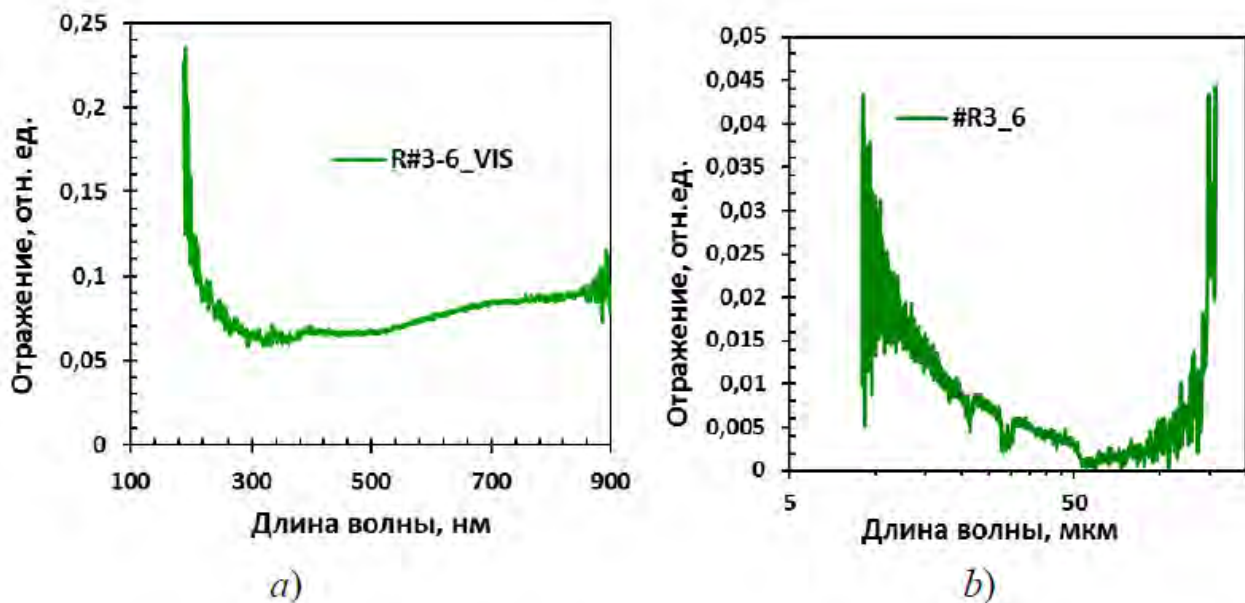


Рис. 5. Спектры отражения образца №3-6: в видимом (а) и инфракрасном (б) диапазонах длин волн

В результате анодного травления был подготовлен образец №3-3 мезопористого кремния при плотности анодного тока $j = 20 \text{ mA/cm}^2$ и времени анодирования 10 минут.

На рис. 6, а, б представлены спектры отражения образца №3-3 в видимом и ближнем ИК-диапазоне и в среднем и дальнем ИК-диапазоне, а на рис. 7 – СЭМ-изображение его поперечного скола.

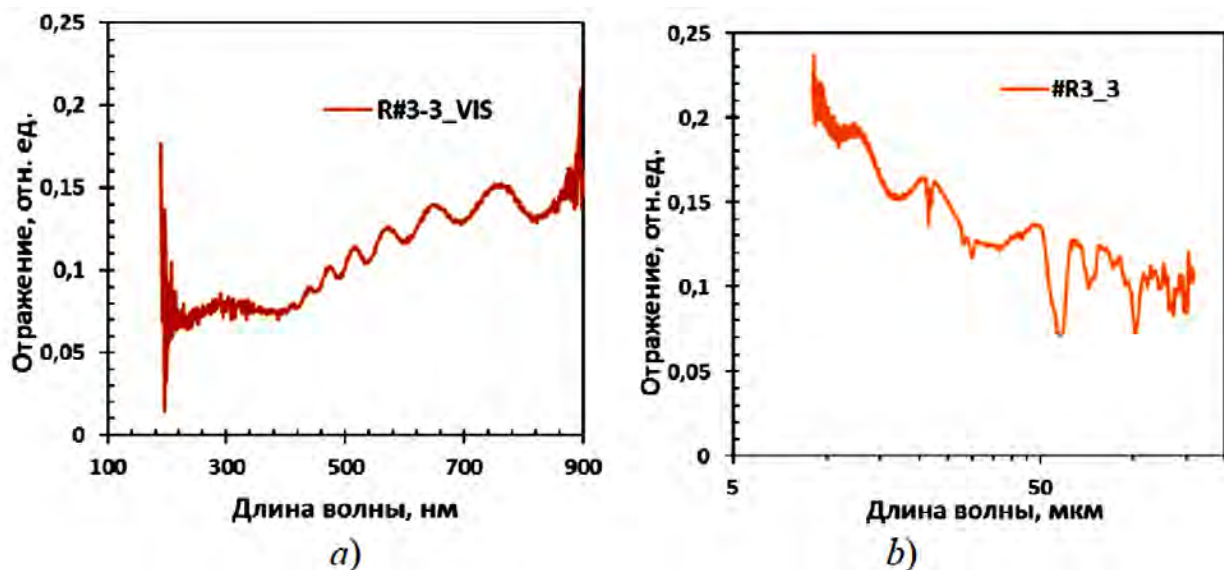


Рис. 6. Спектры отражения образца №3-3: в видимом (а) и инфракрасном (б) диапазонах длин волн

Из рис. 7 видно, что толщина слоя мезопористого кремния составляет 5.6 мкм. Полученное значение толщины меньше планируемого (около 8.5 мкм) для плотности тока 10 mA/cm^2 (рис. 2).

Известно, что увеличение плотности тока при анодировании приводит к увеличению пористости [25, 26], но данных о влиянии на толщину слоя не обнаружено.

Анализ поперечного скола образца №3-3 (рис. 7) с поперечным срезом образца №3-5 с близким временем анодирования (рис. 1, б) показал увеличение шероховатости поперечного скола, что соответствует изменению его пористости.

В спектре отражения образца №3-3 в видимом и ближнем ИК-диапазонах наблюдается вхождение в интерференционные максимумы и минимумы при 450 – 850 нм (рис. 6, *a*), которые, как и для образца №3-5 (рис. 4, *a*) свидетельствуют о периодическом сложении и вычитании световых волн от верхнего слоя мезо-ПК и его границы раздела с кремнием, несмотря на определенную повышенную шероховатость верхнего слоя мезо-ПК (рис. 7), которая связана с формированием слоя с повышенной пористостью и некоторой неоднородностью.

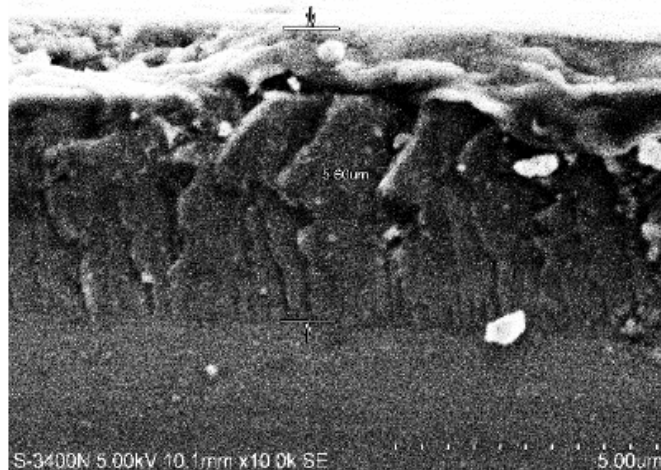


Рис. 7. СЭМ-изображение поперечного скола образца № 3-3 пористого кремния, полученного в результате анодного травления ($j=20$ мА/см², $t = 10$ мин., $d = 5,6$ мкм)

Такой нарушенный поверхностный слой обычно существует и характеризуется толщиной от 20 до 200 нм и более в зависимости от времени анодирования и плотности тока анодирования [27, 28]. Но такая толщина не может оказывать заметное влияние на интерференцию в слое мезо-ПК толщиной 6.5 мкм.

В среднем и дальнем ИК-диапазонах длинах волн (8–50 мкм) (рис. 6, *b*) наблюдаются слабые интерференционные особенности, которые связаны с началом интерференции не в слое мезо-ПК, а в модифицированном слое монокристаллического кремния толщиной около 7,5 мкм, если использовать оценку по формуле (7).

Используя формулу (7) для пяти пар максимумов и минимумов в спектре отражения в видимом и ближнем ИК-диапазоне (рис. 6, *a*) был проведен расчет бездисперсионного показателя преломления (n). По пяти полученным величинам n рассчитали среднюю величину ($n_0 = 1,2$) и среднеквадратичную ошибку ($\sigma = 0,12$), которые представлены в таблице.

Полученные значения бездисперсионного показателя преломления позволили определить величину пористости в слое мезо-ПК в образце №3-3 из диаграммы в работе [19], которая составила 56 % (таблица).

Исследования спектров отражения образцов со слоями мезопористого кремния с толщинами от 4.5 мкм до 14.2 мкм показали, что интерференционные особенности от слоя мезо-ПК всегда появляются в видимой и ближней ИК-области света, если его толщины находятся в диапазоне 4,0-6.5 мкм и пористость слоя составляет от 20 до 60 %.

Поэтому для расчета бездисперсионного показателя преломления необходимо использовать только пики максимумов и минимумов в интерференционной картине в диапазоне длин волн (450–900 нм).

Интерференция, обнаруженная в спектрах отражения в области среднего и дальнего ИК-диапазона (9–30 мкм), не связана с интерференцией в слое мезо-ПК, а относится к более толстому (от единиц до одного-двух десятков микрон) слою в кремниевой подложке, у которого после анодного травления несколько уменьшается без дисперсионный коэффициент преломления.

Без таких изменений в подложке толщиной 350 мкм никакие интерференционные особенности до длины волны в 150 мкм не наблюдаются. При толщинах мезопористого кремния более 10 мкм сильно возрастает неоднородность поверхности, а также границы раздела с монокристаллическим кремнием, что нарушает условия возникновения интерференции и ограничивает возможность корректных расчетов показателя преломления, а значит и определения его пористости.

При малой пористости слоев мезо-ПК или присутствии нарушенного слоя достаточной толщины в спектре отражения в видимом и ближнем-ИК диапазоне не появляются интерференционные пики, что не позволяет провести оценку его толщины и пористости бесконтактным способом. Увеличение плотности тока анодирования с $j = 10 \text{ мА/см}^2$ до $j = 20 \text{ мА/см}^2$ при неизменной длительности (10 минут) приводит к существенному увеличению пористости слоя мезо-ПК с 20 % до 56 %.

Предложен способ оценки пористости слоев ПК из спектров отражения в области видимого и ближнего ИК-излучения на основе интерференционного метода и использования известной в литературе [19] диаграммы пористость – бездисперсионный показатель преломления пористого кремния.

Из полученных результатов сделан вывод о том, метод может быть использован только при значениях толщины ПК не более 7 мкм и пористостью от 20 % и выше, для которых возможна оценка пористости по спектрам отражения. В случае больших значений толщины ПК (14 мкм и выше) данный способ не может быть использован за счет резкого развития рельефа верхнего слоя мезо-ПК и срыва интерференции в его слое в видимом и ближнем ИК диапазоне.

Установлено, что пористость возрастает с двукратным увеличением плотности тока анодирования при постоянном времени процесса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Canham L. T. Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers // *Applied Physics Letters*. 1990. Vol. 57. Iss. 10. P. 1046-1048. <https://doi.org/10.1063/1.103561>.
2. Strong enhancement and long-term stabilization of porous silicon photoluminescence by laser irradiation / M. Fujiwara, T. Matsumoto, H. Kobayashi, K. Tanaka, N. Happo, K. Horii // *Journal of Luminescence*. 2005. Vol. 113. Iss. 3-4. P 243-248. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2004.10.020>.
3. Observations on the surface and bulk luminescence of porous silicon / D. T. Jiang, I. Coulthard, T. K. Sham, J. W. Lorimer, S. P. Frigo, X. H. Feng, R. A. Rosenberg // *Journal of Applied Physics*. 1993. Vol. 74. Iss. 10. P. 6335-6340. <https://doi.org/10.1063/1.355156>.
4. Kim H., Hong C., Lee C. Enhanced photoluminescence from porous silicon passivated with ultrathin aluminum film // *Material Letters*. 2009. vol. 63. Iss. 3-4. P. 434-436. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2008.11.004>.
5. Koyama H. Strong photoluminescence anisotropy in porous silicon layers prepared by polarized light-assisted anodization // *Solid State Communications*. 2006. Vol. 138. Iss. 12. P 567-570. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2006.05.002>.
6. Enhanced luminescence from porous silicon nanowire arrays / Zhang C., Li C Liu Z., Zheng G., Xue C., Zuo Y., Cheng B., Wang Q. // *Nanoscale Research Letters*. 2013. Vol. 8. Iss. 1. P. 277-280. <https://doi.org/10.1186/1556-276X-8-277>.
7. Галкин Н. Г., Ян Д. Т. Механизмы видимой электролюминесценции в диодных структурах на основе пористого кремния. Обзор // *Оптика и спектроскопия*. 2017. Т. 122. № 6. С. 960-968. <https://doi.org/10.7868/S0030403417050075>.
8. Гигантская вторая гармоника в микрорезонаторах на основе фотонных кристаллов пористого кремния / Т. В. Долгова, А. И. Майдыковский, М. Г. Мартемьянов, Г. Маровский, Дж. Маттеи, Д. Шумахер, В. А. Яковлев, А. А. Федянин, О. А. Акципетров // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2001. Т. 73. № 1. С. 8-12.

9. Rossi A. M., Bohn H. G. Photodetectors from porous silicon // *Physica Status Solidi A*. 2005. Vol. 202. Iss. 8. P. 1644-1647. <https://doi.org/10.1002/pssa.200461209>.
10. Tsujino K., Matsumura M., Nishimoto Y. Texturization of multicrystalline silicon wafers solar cells by chemical treatment using metallic catalyst // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2006. Vol. 90. Iss. 1. P. 100-110. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2005.02.019>.
11. Плаченов Т. Г., Колосенцев С. Д. Порометрия. Л.: Химия, 1988. 176 с.
12. Завадский С. А., Бондаренко А. В. Гравиметрические методы определения пористости анодно обработанного кремния // *Доклады Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники*. 2017. № 8(110). С. 21-25.
13. Porosity and pore size distributions of porous silicon layers / Herino R., Bomchil G., Barla K., Bertrand C., Ginoux J. L. // *Journal of Electrochemical Society*. 1996. Vol. 134. Iss. 8. P. 1994-2000. <https://doi.org/10.1149/1.2100805>.
14. Optical studies of the structure of porous silicon films formed in p-type degenerate and non-degenerate silicon / Pickering C., Beale M. I., Robbins D. I., Pearson P. I., Greef R. J. // *Journal of Physics C Solid State Physics*. 1984. Vol. 17. Iss. 35. P. 6535-6552. <http://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/17/35/020>.
15. Stable photoluminescence and electroluminescence from porous silicon / Faucher P. M., Tsybekov L., Duttagupta S. P., Hirschman K. D. // *Thin Solid Films*. 1998. Vol. 297. Iss. 1-2, P. 254-260. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(96\)09438-2](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(96)09438-2).
16. Atmospheric impregnation of porous silicon at room temperature / Canham L. T., Houlton M. R., Leong W. Y., Pickering C., Keen J. M. // *Journal of Applied Physics*. 1991. Vol. 70. Iss. 1. P. 422-431. <https://doi.org/10.1063/1.350293>.
17. In situ spectroscopic ellipsometric investigation of vacuum annealed and oxidized porous silicon layers / Fried M., Wormeester H., Zoethout E., Lohner T., Polgar O., Barsony I. // *Thin Solid Films*. 1998. Vol. 313-314. Iss. 1. P. 459-463. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(97\)00864-X](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(97)00864-X).
18. Ратников В. В. Определение пористости синтетических опалов и пористого кремния Рентгеновским методом // *Физика твердого тела*. 1997. Т. 39, № 5. С. 956-958.
19. Изменение параметров и состава тонких пленок пористого кремния в результате окисления. Эллипсометрические исследования / Е. В. Астрова, В. Б. Воронков, А.Д. Ременюк, В. А. Толмачев, В. Б. Шуман // *Физика и техника полупроводников*. 1999. Т. 33. Выпуск 10. С. 1264-1270.
20. Aspnes D. E., Theeten J. B. Dielectric function of Si-SiO₂ and Si-Si₃N₄ mixtures // *Journal of Applied Physics*. 1979. Vol. 50. Iss. 7. P. 4928-4935. <https://doi.org/10.1063/1.325596>.
21. Воздействие погружения слоев пористого кремния в водные растворы бромида лития и нитрата железа на стабильность и интенсивность фотолюминесценции / Н. Г. Галкин, Д. Т. Ян, К. Н. Галкин, Е. А. Чусовитин, М. В. Боженко // *Химическая физика и мезоскопия*. 2018. Т. 20, № 2. С. 188-201.
22. Галкин Н. Г., Ян Д. Т., Галкин К. Н., Чусовитина С. В. Влияние типа поверхностных связей в мезопористом кремнии на кинетику его фотолюминесценции при длительном хранении // *Химическая физика и мезоскопия*. 2020. Т. 22, № 2. С. 143-154. <https://doi.org/10.15350/17270529.2020.2.14>.
23. Ландсберг Г. С. Оптика : учебное пособие для вузов. 7 изд. М.: Физматлит, 2017. 852 с.
24. Pankov J. I. *Optical Processes in Semiconductors*. Dover Books on Physics. 2nd Revised ed. Edition. New York, 2010.
25. Effect of etching current density on microstructure and NH₃ – sensing properties of porous silicon with intermediate-sized pores / Li M., Hu M., Zeng P., Ma S., Yan W., Qin Y // *Electrochimica Acta*. 2013. Vol. 108. P. 167-174. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2013.06.106>.
26. Kulathuraan K., Mohanraj K., Natarajan B. Structural, optical and electrical characterization of nanostructured porous silicon: Effect of current density // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2016. Vol. 152. P. 51-57. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2015.07.055>.
27. Chamard V., Dolino G., Muller F. Origin of parasitic surface film on p+ type porous silicon // *Journal of Applied Physics*. 1998. Vol. 84. Iss. 12. P. 6659-6666. <https://doi.org/10.1063/1.369041>.
28. Photoluminescence change of As-prepared and aged porous silicon with NaOH treatment / Fukuda Y., Zhou W., Furuya K., Suzuki H // *Journal Electrochemical Society*. 1999. Vol. 146. Iss. 7. P. 2697-2701. <https://doi.org/10.1149/1.1391994>.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АРСЕНОПИРИТА И КАССИТЕРИТА С СОЛЯМИ КАЛИЯ И НАТРИЯ

Е. М. Дорошенко, Т. Д. Ниёзода, А. А. Новиков, Ри Хо Сен

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

По способу разделения арсенопирита на компоненты ранее проводились эксперименты с хлоридами, карбонатами щелочных металлов и их смесью, но эти эксперименты не позволяют качественно выделить мышьяк. Не представляется это возможным, вероятно, по причине недостаточной реакционной способности исследованных смесей. Решение данной проблемы позволит с помощью теоретического термодинамического моделирования химических процессов по выделению мышьяка из полупродуктов рудного концентрата по результатам работы получить оптимальный состав солей для применения на практике с целью связывания соединений мышьяка, содержащихся в руде химическим методом с солями и отделения соединений мышьяка от касситерита. Нами предложено методом термодинамического моделирования найти оптимальный состав солей, для качественного первичного разделения касситерита и соединений мышьяка, что, на данный момент, представляет научную новизну данного исследования. Для решения поставленных в проекте задач предполагается использование современных методов компьютерного моделирования химических реакций. При компьютерном моделировании будет использован программный комплекс Thermo-Calc (2022b) с использованием SSOL8 – базы данных SGTE и GCE2 – базы данных по геохимии, и построения фазовых диаграмм методом CALPHAD.

Олово в настоящее время находит широкое применение в промышленности и в быту. Он широко используется для пайки, изготовления коррозионностойких материалов, упаковки пищевых продуктов и т. д. Олово встречается во всех областях мира в виде различных минералов, например [1].

Существует много промышленных методов извлечения олова из его руд в зависимости от типа самой руды, оксидной или сульфидной. Каждый тип руды должен обрабатываться подходящей технологией в соответствии с ее химическим составом [2, 3].

Олово извлекают из окисленных руд обычно путем восстановительной плавки руды при высокой температуре (>1200 °С) в присутствии подходящего флюса кремнезема или извести в зависимости от типа и качества пустой породы, присутствующей в руде [4].

Широкое применение в получении металлического олова нашел пирометаллургический способ. Основной трудностью пирометаллургического способа является отделение олова от железа из-за высокой температуры плавки.

Условия плавки должны быть такими, чтобы оксид олова восстанавливался до металлического состояния, а оксид железа восстанавливался до низшего оксида и переходил в шлак. Кроме того, восстановление некоторых оксидов железа дополнительно облегчается, если образуются FeSn и FeSn₂ [5–7]. Также было установлено, что восстановление оксидов олова и железа зависит от кислотности шлаков.

В случае кислых шлаков – активность оксидов олова и железа ниже, чем в основных шлаках. Добавление извести в шлак усиливает процесс восстановления [8–10]. Добавки K₂CO₃, SiO₂, Al₂O₃, CaO ускоряют восстановление касситерита графитом [10–12].

В настоящее время для извлечения элементов из руд используются довольно устаревшие технологии, не позволяющие достичь запрашиваемого рациональностью результата. Особенно остро проблема стоит в условиях, где рудный концентрат имеет очень сложный минеральный состав. Такие руды считаются грязными, что, в свою очередь, повышает издержки на их переработку.

Проблема вывода мышьяка, значительно усложняющего технологию извлечения металлов, ухудшающего качество товарной продукции и загрязняющего окружающую среду, является

актуальной задачей. Удаление соединений мышьяка и возможное вскрытие концентрата на стадии обогащения позволит при последующем пирометаллургическом переделе упростить технологию извлечения металлов и снизить техногенное воздействие на окружающую среду.

Целью данной работы являлось термодинамическое моделирование химического взаимодействия арсенопирита и касситерита с солями и поиск оптимального состава и соотношения солей для разложения арсенопирита на компоненты при переработке рудного касситеритового концентрата.

Для достижения поставленной цели было проведено компьютерное моделирование влияния различных солей калия и натрия на процесс образования соединений мышьяка, с использованием программного комплекса Thermo-Calc (2022b) с различными базами данных: SSOL8 – базы данных SGTE и GCE2 – базы данных по геохимии, и построения фазовых диаграмм методом CALPHAD.

Научная новизна данного исследования заключается в получении новых данных комплексных составов исследуемых солей при компьютерном моделировании в программном комплексе ThermoCalc (2022b) для эффективного извлечения соединений мышьяка из полупродуктов обогащения касситеритового концентрата.

В качестве исходных реагентов были выбраны соли калия и натрия.

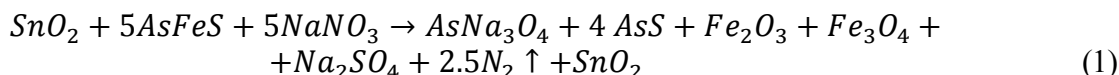
Путем компьютерного моделирования химических процессов было выяснено, что взаимодействие арсенопирита происходит только с нитратами калия и натрия, а с хлоридами и фторидами химического взаимодействия не происходит (таблица).

	<i>Cl</i>	<i>F</i>	<i>NO₃</i>
<i>Na</i>	-	-	+
<i>K</i>	-	-	+

При взаимодействии арсенопирита с натриевой селитрой происходит разложение арсенопирита на арсенат натрия, моносulfид мышьяка, оксиды железа, сульфат натрия и газообразный азот – формула (1).

Касситерит в реакции участия не принимает. Выше 120 °C происходит выделение оксида мышьяка (III).

При температурах выше 250 °C происходит возгонка мышьяка из оксида (рис. 1).



Взаимодействие арсенопирита с калиевой селитрой до 280 °C в целом аналогично взаимодействию с натриевой селитрой, кроме выделения оксида мышьяка и соответствующей возгонки из этого оксида (2).

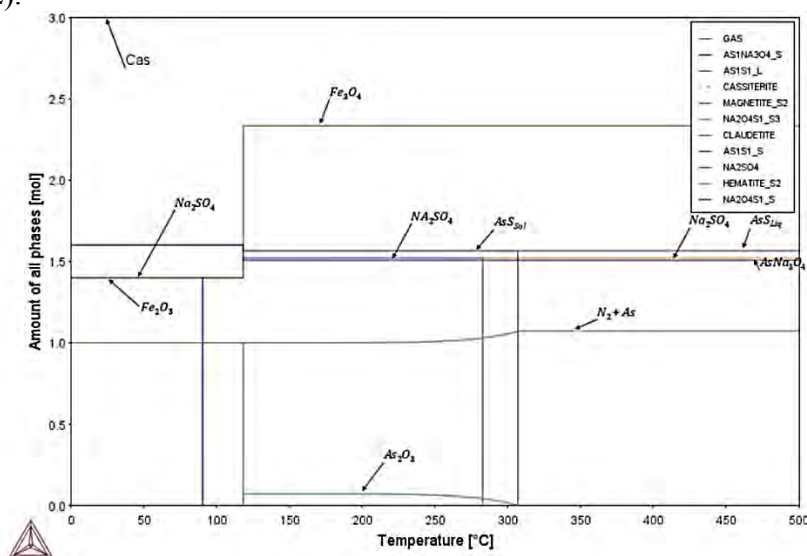


Рис. 1. Взаимодействие арсенопирита с натриевой селитрой

При температурах выше 350 °С происходит разложение селитры с выделением оксида калия и переход касситерита в сульфат олова (рис. 2).

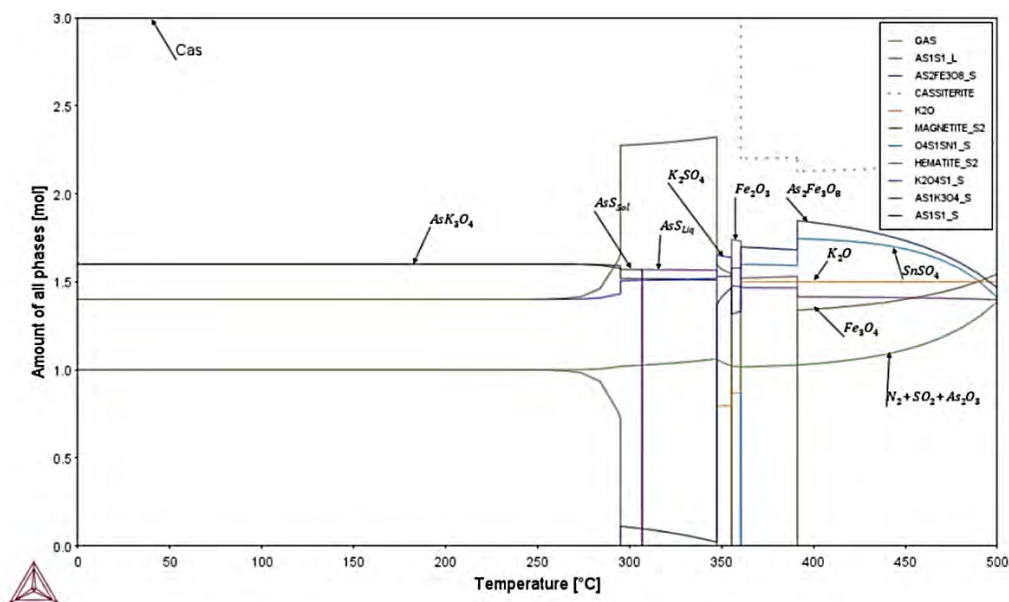
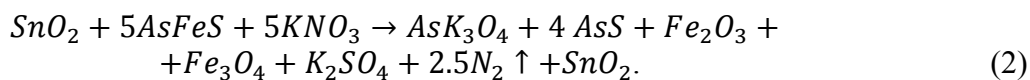


Рис. 2. Взаимодействие арсенопирита с калиевой селитрой



При совместном взаимодействии концентрата с нитратами калия и натрия, при соотношении $\text{KNO}_3/\text{NaNO}_3 = 3/2$, происходит разложение арсенопирита на арсенат калия, моносульфид мышьяка, оксиды железа, сульфат натрия и азот (а 3).

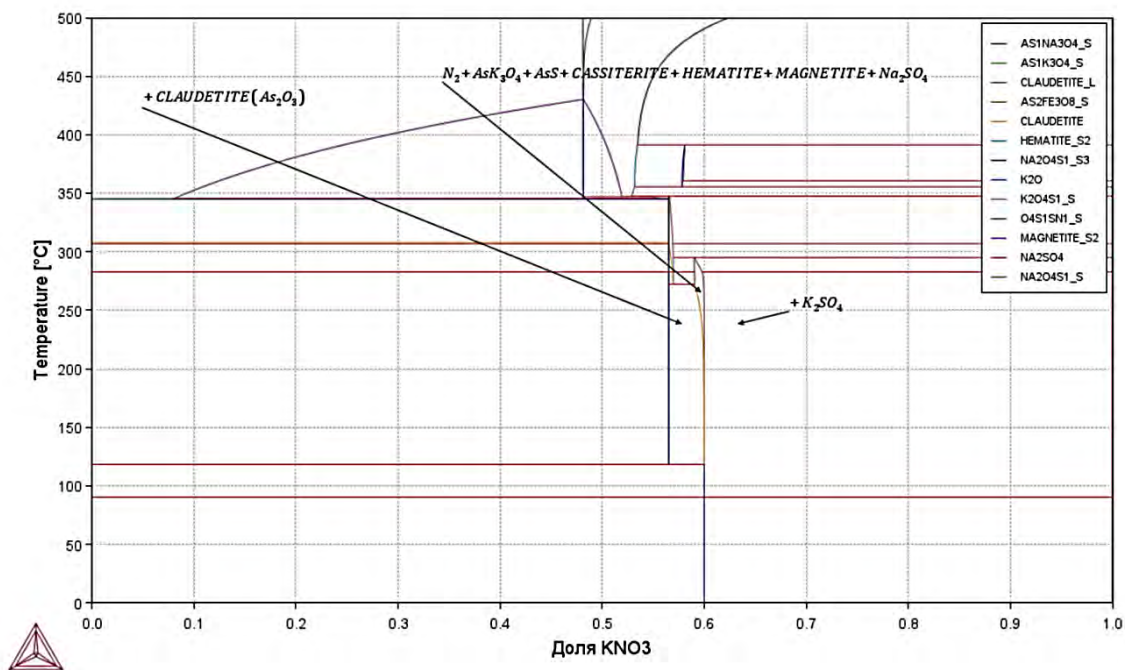
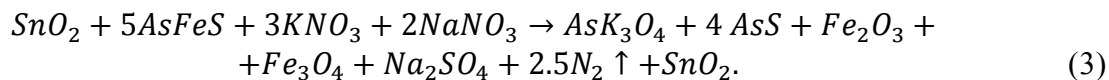


Рис. 3. Совместное взаимодействие концентрата с нитратами калия и натрия

Касситерит в реакции участия не принимает.

При уменьшении содержания нитрата калия начинается выделение оксида мышьяка, а при увеличении выделяется сульфат калия (рис. 3).



Данные результаты исследования показывают нам необходимость использовать в качестве связывающего реагента смесь солей.

Это позволит получить наилучшие результаты для достижения поставленной цели, а в последствие позволит не только выделить соединения мышьяка из арсенопирита, но и на практике, вероятно, на ранних этапах обогащения рудного концентрата применить разрабатываемую технологию.

Это существенно скажется на качестве концентрата и снизит техногенное воздействие на окружающую среду.

ЛИТЕРАТУРА

1. Sabet et al A. H. Tin- Tungsten mineralization in the Central Eastern Desert of Egypt. Ann. Geol. Surv. Egypt. 1973. No 3. P. 75-86.
2. Habashi F. Handbook of Extractive // Metallurgy. 1997. Vol. 2. New York. P. 683-714.
3. Патент РФ № 2333268 / Гостищев В. В., Ри Э. Х., Дорофеев С. В., Комков В. Г., Ри Хосен, 2008.
4. Мураш Н. Н., Севрюков Н. Н. Metallurgy of tin. Moscow, 1964.
5. Wright P. A. Extractive Metallurgy of Tin. Elsevier pub. Co., London, 1982.
6. Лебедев А. С., Дьяков В. Е., Теренин А. Н. Комплексная металлургия олова. Новосибирск, 2004.
7. Smith R. An analysis of the process For Smelting Tin // Mining History: The Bulletin of the Peak District Mines Historical Society. 1996. Winter. Vol. 13. No. 2. P. 91-99.
8. Omar A. A. Pyro metallurgical Treatment of Egyptian Cassiterite Concentrate // Bulletin Tims. 1996. Vol. 67. No. January. P. 26-36.
9. Morsi I. M., Abdalla F. A. H., El-Barawy K.A., El-Tawil S. Z. Tin recovery from local Cassiterite concentrate // Modelling, measurement and control, C. AMSE press. 1993. Vol. 36. No. 2. P. 13-28.
10. Van Deventer J. S. J. The Effect of Admixtures on the Reduction of Cassiterite by Graphite. Thermochemical Acta. 1988. Vol. 124. P. 109-118.
11. Теоретические основы химической технологии / В. В. Гостищев, В. Ф. Бойко, Л. А. Климова, Л. П. Метлицкая. 2006. Т. 40. № 5. С. 584-587.
12. Pyrometallurgical Extraction of Tin Metal from the Egyptian Cassiterite Concentrate / El Deeb A. B., Morsi I. M., Atlam A. A., Omar A. A., Fathy W. M. // International Journal of Scientific & Engineering Research. March-2015. Vol. 6, Iss. 3. P. 54-64.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ $\text{Ca}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА РАКОВИНАХ ДВУСТВОРЧАТЫХ МОЛЛЮСКОВ

А. В. Зайцев¹, И. А. Астапов², Е. А. Кириченко², М. С. Круглов³

¹ ФГБУН «Институт водных и экологических проблем» ДВО РАН

² ФГБУН «Институт тектоники и геофизики им. Ю. А. Косыгина» ДВО РАН

³ ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail.ru: alex-im@mail.ru

В работе рассмотрены перспективы получения фотокаталитически активного покрытия на раковине двустворчатого моллюска (Гребешок приморский), обитающего на территории Дальневосточного региона России. На основе исходных компонентов (CaCO_3 , TiO_2) с низкой себестоимостью и высокой био-индифферентностью, методом лазерной термообработки, синтезировано фотокаталитически активное покрытие. Исследованы фазовый состав и фотокаталитическая активность покрытия при фотоокислении модельного органического загрязнителя – метиленового синего.

Ежегодное накопление в воздухе воде и почве загрязняющих веществ органической и неорганической природы постоянно увеличивает экологические риски для среды обитания животных и человека [1].

Баланс между рациональным природопользованием и коммерческой прибылью от использования природных ресурсов в различных производственных цепочках в большинстве случаев оказывается нарушен. Одним из наиболее используемых природных ресурсов для применения на различных стадиях промышленного производства является вода. Водные ресурсы планеты в совокупности с водными экосистемами постоянно вовлекаются в различные технологические процессы народнохозяйственной деятельности человека.

Проблема нехватки чистой воды остро стоит перед многими странами мира [2].

В связи с этим современное развитие промышленного производства ставит перед исследовательскими коллективами новые задачи по созданию высокоэффективных водоочистных технологий с низкой себестоимостью и высокой экологической безопасностью.

В последние несколько десятилетий получило широкую исследовательскую поддержку перспективное направление водоочистки загрязненных водных стоков с использованием солнечных фотокатализаторов [3].

Сущность метода фотокаталитической очистки воды от органических загрязнителей сводится к способности фотокатализаторов эффективно преобразовывать энергию солнечного излучения в энергию химического взаимодействия. В результате такого перераспределения энергии фотокатализатор может генерировать в водной среде высокорекреационные частицы (гидроксид радикал, атомарный кислород, супер-оксид анион), которые способны эффективно разрушать органические молекулы загрязнителей до безопасных воды и углекислого газа.

В настоящее время показана эффективность большого количества фотокаталитических материалов способных под воздействием солнечного излучения разрушать разнообразные органические загрязнители [4].

Однако методы получения большинства описанных фотокатализаторов многостадийны и дорогостоящи из-за применения исходных компонентов с высокой стоимостью. В тоже время желание улучшить функциональную эффективность получаемых материалов заставляет иссле-

дователей использовать при синтезе фотокатализаторов вещества на основе тяжелых и токсичных элементов с высокими экологическими рисками для среды обитания животных и человека.

Так, например, известны работы по созданию высокоэффективных фотокатализаторов для очистки воды от органических загрязнителей с использованием соединений таллия [5] и ртути [6].

Наиболее перспективным решением данной проблемы является использование метода «green» синтеза при получении исследуемых соединений.

Сущность данного метода сводится к использованию в качестве исходных компонентов веществ, созданных природой (экстракты из различных организмов, минералы, минерализованные останки и т.д.), имеющих низкую себестоимость и высокую безопасность для окружающей среды.

Поиск исходных компонентов фотокатализаторов на основе соединений растительного или животного происхождения является актуальным способом улучшения функциональных свойств фотокаталитических материалов в части экологической безопасности.

Так, например, известны исследования о применении скорлупы яиц животных в качестве исходного компонента при синтезе фотокатализаторов на основе титаната кальция [7].

В свою очередь титанат кальция является био-индифферентным материалом (входит в состав компонентов для протезирующих материалов) обладающим фотокаталитической активностью и имеющим другие перспективные области применения.

Также карбонат кальция является основным компонентом наружного скелета морских и пресноводных беспозвоночных животных, что открывает перспективы использования данного природного материала, как в качестве био-индифферентного носителя фотокаталитических покрытий, так и в качестве исходного компонента при синтезе фотокатализаторов.

С другой стороны известной проблемой, сдерживающей широкое применение фотокатализаторов в промышленных масштабах, является нанесения функционального фотокаталитического покрытия из порошковых материалов на промышленный носитель.

Выбор носителя для фотокаталитического покрытия является сложной комплексной задачей, поскольку требует учета множества факторов.

Для обеспечения прочности покрытия фотоактивный слой должен обладать достаточной адгезией к поверхности носителя.

В то же время чрезмерное взаимодействие фотокаталитического материала с носителем является не желательным, поскольку приводит к изменению химического состава покрытия и частичной потере его активности.

Для решения этих проблем создают специальные промежуточные слои, отделяющие катализатор и его носитель, но сохраняющие высокую адгезию к обоим.

Однако создание промежуточных слоев различного состава усложняют технологию получения фотоактивного материала и увеличивают его конечную стоимость.

Альтернативным способом создания фотоактивного слоя является такой подбор носителя и прекурсорных веществ, при котором, в результате химического взаимодействия, образуется фотокаталитически активное покрытие за одну стадию [8, 9].

Наиболее актуальным направлением, решающим проблему нанесения фотокаталитического покрытия на носитель является использование химически комплементарных соединений материала носителя и материала исходных компонентов фотокатализаторов [10].

Обзор литературных данных по вопросам использования элементов наружного скелета морских и пресноводных беспозвоночных животных в качестве био-индифферентного носителя фотокаталитических покрытий скуден и малоинформативен, что открывает перспективы научных исследований в данном направлении.

В качестве носителя фотокаталитического покрытия была выбрана раковина двустворчатого моллюска – Гребешка приморского (*Mizuhopecten yessoensis* (Jay, 1857)), обитающего в заливе Петра великого акватории Японского моря.

Проведенные предварительные исследования показали, что раковина данного моллюска наиболее перспективна в качестве носителя фотокаталитических покрытий благодаря:

1. Однородности фазового состава.
2. Минимальному содержанию примесей других элементов.
3. Высокой механической прочности раковины и устойчивости к лазерному воздействию.

Методика получения фотокаталитического покрытия на основе $\text{Ca}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$ состояла из нескольких этапов:

1. Нагрев и выдержка порошка коммерческого TiO_2 в течение 1 часа при температуре $900\text{ }^\circ\text{C}$ для стабилизации фазового состава.
2. Совместное измельчение в дисковой мельнице (Herzog HSM 100) отожженного порошка TiO_2 и раковин моллюска до среднего размера частиц – 6 мкм.
3. Нанесение слоя исходных компонентов на поверхность раковины Гребешка приморского.
4. Автоматизированная точечная лазерная обработка (CO₂-laser Julong-M-440-50) в течение 2 секунд на каждую точку при мощности установки в 80 Ватт.

Изображение и морфология полученного покрытия показана на рис. 1, а. Необходимо проведение анализа фазового состава (Rigaku Mini Flex II) исходных компонентов и полученного фотокаталитического покрытия.

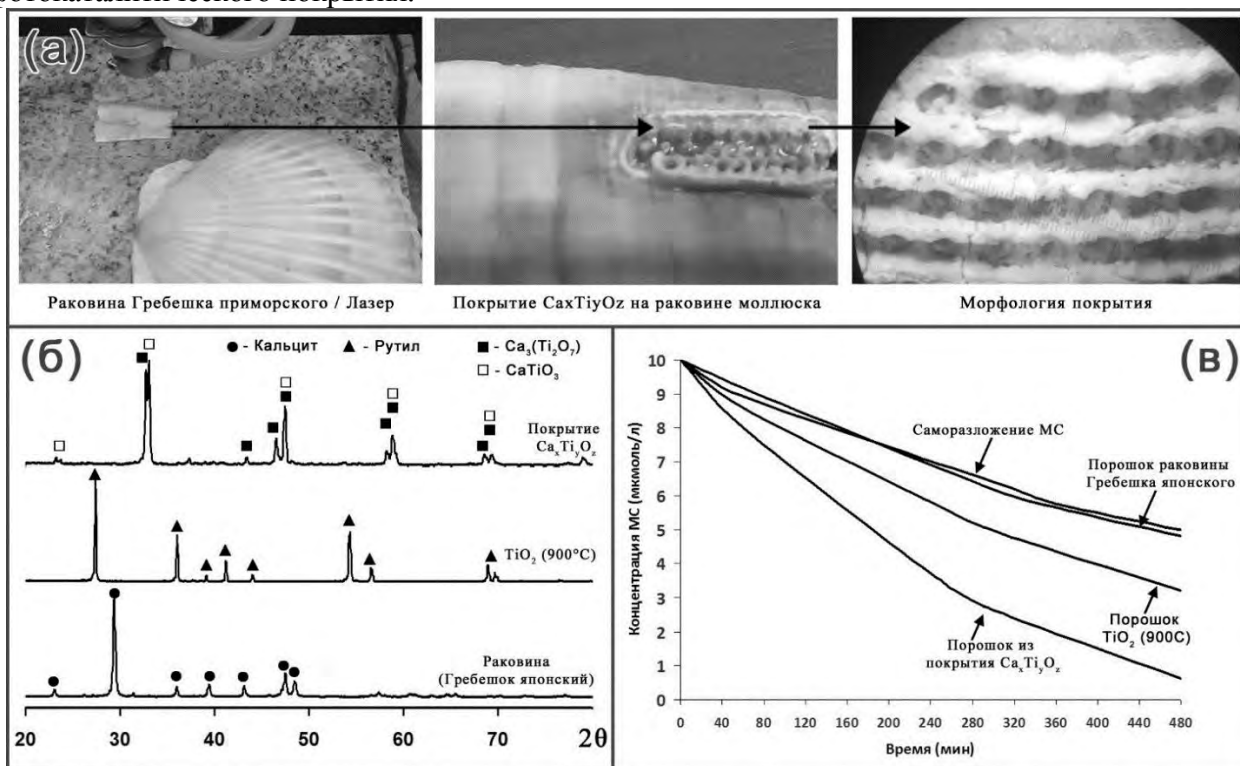


Рис 1. а) схема получения и морфология покрытия; б) РФА исходных компонентов и покрытия; в) фотокаталитическая активность

Согласно данным фазового анализа раковина Гребешка приморского состояла из карбоната кальция только в одной кристаллографической модификации – кальцит.

Отожженный при $900\text{ }^\circ\text{C}$ порошок оксида титана также содержал только одну кристаллографическую модификацию – рутил.

Исследование фазового состава и фотокаталитической активности полученного покрытия проводилось после предварительного отделения покрытия от раковины и его последующего измельчения до порошкообразного состояния.

Синтезированное покрытие содержало две фазы титаната кальция – $\text{Ca}_3(\text{Ti}_2\text{O}_7)$ и CaTiO_3 .

Исследование фотокаталитической активности порошка полученного покрытия (100 мг) проводилось под воздействием светового излучения с плотностью мощности 800 Вт/м² при использовании лампы Aqua Arc Osram, Sylvania в реакции фотоокисления модельного органического загрязнителя – метиленового синего (МС) при исходной концентрации 10 мкмоль/л в 100 мл воды.

Сравнительные исследования фотокаталитической активности покрытия и его исходных компонентов представлены на рис 1, в.

Показано, что порошок из раковин моллюска не обладает фотокаталитической активностью, в то время как порошок из полученного покрытия показывает высокую фотокаталитическую активность по сравнению с его исходными компонентами.

В результате проведенных исследований показаны перспективы получения фотокаталитически активных покрытий на раковинах моллюсков на примере Гребешка приморского.

Низкая себестоимость и высокая био-индифферентность как носителя, так и исходных компонентов покрытия в сочетании с подтвержденной фотокаталитической активностью открывают новые возможности по получению водоочистных материалов различного состава и назначения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Yi-Gong Chena, Xing-Li-Shang, Hea Jia-Hui Huang, Rong Luo, Hong-Zhang Ge, Anna Wołowicz, Monika Wawrzekiewicz, Agnieszka Gładysz-Płaska, Bo Li, Qiao-Xian Yu, Dorota Kołodziejka, Gui-Yuan Lv, Su-Hong Chen, Impacts of heavy metals and medicinal crops on ecological systems, environmental pollution, cultivation, and production processes in China, *Ecotoxicology and Environmental Safety* 219 (2021) 112336, <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2021.112336>.

2. Sami Ullah Khan, Ijaz Hussain, Impact of safe drinking water and clean fuels on health and wellbeing in Pakistan: A spatial analysis, *Groundwater for Sustainable Development*, 15 (2021) 100677, <https://doi.org/10.1016/j.gsd.2021.100677>.

3. Albert Serrà, Laetitia Philippe, François Perreault, Sergi Garcia-Segura, Photocatalytic treatment of natural waters. Reality or hype? The case of cyanotoxins remediation, *Water Research*, 188 (2021) 116543, <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116543>.

4. Sumei Li, Saisai Shan, Sha Chen, Hanbing Li, Ziyi Li, Yixuan Liang, Jiaying Fei, Linhua Xie, Jianrong Li, Photocatalytic degradation of hazardous organic pollutants in water by Fe-MOFs and their composites: A review, *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9 Is. 5 (2021) 105967, <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105967>.

5. I.Sheikhshoaie, S.Ramezanpoura, M.Khatamian, Synthesis and characterization of thallium doped Mn3O4 as superior sunlight photocatalysts, *Journal of Molecular Liquids*, 238 (2017) Pages 248-253, <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2017.04.088>.

6. R.Renukadevi, R.Sundaram, K.Kaviyarasubc, Robust Hg0.023WO3 nanoparticles: Synthesis, characterization and application as relative humidity sensing material and photocatalyst for degradation of organic dye contamination, *NANOSMATAFRICA-2018*, 36 Part 2, (2021) Pages 192-198, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.02.925>.

7. Lusi Ernawati, Ruri Agung Wahyuono, Hendri Widiyandari, Doty Dewi Risanti, Ade Wahyu Yusariarta, Rebeka, Virginia Sitompul, Experimental data of CaTiO3 photocatalyst for degradation of organic pollutants (Brilliant green dye) – Green synthesis, characterization and kinetic study, *Data in Brief*, 32 (2020) 106099, <https://doi.org/10.1016/j.dib.2020.106099>.

8. Aleksey V. Zaitsev, Oleg I. Kaminsky, Evgeny A. Kirichenko, Valeriya O. Krutikova, Fabrication of coatings based on strontium-bismuth-silicate photocatalyst for water purification from organic pollutants, *Materials Letters*, 291 (2021) 129601, <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129601>

9. Aleksey V.Zaitsev, Ivan A.Astapov, Prospects for creating regenerated photocatalytic materials for solar water treatment units, *Materials Letters*, 310 (2022) 131509, <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.131509>.

10. Aleksey V. Zaitsev, Evgeny A. Kirichenko, Oleg I. Kaminsky, Investigation into the efficiency of photocatalytic oxidation of aqueous solutions of organic toxins in a unit with an automatically cleaning bismuth-silicate photocatalyst, *Journal of Water Process Engineering*, 37 (2020) 101468, <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2020.101468>.

ИЗМЕРЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ В ПРОЦЕССЕ ОТВЕРЖДЕНИЯ

А. В. Латынцев, В. И. Римлянд

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: 000292@pnu.edu.ru

Приведены экспериментальные результаты измерения твердости по методу Шору для образцов на основе эпоксидной смолы ЭД-20 различного состава. Показано, что данный метод позволяет проследить динамику перехода из высокоэластичного состояния в твердое стеклообразное. Изучено влияние различного содержания отвердителя и пластификаторов на изменение твердости при больших временах полимеризации.

Введение. К числу наиболее интересных и перспективных относятся композиционные материалы (КМ) на основе полимерных связующих. Современные КМ, армированные различными волокнами, по ряду свойств значительно превосходят традиционные конструкционные материалы на основе металлов и сплавов. На сегодняшний день КМ применяются во многих областях промышленности (автомобильная, авиакосмическая, строительная) [1]. Многочисленные исследования посвящены как созданию новых КМ с различными армирующими волокнами и наполнителями на основе эпоксидных олигомеров, так и повышению эксплуатационных свойств связующих – матрицы [2-3].

Твердые полимеры содержат две фазы: кристаллическую и аморфную. Аморфная фаза полимерной матрицы в свою очередь может находиться в трех физических состояниях: стеклообразном, высокоэластическом и вязкотекучем. Причем соотношение фаз и физическое состояние аморфной фазы определяет физико-механические свойства полимеров. При производстве КМ необходимо чтобы в готовом изделии матрица КМ находилась в кристаллическом или твердом стеклообразном состоянии, и соответственно процесс полимеризации (отверждения) завершился.

Целью данной работы являлось измерения твердости по Шору полимерных образцов на основе эпоксидной смолы в процессе перехода из высокоэластичного состояния в твердое стеклообразное. Выбор данных исследований продиктован с одной стороны возможностью измерения твердости данных материалов согласно ГОСТов именно по методу Шора [4], а с другой, несмотря на многочисленные исследование механических полимерных материалов, отсутствием в литературе данных по измерению твердости в процессе полимеризации при больших временах отверждения.

Методика измерений и образцы. Для измерения твердости необходимо соблюсти требования к аппаратуре и образцам для испытания, регламентируемых государственным стандартом [4]. На рис. 1 показана установка, используемая для измерения твердости по Шору. Для мягких полимерных материалов используют дюрометр типа А (твердомер), для твердых – типа D. Калибровка дюрометра происходит согласно одной из приведенных ниже формул:

$$F = 550 + 75H_A \quad (1)$$

или

$$F = 445H_D, \quad (2)$$

где F – прилагаемая сила, мН; H_A – твердость, определенная по дюрометру типа А; H_D – твердость, определенная по дюрометру типа D.

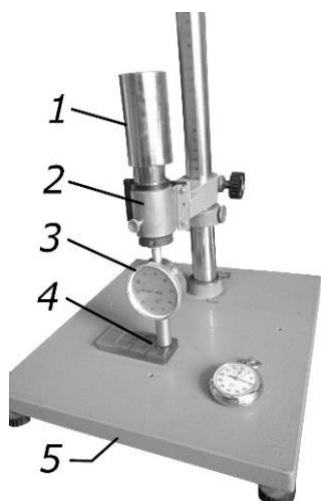


Рис. 1. Установка для измерения твердости по Шору: 1 – груз-гиря; 2 – направляющая втулка; 3 – твердомер; 4 – образцы для измерения; 5 – столик



Рис. 2. Изготовленные образцы

Для измерения твердости по Шору было изготовлено образцы на основе смолы ЭД-20:

- с добавлением отвердителя полиэтиленполиамин (ПЭПА) в количестве 5, 7 и 10%;
- 10% ПЭПА с добавлением пластификатора диэтиленгликоль (ДЭГ) в количестве 5, 10 и 20%;
- 5, 7, 10% ПЭПА с добавлением пластификатора дибутилфталата (ДБФ) в количестве 10%.

Технология изготовления включала: смешивание компонентов, центрифугирование, заливание в форму из полипропилена размером 33 x 20 x 5 мм и толщиной стенок 0,7 мм (рис. 2). Последняя серия образцов в течении 2,5 часов смешивались ЭД-20 с ДБФ при температуре 55 °С на водяной бане «Brookfield TC-502», а затем в течении 5 минут состав перемешивался с ПЭПА.

Измерения проводились через сутки после смешивания компонентов, когда образцы из жидкого высоковязкого состояния уже перешли в зависимости от состава в твердое высокоэластичное или твердое стеклообразное состояние.

Для уменьшения величины случайной погрешности каждое измерение повторялось три раза в различных точках поверхности образца.

Результаты измерений

Данные по измерению твердости H_A приведены в таблице. Наиболее характерные зависимости H_A от времени отверждения τ приведены на рис. 3.

Результаты измерений твердости образцов в процессе отверждения

$\tau, ч$	H_A			$\tau, ч$	H_A			$\tau, ч$	H_A		
	ЭД-20 + ПЭПА				ЭД-20 + ПЭПА 10% + ДЭГ				ЭД-20 + ДБФ 10% + ПЭПА		
	5%	7%	10%		5%	10%	20%		5%	7%	10%
24	14,8	85,5	94,5	24	93,3	91	44,5	24	7	56,3	92,3
47	32,7	86,3	94,2	48	94,3	90	54	46	7	68,3	95,2
71	61,7	89,2	94,5	69	94,2	90,5	58,7	70	16,7	76,8	95
95	69,7	92,2	93,5	111	93,8	90,8	74,2	112	37,3	84,2	94,8
119	74,3	92,2	93,7	139	93,8	91,3	90,7	146	53,3	87	95,3
143	78	91,8	94,5	167	93,3	91,7	88,8	174	65,2	89,5	95,5
164	80	91,2	93,5	197	93,3	91,5	90	194	80,8	92,7	95,5
210	87,3	91,2	94	239	93,2	89,7	91	216	95,8	92,7	95,3
238	87,5	91,8	94,3	334	93,8	90,7	91,8	240	95,5	95	95,5
262	90,7	93,3	93,5	—	—	—	—	288	95,2	95	95,2
310	89	92,8	94,2	—	—	—	—	336	96,2	95,3	95,5
334	92,5	92,7	93,5	—	—	—	—	—	—	—	—

Из таблицы и рис. 3 видно, что твердость образца ЭД-20 + ПЭПА 10 % фактически не изменяется в пределах погрешности при времени полимеризации больше 24 часов. Данный образец можно считать «стандартным» по своему составу, и согласно инструкции по использованию смолы ЭД-20 при $\tau > 24$ ч происходит его полное отверждение [5–6]. Это также согласуется с измерениями других параметров, например скорости звука [7]. Добавление к этому составу пластификаторов в количестве до 10 % не приводит к изменению зависимости $H_A(\tau)$. Только добавка 20 % ДЭГ приводит к существенному уменьшению H_A в интервале $\tau = 24 \div 95$ ч. Т. е. такое количество данного пластификатора существенно замедляет процесс полимеризации.

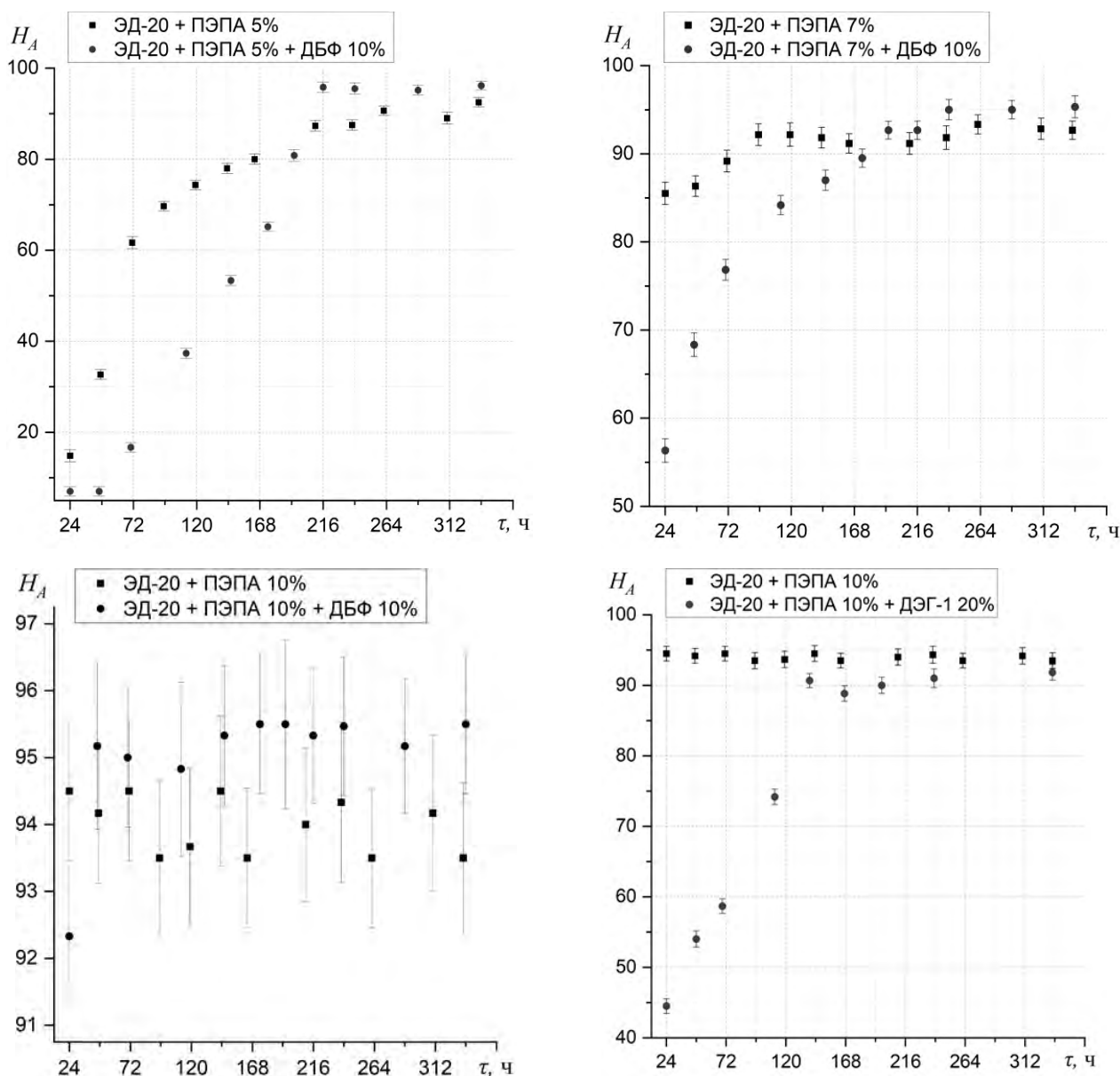


Рис. 3. Зависимости твердости образцов от времени отверждения

Необходимо отметить, что измеренные значения твердости по Шору H_A в интервале 90–100 находятся на пределе шкалы дюрометра типа А, соответственно погрешность достигает значительных значений. Следовательно, с одной стороны необходимы дополнительные измерения с дюрометром типа D, а с другой так как образцы уже находятся в твердом стеклообразном состоянии, это не имеет существенного значения.

Уменьшение содержания отвердителя ПЭПА приводит к существенному уменьшению твердости. Так при 5 % ПЭПА и $\tau=24\div 47$ ч значения H_A в 7–3 раза меньше, чем при $\tau=336$ ч (14 суток), когда процесс отверждения фактически завершился. Последний вывод можно сделать на основе сравнения значений H_A с 10 % ПЭПА. Низкие значения твердости при $\tau=24\div 47$ ч говорят, о том, что в этом интервале образец находится в высокоэластичном состоянии и процесс полимеризации не завершен.

С другой стороны при $\tau > 24$ ч все образцы хорошо сохраняют форму, т. е. находятся в твердом состоянии. Соответственно можно говорить, что формирование полимерных цепочек и отдельных блоков кристалличности произошло и при $\tau > 24$ ч происходит сшивка полимерных цепочек и образование связей между отдельными блоками – протекание 3D-структуры [8]. Исключение составляет образец ЭД–20 + ДБФ 10% + ПЭПА 5 %, который первые двое суток находится в вязкотекучем состоянии (не сохраняет форму). Для него значения H_A являются весьма условными.

Увеличение содержания ПЭПА до 7 % приводит, как исследовало ожидать, росту H_A в сравнении с ПЭПА 5 %.

При этом добавление ДБФ существенно замедляет скорость отверждения.

Вывод: Измерения твердости по Шору могут служить показателем степени отверждения полимеризующихся составов на основе смолы ЭД–20. Данные измерения позволяют определить переход из высокоэластичного состояния в твердое стеклообразное. Данный метод может быть применен для КМ на основе матрицы из эпоксидных смол на готовых изделиях, для которых другие методики неразрушающего контроля применить затруднительно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Эпоксидные смолы: Обзор мирового рынка. URL: <https://albionchem.ru/news/21876>.
2. Uflyand I. E., Irzhakb T. F., Irzhakb V. I. Formation of fiber composites with an epoxy matrix: state-of-the-art and future development // Materials and manufacturing processes. V. 37. P. 723-747. <https://doi.org/10.1080/10426914.2021.2016820>.
3. Determination of Mechanical Properties of Epoxy Composite Materials Reinforced with Silicate Nanofillers Using Digital Image Correlation (DIC) / Jelic, A. [et al.] // Polymers 2022, 14, 1255. <https://doi.org/10.3390>.
4. ГОСТ 24621-2015. Пластмассы и эбонит. Определение твердости при вдавливании с помощью дюрометра (твердость по Шору). введ. 01.01.2017. М.: Стандартинформ, 2016. 7 с.
5. ГОСТ 10587-84/ Смолы эпоксидно-диановые неотвержденные технические условия. Изд. Стандартов, 1989. 20 с.
6. Эпоксидно-диановые смолы ЭД-8, ЭД-16, ЭД-20, ЭД-22, YD-128, Э-40, Э-41, YD-011H. URL: https://www.chimexltd.com/content/data/store/images/f_815_49102_1.pdf.
7. Rimlyand V. I., Starikova V. N., Bakhantsov A. V. Dynamics of Mechanical, Acoustical, and Electrical Properties of Epoxy-Amine Compositions During Cure // Journal of Applied Polymer Science. Vol. 117. 2010. P. 143-147.
8. Chemistry and Technology of Epoxy Resins. Edited by Bryan Ellis. Springer Science+Business Media Dordrecht 1993. P. 342.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V

В. С. Попова, М. А. Ермаков, К. В. Дорошенко, С. С. Чешев

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: 2017102173@pnu.edu.ru

В работе представлены результаты компьютерного моделирования сплавов системы Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V, выполненного в программном комплексе Thermo-Calc 2022b с базой данных TCHEA5.1 (ВЭС). Проанализировано изменение изотермического разреза системы Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V в процессе изменения температуры при 1300, 1200, 1100, 1000, 900, 800 °C в области концентраций Mn-Al-V.

В настоящее время во всем мире идут широкие исследования в области новых материалов, имеющих уникальные физические и механические свойства. Как правило, это сплавы, состоящие из нескольких компонентов.

За последние пять лет был замечен всплеск исследовательской активности, особенно подход в изучение высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), который основан на смешивании нескольких основных элементов в относительно высоких (часто равных атомных) концентрациях.

Этот подход резко контрастирует с традиционной практикой и поэтому привлекает большое внимание [1]. Исследование однофазных сплавов позволяет систематически изменять такие переменные, как количество, типы и концентрации легирующих элементов, и напрямую соотносить их с физическими и механическими свойствами, такими как упругие константы, энергии дефектов, коэффициенты диффузии, прочность и пластичность, коррозия и жаропрочность [2–4].

Диаграммы состояния тройных металлических систем являются базой для изучения фазового состава, структурных составляющих, механических, технологических и других свойств промышленных сплавов [5].

Использование современных методов исследования и сертифицированного оборудования основополагающее в данном проекте, для решения поставленных нами задач. Одним из самых передовых решений современности для металлургии это использование разнообразных ПО для упрощения работы над различными задачами.

Уже более 30 лет Thermo-Calc находится в авангарде научного программного обеспечения и баз данных для расчетов, связанных с термодинамикой, фазовыми равновесиями и превращениями, контролируемые диффузией, многие научные институты уже используют данное ПО, так как оно является прогрессивной и инновационной технологией.

Данные, полученные с помощью Thermo-Calc, могут значительно сократить количество экспериментов, необходимых для производства нового или улучшенного продукта.

Например, Thermo-Calc может помочь в предварительном отборе тестовых условий, что позволит лучше нацелить свои эксперименты на получение необходимых данных.

Программное обеспечение Thermo-Calc позволяет сократить расходы с помощью вычислительного материаловедения.

Уменьшение количества экспериментов резко снижает стоимость разработки и оптимизации материалов.

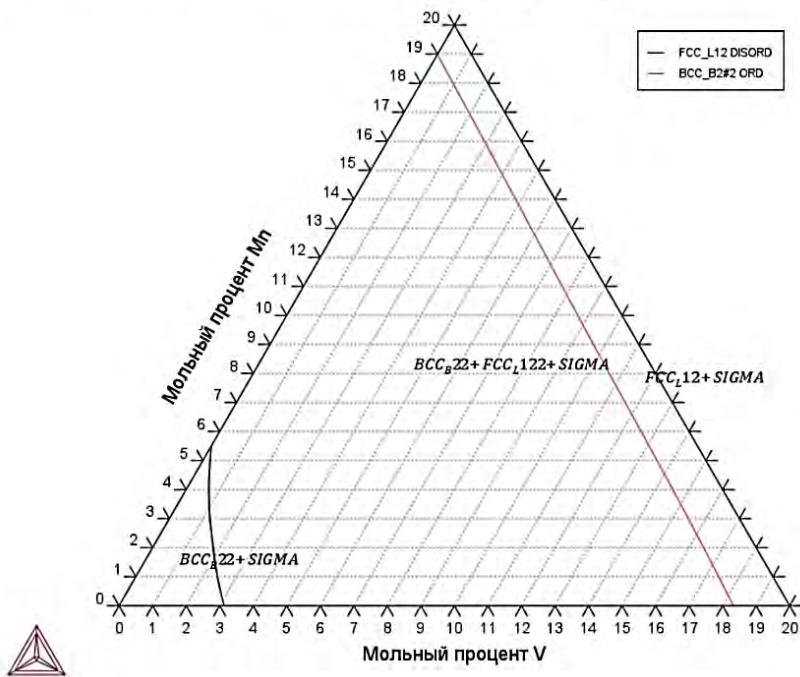
Вследствие этого придаются новые свойства уже популярным материалам, открываются новые возможности их применения [6].

В данной работе предстоит полностью изучить тройную диаграмму Mn-Al-V (рис. 1): разобраться с фазовыми превращениями, протекающими на определенных линиях и точках при 1300, 1200, 1100, 1000, 900, 800 °C в области концентраций Mn-Al-V.

В работе были использованы данные компьютерного моделирования сплавов системы Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V, выполненного в программном комплексе Thermo-Calc 2022b с базой данных TCHEA5.1 (ВЭС).

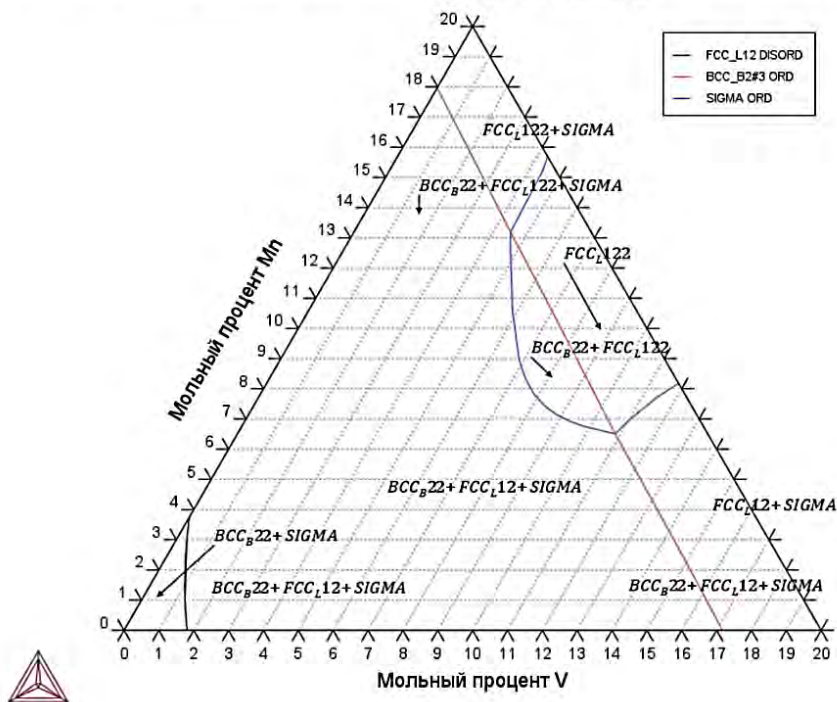
а)

2022.02.21.15.42.11
 TCHEA5 : Al, Co, Cr, Mn, Fe, Ni, V
 Температура [°C] = 800.0, Давление [Па] = 100000.0, Размер системы [моль] = 1.0, Мольный процент Co = 20.0, Мольный процент Cr = 20.0, Мольный процент Fe = 20.0, Мольный процент Ni = 20.0



б)

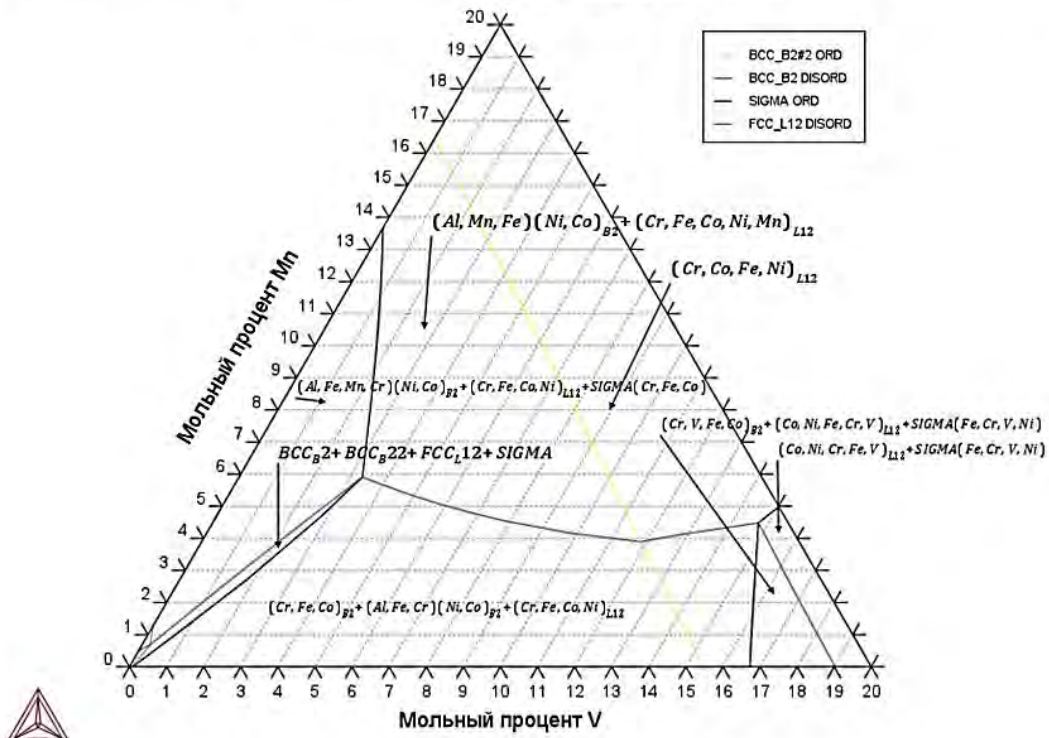
2022.02.21.15.35.10
 TCHEA5 : Al, Co, Cr, Mn, Fe, Ni, V
 Температура [°C] = 900.0, Давление [Па] = 100000.0, Размер системы [моль] = 1.0, Мольный процент Co = 20.0, Мольный процент Cr = 20.0, Мольный процент Fe = 20.0, Мольный процент Ni = 20.0



2022.02.21.15.19.33

В) TCHEA5 : Al, Co, Cr, Mn, Fe, Ni, V

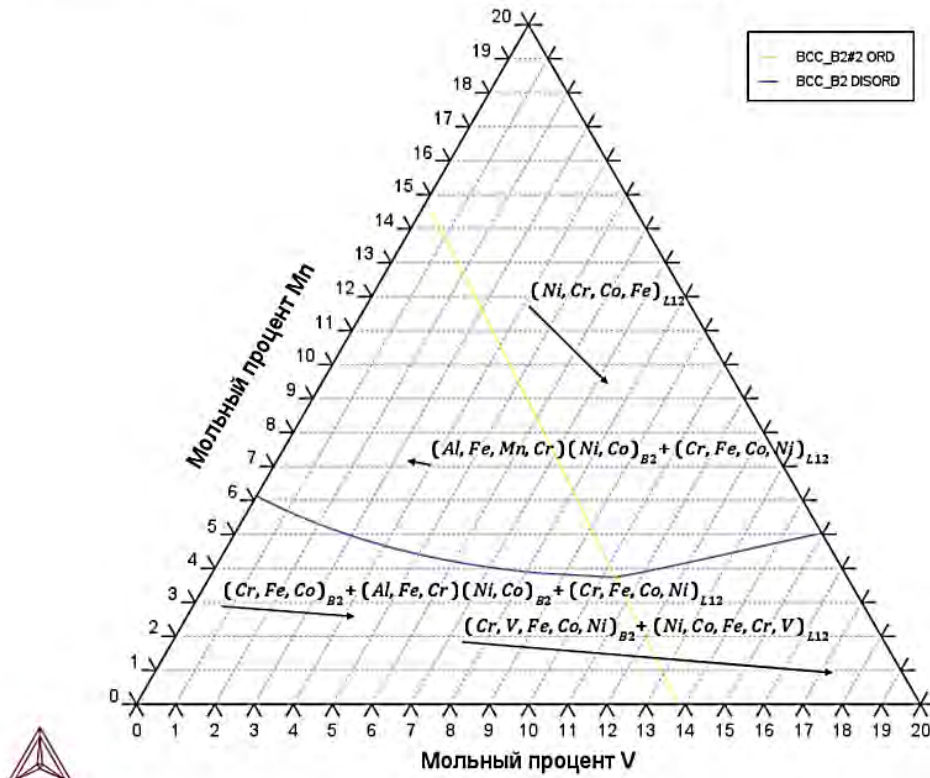
Температура [°C] = 1000.0, Давление [Па] = 100000.0, Размер системы [моль] = 1.0, Мольный процент Co = 20.0, Мольный процент Cr = 20.0, Мольный процент Fe = 20.0, Мольный процент Ni = 20.0



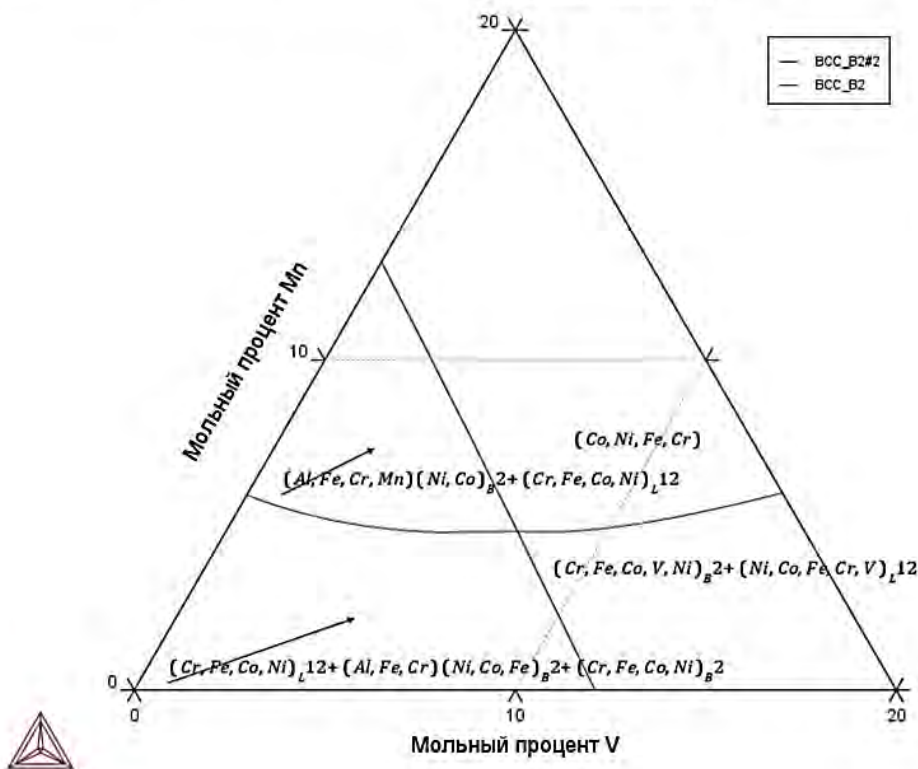
2022.02.21.15.09.11

Г) TCHEA5 : Al, Co, Cr, Mn, Fe, Ni, V

Температура [°C] = 1100.0, Давление [Па] = 100000.0, Размер системы [моль] = 1.0, Мольный процент Co = 20.0, Мольный процент Cr = 20.0, Мольный процент Fe = 20.0, Мольный процент Ni = 20.0



Д) 2022.02.21.14.42.54
 TCHEAS : Al, Co, Cr, Mn, Fe, Ni, V
 Температура [°C] = 1200.0, Давление [Па] = 100000.0, Размер системы [моль] = 1.0, Мольный процент Co = 20.0, Мольный процент Cr = 20.0, Мольный процент Fe = 20.0, Мольный процент Ni = 20.0



е) 2022.02.21.15.07.11
 TCHEAS : Al, Co, Cr, Mn, Fe, Ni, V
 Температура [°C] = 1300.0, Давление [Па] = 100000.0, Размер системы [моль] = 1.0, Мольный процент Co = 20.0, Мольный процент Cr = 20.0, Мольный процент Fe = 20.0, Мольный процент Ni = 20.0

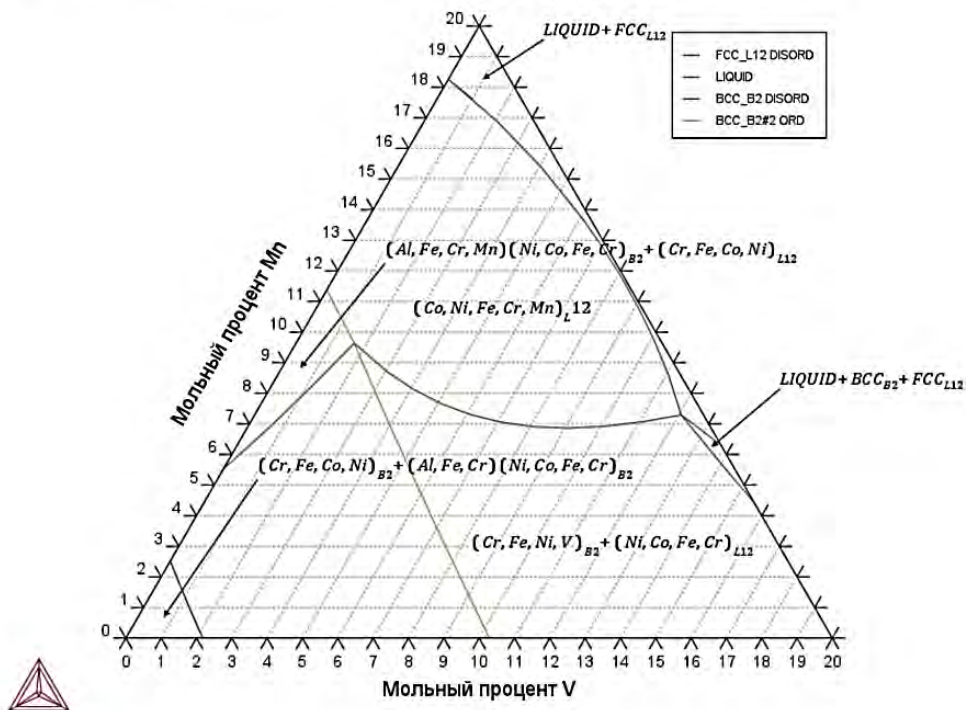


Рис. 1. Изменение изотермического разреза системы Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V в процессе изменения температуры при 1300, 1200, 1100, 1000, 900, 800 °C в области концентраций Mn-Al-V (a-e)

В результате расчетов состояния при помощи компьютерного моделирования рассмотренная область концентраций Mn-Al-V изменялась при различных температурах:

а) изотермический разрез при температуре 800 °С.

На диаграмме наблюдаются 3 фазы:

1. Твердый раствор на основе хрома с гранецентрированной решеткой.
2. Твердый раствор на основе Al, Cr-Ni, Co с гранецентрированной решеткой.
3. Сигма фаза.

Образующие 1 однофазную, 2 двухфазные области.

б) изотермический разрез при температуре 900 °С.

На диаграмме наблюдаются 3 фазы:

1. Твердый раствор на основе хрома с гранецентрированной решеткой.
2. Твердый раствор на основе Al, Cr-Ni, Co с гранецентрированной решеткой.
3. Сигма фаза.

Образующие 1 однофазную, 5 двухфазные и 1 трехфазные области.

в) изотермический разрез при температуре 1000 °С.

На диаграмме наблюдаются 4 фазы:

1. Твердый раствор на основе хрома с гранецентрированной решеткой.
2. Твердый раствор на основе хрома с объемцентрированной решеткой.
3. Твердый раствор на основе Al, Cr-Ni, Co с гранецентрированной решеткой.
4. Сигма фаза.

Образующие 1 однофазную, 4 двухфазные и 3 трехфазные области.

г) изотермический разрез при температуре 1100 °С.

На диаграмме наблюдаются 3 фазы:

1. Твердый раствор на основе хрома с объемцентрированной решеткой.
2. Твердый раствор на основе Al, Cr-Ni, Co с гранецентрированной решеткой.
3. Твердый раствор с объемцентрированной решеткой.

Образующие 1 однофазную, 2 двухфазные и 1 трехфазные области.

д) изотермический разрез при температуре 1200 °С.

На диаграмме наблюдаются 3 фазы:

1. Твердый раствор на основе хрома с объемцентрированной решеткой.
2. Твердый раствор на основе Al, Cr-Ni, Co с гранецентрированной решеткой.
3. Твердый раствор с объемцентрированной решеткой.

Образующие 1 однофазную, 3 двухфазные и 1 трехфазные области.

е) изотермический разрез при температуре 1300 °С.

На диаграмме наблюдаются 4 фазы:

1. Жидкость.
2. Твердый раствор на основе хрома с гранецентрированной решеткой.
3. Твердый раствор на основе хрома с объемцентрированной решеткой.
4. Твердый раствор на основе Al, Cr-Ni, Co с гранецентрированной решеткой.

Образующие 1 однофазную, 4 двухфазные и 2 трехфазные области.

Суммарно эти диаграммы можно представить следующим образом (рис. 2). Используя наложение и характерное выделение цветом, мы определим интересующую нас зону.

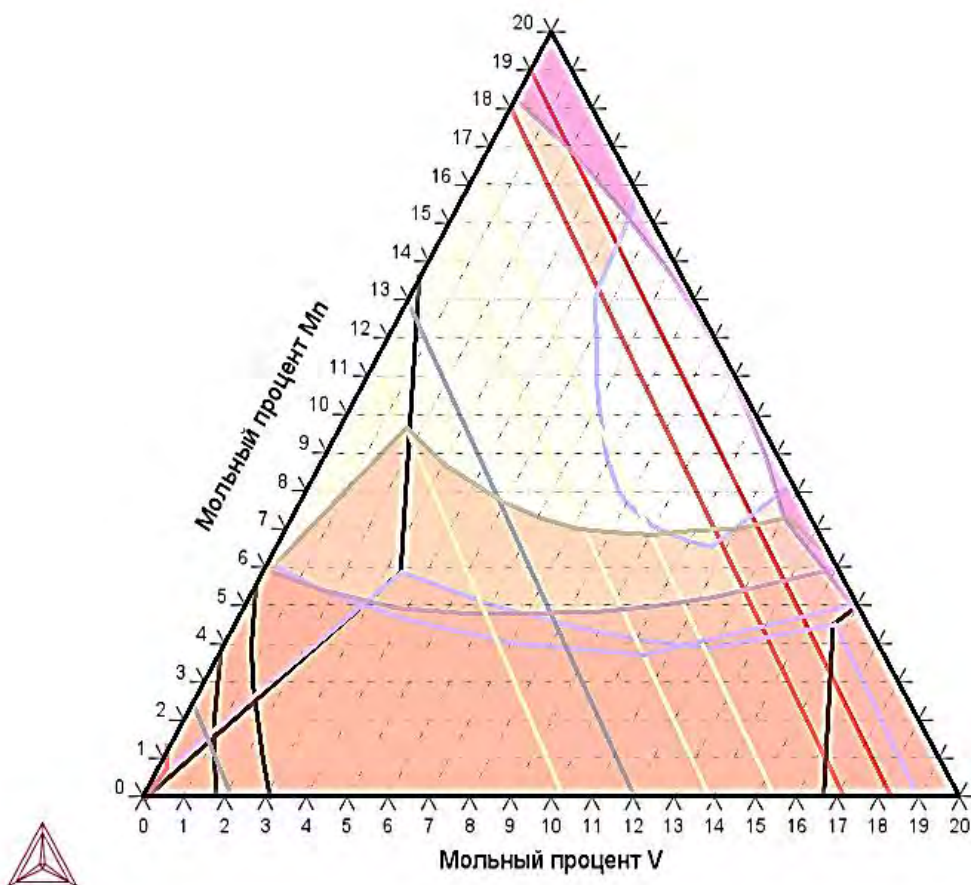


Рис. 2. Суммарное представление изотермического разреза системы Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V в процессе изменения температуры при 1300, 1200, 1100, 1000, 900, 800 °С в области концентраций Mn-Al-V

Мы можем предположить, что самая светлая область на изотермическом разрезе системы Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V в процессе изменения температуры при 1300, 1200, 1100, 1000, 900, 800 °С в области концентраций Mn-Al-V будет обладать наибольшей коррозионной стойкостью. Таким образом, в рамках данной работы были определены параметры наиболее выгодной области. Данные результаты будут использованы в дальнейшей работе при создании высокоэнтропийного сплава Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V.

ЛИТЕРАТУРА

1. Easo P. George, Dierk Raabe, Robert O. Ritchie High-entropy alloys // Nature Reviews | Materials, 2019. Vol. 4. P. 515-534.
2. High-entropy alloy: Fundamentals and Applications / Michael C. Gao, Jien-Wei Yeh, Peter K. Liaw, Yong Zhang // Springer International Publishing. Switzerland. 2016.
3. High-entropy alloys – a new era of exploitation / Yeh J.W., Chen Y.L., Lin S.J. and Chen S.K. // Materials Science Forum. 2007. Vol. 560. P. 1-9.
4. Механические свойства литых многокомпонентных сплавов при высоких температурах / Фирстов С. А., Горбань В. Ф., Крапивка Н. А. [и др.] // Современные проблемы физического материаловедения. 2008. Вып. 17. С. 126-139.
5. Thermo-Calc 2022b and DICTRA, Computational tools for materials science / Andersson J. O., Helander T., Höglund L., Shi P. F., and Sundman B. // Calphad. Vol. 26. P. 273-331.
6. Березовская В.В., Ишина Е.А., Озерец Н.Н. Диаграммы состояния тройных систем : учебное пособие // Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та. 2016. С. 120.

ИССЛЕДОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ С ДОБАВЛЕНИЕМ ПЛАСТИФИКАТОРА ДЭГ-1

К. С. Пошарникова, К. А. Драчев

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: 2019102328@pnu.edu.ru, kirill@pnu.edu.ru

Проведены исследования акустических параметров (скорость и коэффициент затухания продольных волн) образцов из эпоксидных смол ЭД-20, модифицированных пластификатором ДЭГ-1. Показано влияние концентрации модификатора на распространения волн, проанализирована динамика отверждения модифицированных составов.

В настоящее время наблюдается общемировая тенденция широкого использования композиционных материалов на основе эпоксидных связующих, которые позволяют добиться снижения веса и повышения эксплуатационных характеристик деталей и узлов, применяемых в промышленности. К данному классу материалов выдвигаются повышенные требования по надежности и отсутствию дефектов, в связи с этим активно разрабатываются методы неразрушающего контроля [1–3]. Наиболее широкое распространение получили акустический ультразвуковой и рентгеновский методы контроля. При этом применение ультразвуковых акустических методов, составляют более 60 % от всех методов контроля [1–5]. Использование ультразвуковых методов требует знания влияния структуры и дефектов на распространение различных типов волн.

Основной целью данной работы является экспериментальное изучение особенностей распространения акустических волн в полимерных связующих, модифицированных пластификаторами. Исследования проводились для четырех видов образцов олигомера ЭД-20 с добавлением ПЭПА и содержанием массового содержания пластификатора (ДЭГ-1) 5, 10, 15 и 20 %. Экспериментальные измерения проводились от начала приготовления смеси полимерного состава в течение 1 месяца с переменным интервалом измерений. Изготовление образцов производилось по следующей схеме: эпоксидную смолу ЭД-20 смешивали с отвердителем ПЭПА в соотношении 10:1 (оптимальное соотношение для холодного отверждения), а затем после перемешивания полученного состава до однородной консистенции производилось добавление пластификатора ДЭГ-1. Добавление ДЭГ-1 существенно увеличивает пластичность эпоксидной смолы и предотвращает растрескивание отвержденного состава.

Также данный пластификатор легко смешивается с эпоксидно-диановыми смолами без подогрева. Приготовленный состав заливаем в формы из полипропилена 24×20×15 мм и толщиной стенок 1,05 мм (рис. 1).

Экспериментальные исследования акустических свойств образцов, проведены на автоматизированной многоканальной измерительной системе для изучения акустических свойств различных материалов [6]. Блок-схема установки представлена на рис. 2.

В качестве излучающих (И) и принимающих (П) элементов автоматизированной системы использовались прямые совмещенные пьезоэлектрические датчики (ПЭП) с резонансной частотой 1,25 МГц. ПЭП устанавливаются на торец или поверхность образца (ТМ) с использованием специальной акустической контактной жидкости.

Скорость акустических волн определялась на основе измерения времени прохождения ультразвукового импульса от излучателя до приемника. Коэффициент затухания α определялся как относительное уменьшение амплитуды первого прошедшего импульса к амплитуде переотраженного импульса при распространении сигнала по образцу.



Рис. 1. Форма для проведения акустических измерений

Время прихода ультразвукового t определялось по началу регистрации первой полуволны, амплитуда которой на 10% отличается от уровня фонового сигнала в усредненной осциллограмме сигнала (рис. 3).

Для обеспечения постоянства акустического контакта между датчиками и формой образца не вынимались из формы и в течении всей серии измерений находились между датчиками. Соответственно при дальнейшем расчете скорости акустических волн необходимо было учитывать две временных поправки: временную задержку в самой измерительной системе и временную задержку, обусловленную толщиной стенок полипропиленовой формы.

Анализ полученных сигналов позволял определять скорость продольной волны для каждого образца в зависимости от расположения пьезоэлектрических датчиков относительно слоев укладки нитей расплава.

Погрешность измерения скорости в экспериментах составляла $\Delta C = \pm 10$ м/с.

Более подробно вышеописанные методики определения скорости и коэффициента затухания акустических волн описаны в работе [7].

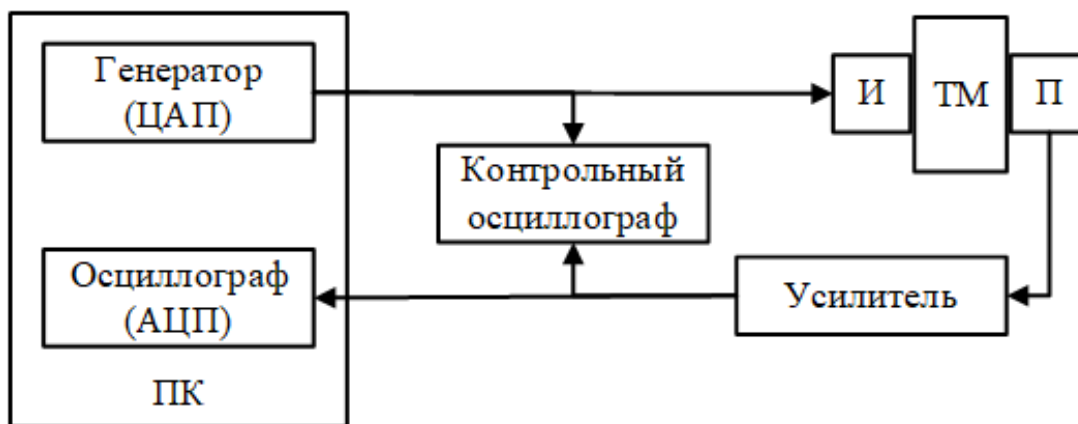


Рис. 2. Блок-схема автоматизированной системы

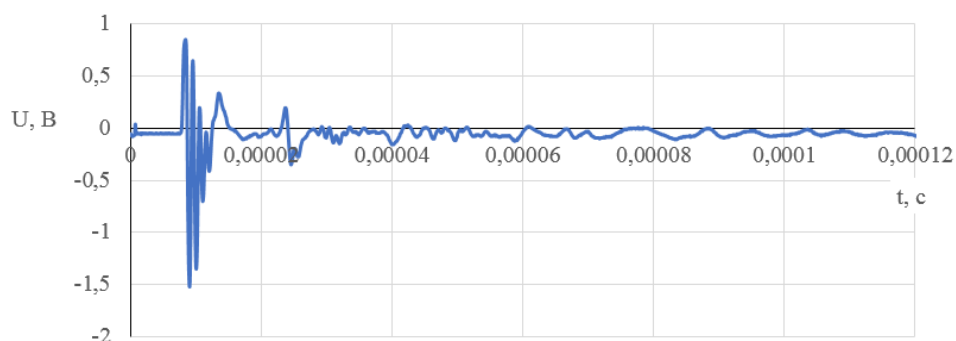


Рис. 3. Осциллограмма акустического сигнала, прошедшего сквозь образец

По результатам обработки акустических сигналов были получены значения скоростей продольной волны на различных стадиях отверждения.

Анализируя графики зависимостей скоростей распространения продольной волны в образцах, представленные на рис. 4, можно сказать, что в жидком состоянии процесс отверждения скорости звука нарастает от минимального значения (1740–1840 м/с) до постоянного максимального значения (2750–2885 м/с).

При этом в первые 6 часов значение скорости возрастает максимально быстро.

С течением времени полимеризации от 0 до 168 часов для каждого образца скорость нарастает до максимальной точки и в дальнейшем значение скорости остается практически неизменным.

Зависимости коэффициента затухания (рис. 4) в отличие от зависимостей скорости C претерпевают значительные изменения в первые два часа.

При этом можно наблюдать, что коэффициент затухания сначала растет до максимального значения в первый час, а после интенсивно убывает в периоде времени от 1–6 часов.

Минимальное значение наблюдается при спаде коэффициента затухания после 48 часов для четырех образцов и в дальнейшем остается практически неизменным.

Средняя величина коэффициента затухания в образцах составила в отвержденном состоянии 350 дБ/м.

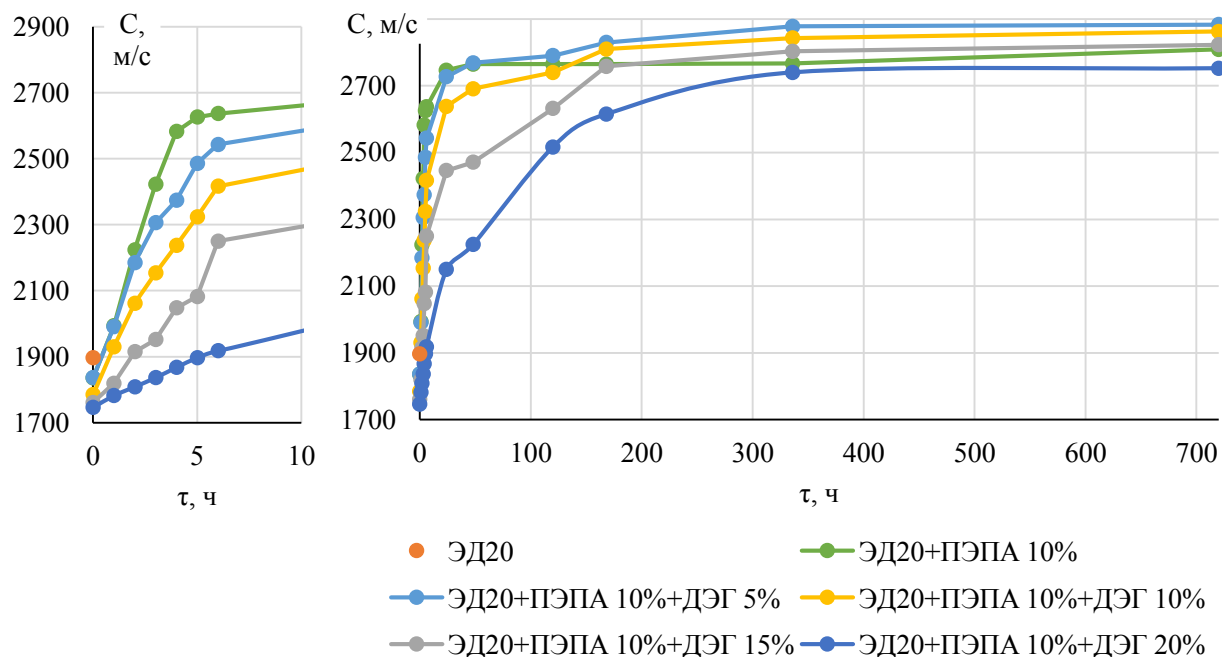


Рис. 4. Зависимость скорости продольной волны от времени отверждения

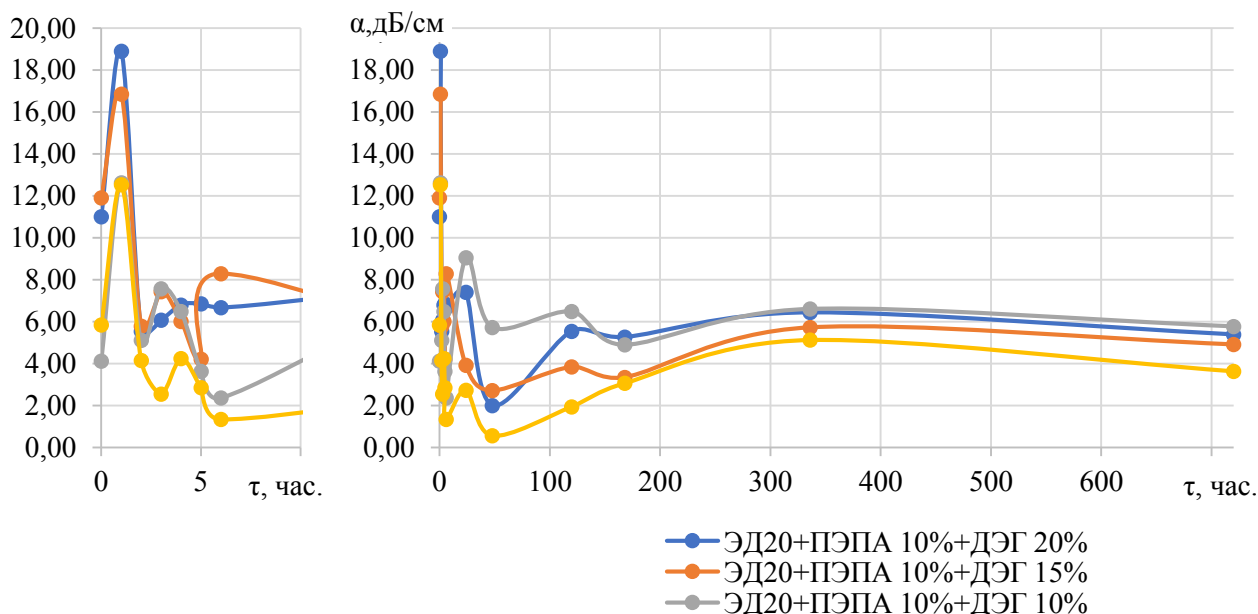


Рис. 5. Зависимость коэффициента затухания продольной волны от времени отверждения

Таким образом, проведенные исследования показывают, что акустические свойства образцов эпоксидных составов незначительно зависят от концентрации пластификатора в них в отвержденном состоянии. В первые двое-трое суток полимеризации в акустических характеристиках образцов происходят значительные изменения. Полученные данные позволяют контролировать процесс полимеризации эпоксидных составов на основе применения акустических методов контроля. Однако необходимо провести дополнительные экспериментальные и теоретические исследования в этом вопросе для выявления влияния других модификаторов на акустические характеристики составов. Также необходимо производить исследования как прочностных, так и деформационных свойств данного материала.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Mel M. Schwartz Composite Materials, Volume I: Properties, Non-Destructive Testing, and Repair. United Technologies Corporation. 1997. P. 432.
2. Мурашов В. В. Контроль и диагностика многослойных конструкций из полимерных композиционных материалов акустическими методами. Изд-во «Спектр», 2016. 244 с.
3. Mel M. Schwartz Composite Materials, Vol. II: Processing, Fabrication, and Applications. United Technologies Corporation. 1997. p. 302.
4. Троицкий В. А., Карманов М. Н., Троицкая Н. В. Неразрушающий контроль качества композиционных материалов. Техническая диагностика и неразрушающий контроль. № 3. 2014. С. 29-33.
5. Бойцов Б. В., Васильев С. Л., Громашев А. Г., Юргенсон С. А. Методы неразрушающего контроля, применяемые для конструкций из ПКМ // Электронный журнал «Труды МАИ». Выпуск № 49.
6. Драчев К. А., Римлянд В. И., Савченко В. В. Автоматизированная измерительная система для проведения акустических измерений / К. А. Драчев, В. И. Римлянд, В. В. Савченко // Вестник Тихоокеанского государственного университета. 2017. № 1(44). С. 13-20.
7. Драчев К. А., Римлянд В. И. Измерения акустических параметров с использованием радиоимпульса // Измерительная техника. 2017. № 6. С. 60-64.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА МХЕНОВ $(\text{Ti}, \text{Ta})_3\text{C}_2\text{T}_x$ и $(\text{Ti}, \text{Nb})_3\text{C}_2\text{T}_x$

К. В. Соболев¹, А. В. Сюй², Г. И. Целиков², А. В. Арсенин²,
В. В. Родионова¹, В. С. Волков²

¹ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет им. И. Канта» Калининград

²ФГАОУ ВО «Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)» Москва
e-mail: alsyuy271@gmail.com

Стандартным методом спекания без давления успешно синтезированы ранее неизвестные алюминий-содержащие твердые растворы 312 $M_{n+1}AX_n$ -фазы $(\text{Ti}, \text{Ta})_3\text{AlC}_2$ и $(\text{Ti}, \text{Nb})_3\text{AlC}_2$. Состав МАХ-фазы был подтвержден взаимодополняющими методами XRD, SEM и EDS. Анализ Ритвельда порошковых рентгенограмм был использован для расчета параметров решетки и фазовых составов. Нагрев чистых порошков Ti, Al, C с добавкой V в молярном соотношении 1.5 : 1.5 : 1.1 : 2 до 1450 °С в течение 8 ч в динамическом вакууме привел к получению образцов с доминирующей объемной долей МАХ-фазы. После этого все новые МАХ-фазы были успешно преобразованы в МХены по стандартному MILD-протоколу – химическому травлению слоев алюминия в смеси кислот HCl с LiF. МХены были охарактеризованы при помощи ряда методик, в том числе: XRD, SEM, TEM, EDS, AFM.

Керамические материалы имеют широкое применение в науке и технике, и за последние два десятилетия список керамики значительно обогатился благодаря открытию особенных фаз $M_{n+1}AX_n$ (МАХ-фаз), которые представляют собой большое уникальное семейство (более 70 фаз) слоистых гексагональных (пространственная группа P63/mmc) соединений состава $M_{n+1}AX_n$, где М - переходный металл (Sc, Ti, V, Cr, Nb, и т. д.), А – элемент группы А (в основном группы 13-16; Al, Si, Sn, In и т. д.), X – углерод и/или азот, n = 1, 2 или 3 [1]. Уникальность МАХ-фаз заключается в их слоистой структуре и смеси металлических и ковалентных связей. Таким образом, они сочетают в себе характеристики металлов и керамики [2]. Например, как и керамика, некоторые из них довольно жесткие [3] и устойчивы к коррозии, окислению и ползучести [4]. Подобно металлам, они обладают высокой электро- и теплопроводностью, не подвержены термическому удару и легко поддаются механической обработке. Связь Ti-Al обеспечивает металлические свойства, а связь Ti-C(N) обеспечивает керамические свойства материала.

Механический отклик МАХ-фаз широко изучен и, вероятно, является наиболее интригующим свойством. Как правило, в многослойных твердых телах отсутствуют пять независимых систем скольжения, необходимых для пластичности [3]. Однако в МАХ-фазах дислокации базисной плоскости многочисленны, подвижны и способны размножаться при комнатной температуре. Ограничение дислокаций базисными плоскостями провоцирует образование изломных полос, характерных для МАХ-фаз. Эти механизмы были приняты для описания механического отклика, но недавно был предложен новый механизм, называемый рипплокациями, который вызвал серьезные споры в научном сообществе [5]. В отличие от дислокаций, рипплокации не имеют вектора Бюргера и полярности, а основаны на короблении поверхностей в Ван-дер-Ваальсовых слоях [6–8]. МАХ-фазы демонстрируют лучшую устойчивость к повреждениям, чем другие передовые керамические материалы. Этот эффект можно наблюдать, выполняя испытания по Виккерсу.

МАХ-фазы плавятся неконгруэнтно, образуя обычно соединения МХ (карбиды или нитриды) и богатые А жидкости или интерметаллиды при высокой температуре. Температура этого неконгруэнтного плавления сильно зависит от таких факторов, как чистота и окружающая среда. Например, Ti_3SiC_2 весьма тугоплавко в вакууме, с разложением выше $2300\text{ }^\circ\text{C}$ [1, 2], но в окислительных средах этот показатель падает до $\sim 1000\text{ }^\circ\text{C}$. $M_{n+1}X_n$ слои стабильны, тогда как слои А слабо связаны и подвижны, поэтому элемент «А» обычно диффундирует из структуры при повышенной температуре.

МАХ-фазы отличаются высокой коррозионной стойкостью [9]. Ti_3SiC_2 был первой МАХ-фазой, которую исследовали с использованием тяжелых ионов различной энергии при комнатной температуре, чтобы понять и различать ядерные и электронные взаимодействия [10]. Некоторые МАХ-фазы обладают сверхнизким коэффициентом трения скольжения [11]. МАХ-фазы представляют собой металлические электрические проводники, в которых удельное сопротивление линейно увеличивается с температурой [11].

МАХ-фазы считаются хорошими теплопроводниками с теплопроводностью от 12 до $60\text{ Вт}\cdot\text{м}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$ [12].

В связи с таким уникальным сочетанием физических свойств, МАХ-фазы интенсивно исследуются последнее десятилетие. Благодаря слоистой структуре МАХ-фаз, сильному взаимодействию в слое МХ и относительно слабым взаимодействиям между МХ и А, путем химического травления из МАХ-фазы получают двумерные материалы - МХены, свойства которых, в свою очередь, также богаты и имеют большой практический потенциал использования в науке и технике в качестве материала для наноэлектроники, сенсоров, гибкой электроники, очищения окружающей среды, накопления водорода, электрокатализа, суперконденсаторов, электрических батарей, солнечных батарей, биомедицинских применений [13].

В последнее время ученые материаловеды обратили свое внимание на четырехкомпонентные МАХ-фазы в виду их перспективности использования в науке и технике. За счет введения четвертого компонента при синтезе новых МАХ-фаз модернизируется зонная структура материала и соответственно открываются новые возможности практического использования как самих МАХ-фаз, так и МХенов на их основе.

Методика эксперимента

В данной работе предприняты попытки синтезировать новые четырехкомпонентные МАХ-фазы $(Ti, Ta)_3AlC_2$ и $(Ti, Nb)_3AlC_2$, для синтеза был использован стандартный метод спекания без давления. Смеси чистых порошков Ti, Ta/Nb, Al и C в молярном соотношении 1.5:1.5:1.1:2, общей массой порядка 15 г, гомогенизировались при помощи низкоэнергетичного помола в планетарной мельнице с шарами и стаканами из нержавеющей стали в течение одного часа при скорости 200 об/мин. Гомогенизированные порошки были спрессованы в таблетки, после чего отжигались в динамическом вакууме при температуре $1450\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 8 часов.

Из синтезированных МАХ-фаз путем химического травления в смеси HCl с LiF (MILD-условия) были получены МХены состава $(Ti, Ta)_3C_2T_x$ и $(Ti, Nb)_3C_2T_x$ (T_x обозначает поверхностную функционализацию МХена). Для этого образцы соответствующих МАХ-фаз были измельчены механически в агатовой ступке до дисперсности $< 45\text{ мкм}$, после чего погружены в девятимолярный раствор HCl с LiF из расчета массовых долей МАХ-фазы : LiF = 1 : 1. Реакция травления происходила при температуре $35\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 24 часов при постоянном перемешивании с помощью магнитной мешалки. После завершения травления раствор МХенов был центрифугирован с добавлением избытка деионизованной воды в течение 7 циклов по 5 мин на скорости 3000 об./мин. до нейтрального pH. В результате травления и центрифугирования образовывался коллоидный раствор (деламинированные МХены) и осадок (смесь

мультислоенных МХенов с остатками непрореагировавшей МАХ-фазы), которые были разделены центрифугирования и исследованы отдельно.

Состав МАХ-фаз был подтвержден взаимодополняющими методами XRD, SEM и EDS. В работе использовались рентгеновский дифрактометр AXRD Benchtop (Proto Mf., США) с монохроматичным излучением Cu-K α , исследование проводилось в диапазоне углов $2\theta = 5\text{--}80^\circ$ с шагом 0.015° и временем набора спектра – 5 сек на точку, а также сканирующий электронный микроскоп TM4000II (Hitachi Ltd., Япония) с EDS-детектором QUANTAX 75 (Bruker, США), просвечивающий электронный микроскоп JEOL JEM 2100 (Japan) с ускоряющим напряжением 200 кВ и разрешением 0,19 нм.

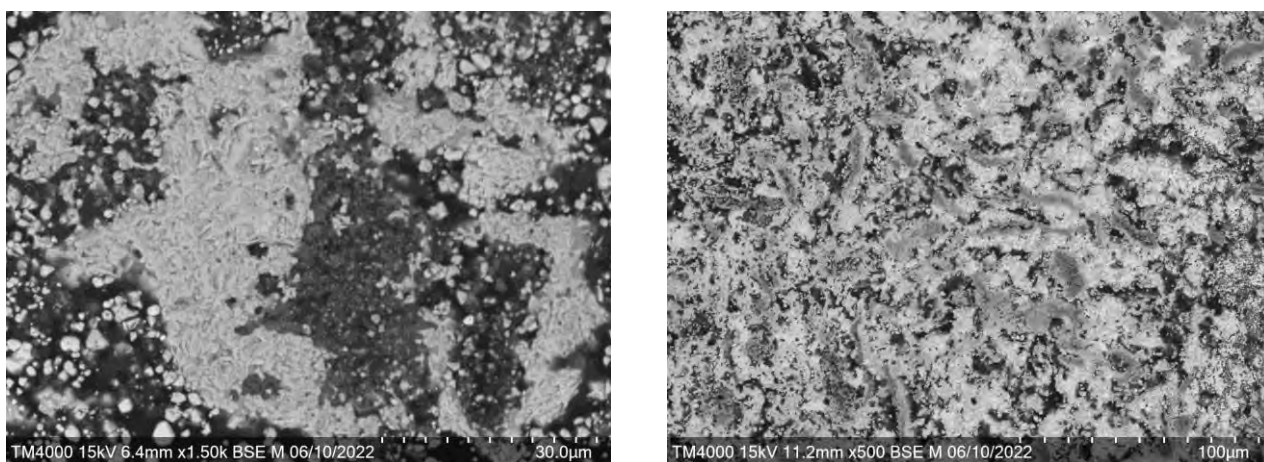


Рис. 1. SEM(BSE) – изображения образцов МАХ-фаз $(\text{Ti,Ta})_3\text{AlC}_2$ (а) и $(\text{Ti,Nb})_3\text{AlC}_2$ (б)

Характеризация МХенов также проводилась методами XRD, SEM, и EDS, а также TEM, AFM. Осадок от синтеза МХенов был дополнительно также исследован методом XRD. При помощи атомно-силового микроскопа NTEGRA (НТ-МДТ, Россия) были оценены латеральные размеры и толщины образовавшихся МХенов.

Характеризация образцов и обсуждение результатов. Изображения микроструктуры МАХ-фаз 312 состава $(\text{Ti,Ta})_3\text{AlC}_2$ и $(\text{Ti,Nb})_3\text{AlC}_2$, полученные на полированных поверхностях образцов непосредственно после спекания, приведены на рис. 1. На изображениях хорошо видна многофазная структура полученных образцов, в которой, согласно данным EDS-анализа, доминирующий объем занимает МАХ-фаза (светлые продолговатые кристаллиты на микрофотографиях). В качестве примесных фаз можно отметить карбиды в системе Ti-C, что говорит о том, что в ходе дальнейшего изготовления образцов аналогичного состава действенным способом увеличения выхода МАХ-фазы будет добавление большего избытка алюминия в исходную смесь. EDS-анализ также подтвердил искомый состав образовавшейся МАХ-фазы и стехиометрию Ti : Ta/Nb близкую к 1 : 1.

Результаты, полученные при помощи SEM-EDS, также подтверждаются данными порошковой рентгеновской дифракции, приведенными на рисунке 2 (пунктирные линии). Видно, что МАХ-фазы $(\text{Ti,Ta})_3\text{AlC}_2$ и $(\text{Ti,Nb})_3\text{AlC}_2$ обладают одинаковым набором отражений, соответствующих соединению со структурой типа Ti_3AlC_2 . На рис. 2 приведены также, в качестве сравнения, рентгенограммы для МХенов $(\text{Ti,Ta})_3\text{C}_2\text{T}_x$ и $(\text{Ti,Nb})_3\text{C}_2\text{T}_x$ (сплошные жирные линии) и осадков от их синтеза (сплошные тонкие линии). При сравнении спектров МАХ-фаз и осадков синтеза МХенов видно мало отличий, хотя можно отметить изменение взаимной интенсивности ряда отражений (за счет химического травления примесных фаз) и смещение пика МАХ-фазы при 9° в область 6° , что говорит о наличии МХенов (наиболее ве-

роятно, мультислоистых) в осадке. В спектрах, соответствующих коллоидным растворам МХенов, наблюдается смещение ряда отражений в сторону меньших углов, а также образование широких пиков при 10° и 25° , что говорит об успешном образовании МХенов на основе прекурсора МАХ-фаз. В то же время, наличие в спектре интенсивных отражений в области $30\text{--}40^\circ$ говорит о том, что часть МХенов осталась мультислоистой.

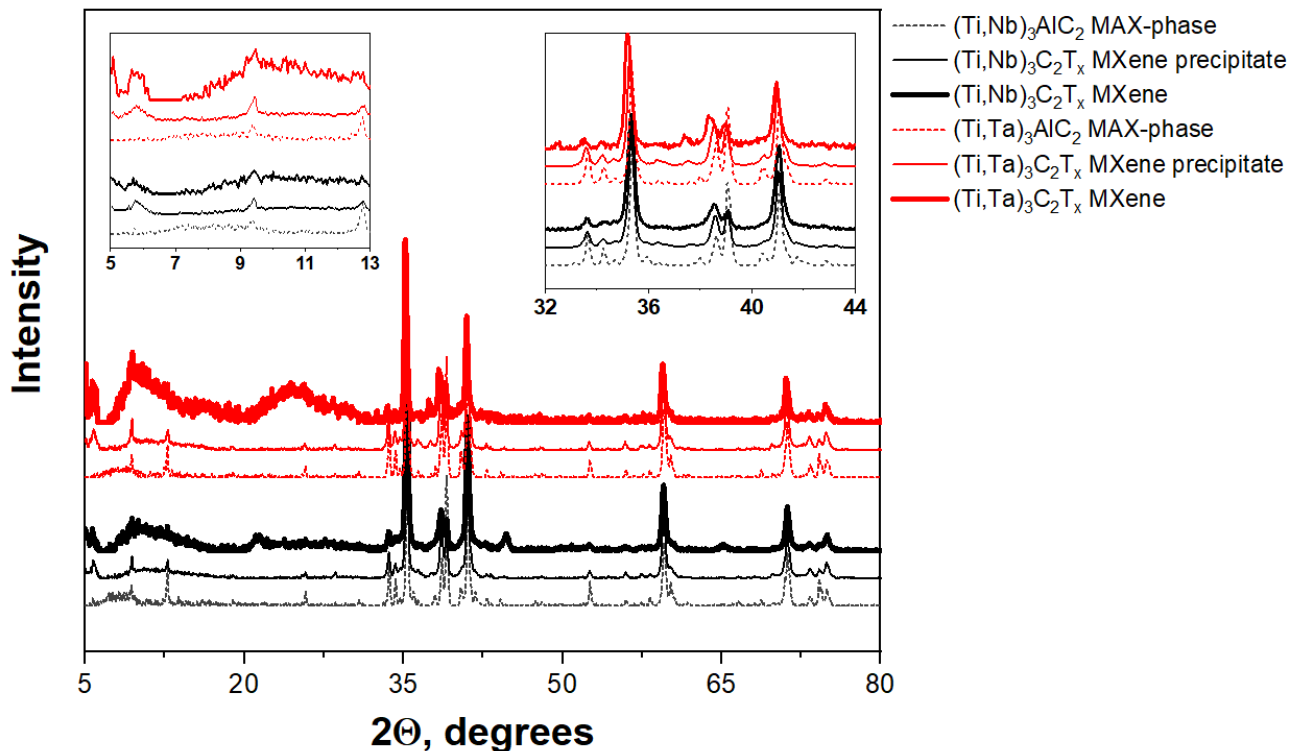


Рис. 2. Порошковые дифрактограммы образцов МАХ-фаз $(\text{Ti,Ta})_3\text{AlC}_2$ и $(\text{Ti,Nb})_3\text{AlC}_2$ (тонкие пунктирные линии), МХенов $(\text{Ti,Ta})_3\text{C}_2\text{T}_x$ и $(\text{Ti,Nb})_3\text{C}_2\text{T}_x$ (жирные сплошные линии) и осадков химического травления МАХ-фаз с образованием МХенов (тонкие сплошные линии). На вставках приведены увеличенные области отражений в области $5\text{--}13^\circ$ и $32\text{--}44^\circ$

AFM-анализ был проведен на единичных частицах МХенов состава $(\text{Ti,Ta})_3\text{C}_2\text{T}_x$ и $(\text{Ti,Nb})_3\text{C}_2\text{T}_x$, высушенных из коллоидного раствора. Для этого малое количество МХенов было растворено в высокочистом лабораторном спирте, после чего капля спиртового раствора наносилась на стеклянную подложку и высушивалась.

При помощи AFM удалось установить, что латеральные размеры МХенов составляют порядка $0.8\text{--}1$ мкм, а толщины – $20\text{--}60$ нм, что говорит о том, что образовавшиеся МХены состоят из нескольких десятков монослоев. Эти данные хорошо согласуются с результатами рентгеноструктурного анализа, представленного выше.

Заключение

Набор независимых методов характеристики образцов МАХ-фаз $(\text{Ti,Ta})_3\text{AlC}_2$ и $(\text{Ti,Nb})_3\text{AlC}_2$ и МХенов $(\text{Ti,Ta})_3\text{C}_2\text{T}_x$ и $(\text{Ti,Nb})_3\text{C}_2\text{T}_x$ позволяет уверенно утверждать о синтезе новых керамических материалов. В дальнейшем планируется исследовать оптические свойства МХенов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Соглашение № 22-19-00094).

ЛИТЕРАТУРА

1. Barsoum MW. MAX phases: properties of machinable ternary carbides and nitrides. Weinheim: John Wiley & Sons. 2013.
2. Radovic M, Barsoum MW. MAX phases: bridging the gap between metals and ceramics. *Am Ceram Soc Bull.* 2013; 92:20-27.
3. Barsoum MW, Radovic M. Elastic and mechanical properties of the MAX phases. *Annu Rev Mater Res.* 2011;41:195-227.
4. Jovic VD, Jovic BM, Gupta S, El-Raghy T, Barsoum MW. Corrosion behavior of selected MAX phases in NaOH, HCl, and H₂SO₄. *Corros Sci.* 2006;48:4274-4282.
5. Kushima A, Qian X, Zhao P, Zhang S, Li J. Rippllocations in van der Waals layers. *Nano Lett.* 2015; 15(2): 1302-8.
6. Gruber J, Lang AC, Griggs J, Taheri ML, Tucker GJ, Barsoum MW. Evidence for bulk rippllocations in layered solids. *Sci Rep.* 2016; 6: 1- 8.
7. Griggs J, Lang AC, Gruber J, Tucker GJ, Taheri ML, Barsoum MW. Spherical nanoindentation, modeling and transmission electron microscopy evidence for rippllocations in Ti₃SiC₂. *Acta Mater.* 2017; 131: 141-55.
8. Barsoum MW, Zhao X, Shanazarov S, Romanchuk A, Koumlis S, Pagano SJ, et al. Rippllocations: A universal deformation mechanism in layered solids. *Phys Rev Mater.* 2019; 3(1): 1- 9.
9. Wang XH, Zhou YC. Hot corrosion of Na₂SO₄-coated Ti₃AlC₂ in air at 700-1000°C. *J Electrochem Soc.* 2004; 151(9): 505- 11.
10. Nappé JC, Grosseau P, Audubert F, Guilhot B, Beauvy M, Benabdesselam M, et al. Damages induced by heavy ions in titanium silicon carbide: Effects of nuclear and electronic interactions at room temperature. *J Nucl Mater.* 2009; 385(2): 304- 7.
11. Gupta S. Tribology of MAX phases and their composites. Drexel University. 2006.
12. Sun ZM. Progress in research and development on MAX phases: a family of layered ternary compounds. *Int Mater Rev.* 2011; 56(3): 143- 66.
13. Abdullah M. Asiri. MXenes: Fundamentals and Applications. Materials Research Forum LLC, 2019. 222 p.

УДК 539.37

**ИССЛЕДОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТЕРМОПЛАСТОВ,
ПРИМЕНЯЕМЫХ В 3D-ПЕЧАТИ**

К. А. Драчёв, С. С. Булах

ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»
Хабаровск, e-mail: kirill@pnu.edu.ru

Проведены исследования акустических параметров (скорость и коэффициент затухания продольных волн) образцов из термопластиков при различных способах укладки слоев расплава методом FDM-печати. Показано влияние направления распространения волн и способа укладки на величину акустических параметров.

В настоящее время для получения изделий из полимерных материалов все большую популярность набирает применение различных аддитивных технологий.

Данные технологии хорошо подходят для быстрого прототипирования, при изготовлении тестовых образцов различных подвижных и стационарных конструкций.

Существует несколько видов аддитивных технологий, каждый из которых используется для решения разных производственных задач.

Благодаря им 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. Одним из распространенных и доступных является 3D-печать.

Ввиду широкого распространения данная технология стала популярна у исследователей. А именно изучение свойств изделий, полученных данным методом.

Возможность быстро создать рабочий прототип и посмотреть на его функциональные характеристики [1–3]. В большинстве работ, изучающих свойства изделий из термополимеров, исследования ведутся с готовыми изделиями, не беря в расчет, что параметры печати могут оказывать влияние на конечные свойства изделий.

В следствии изучения влияния параметров печати на свойства изделия можно изготавливать объекты с необходимыми характеристиками для выполнения определенных задач. Для проведения исследований использовался 3D-принтер Creality Ender 3 Pro [4] (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 термопластов с помощью 3D-принтера 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).

Печатающая головка перемещается в горизонтальной плоскости по заданной программе, нанося слои материала на предыдущие слои. Точность изготовления по такой технологии зависит от ориентирования конечного изделия в рабочем поле 3D-принтера и варьируется от 0,1 до 0,3 мм.

Прочность связи между слоями всегда ниже, чем начальная прочность материала. Из этого следует, что изделия анизотропны: их прочность по оси Z всегда меньше чем в плоскостях X и Y. Поэтому необходимо учитывать ориентацию изделий при проектировании.

Математическая модель образцов была подготовлена в системе CAD в формате STL и преобразована слайсера Ultimaker CURA [5] в управляющий машинный код (G-code), позволяющий принтеру изготовить деталь. Программа CURA (слайсер) ориентирует изделие, разбивает ее на горизонтальные сечения (слои) и рассчитывает оптимальные пути перемещения печатающей головки, температуру нагрева и скорость подачи материала.

В качестве материалов для исследования и последующего изготовления образцов использовались наиболее популярные в 3D-печати термопластики от российского производителя Bestfilament – PLA (полилактид), PETG (полиэтилентерефталатгликоль), SBS (стирол-бутадиен-стирол), ASA (акрилонитрил-стирол-акрилат). Полилактид – биоразлагаемый, биосовместимый, термопластичный, алифатический полиэфир, мономером которого является молочная кислота. Сырьем для производства служат ежегодно возобновляемые ресурсы, такие как кукуруза и сахарный тростник.

Полиэтилентерефталатгликоль представляет собой модификацию полиэтилентерефталата. Натуральный PETG это прозрачный аморфный материал. SBS – дивинил-стирольный термоэластопласт, получаемый в результате сополимеризации бутадиена со стиролом. Характеризуется низкой токсичностью и усадкой, а также высокой прочностью. Основное его преимущество в его прозрачности. Изделия, напечатанные этим пластиком и обработанные сольвентом, приобретают прозрачность окрашенного стекла.

Акрилонитрил-стирол-акрилат (ASA), также называемый акрило-стирол-акрилонитрилом, представляет собой аморфный термопласт, разработанный как альтернатива акрилонитрил-бутадиен-стиролу (ABS), но с улучшенной атмосферостойкостью.

Это сополимер стирола и акрилонитрила, модифицированный акрилатным каучуком. Он используется для общего прототипирования в 3D-печати, где его устойчивость к ультрафиолетовому излучению и механические свойства делают его отличным материалом для использования в принтерах для моделирования методом наплавления.

Для исследований были напечатаны образцы кубической формы с ребром 25 мм из выбранных материалов (PLA, PETG, SBS, ASA) с использованием заводских рекомендаций по параметрам печати изделий (табл. 1).



Рис. 1. 3D-принтер Creality Ender 3 Pro

Таблица 1

Параметры печати образцов

Параметр	Термополимер			
	PLA	PETG	ASA	SBS
Высота слоя, мм	0,2			
Ширина линии слоя, мм	0,4			
Температура экструдера, °С	210	220	235	245
Температура стола, °С	23	60	90	60
Заполнение, %	100			
Скорость перемещения сопла, мм/с	50			

При печати образцов использовалось две схемы заполнения внутреннего пространства: концентрическое заполнение и перекрестное укладка слоев при заполнении (рис. 2).



Рис. 2. Образцы термополимеров (слева – концентрическое заполнение образца, справа – перекрестное заполнение)

Экспериментальные исследования акустических свойств образцов, проведены на автоматизированной многоканальной измерительной системе для изучения акустических свойств различных материалов [6]. Блок-схема установки представлена на рис. 3.

Экспериментальные исследования акустических свойств образцов, проведены на автоматизированной многоканальной измерительной системе для изучения акустических свойств различных материалов [6]. Блок-схема установки представлена на рис. 3. В качестве излучающих (И) и принимающих (П) элементов автоматизированной системы использовались прямые совмещенные пьезо-

электрические датчики (ПЭП) с резонансной частотой 1,25 МГц. ПЭП устанавливаются на торец или поверхность образца (ТМ) с использованием специальной акустической контактной жидкости. Скорость акустических волн определялась на основе измерения времени прохождения ультразвукового импульса от излучателя до приемника. Коэффициент затухания α определялся как относительное уменьшение амплитуды первого прошедшего импульса к амплитуде переотраженного импульса при распространении сигнала по образцу. Время прихода ультразвукового t определялось по началу регистрации первой полуволны, амплитуда которой на 10% отличается от уровня фонового сигнала в усредненной осциллограмме сигнала (рис. 4). В расчетах учитывались поправки для t , связанные с работой аппаратуры и пьезодатчиками. Анализ полученных сигналов позволял определять скорость продольной волны для каждого образца в зависимости от расположения пьезоэлектрических датчиков относительно слоев укладки нитей расплава. Погрешность измерения скорости в экспериментах составляла $\Delta C = \pm 10$ м/с. Более подробно вышеописанные методики определения скорости и коэффициента затухания акустических волн описаны в работе [7].

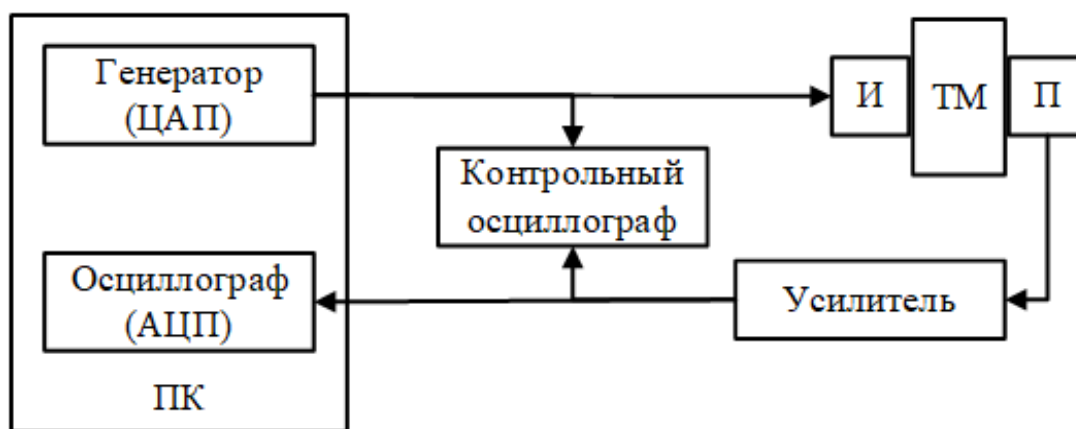


Рис. 3. Блок-схема автоматизированной системы

Распространение акустических волн в образцах исследовалось по двум основным направлениям: вдоль слоев, формирующих образец при печати, и поперек слоев (пьезопреобразователи устанавливались на противоположных сторонах образцов). Данный метод измерения был выбран в связи с тем, что образцы имеют не изотропную структуру вследствие послойного их формирования.

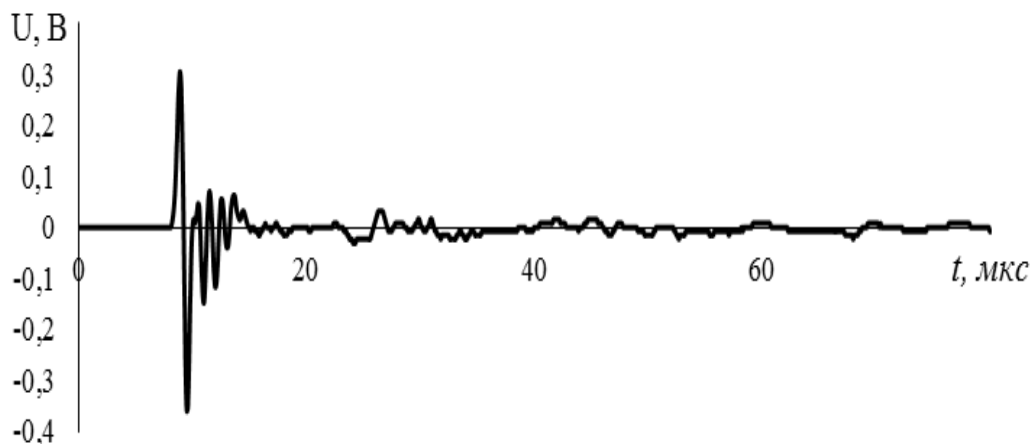


Рис. 4. Осциллограмма акустического сигнала прошедшего сквозь образец

Проведенные измерения показали, что на величину скорости продольной волны влияет направление ее распространения относительно формирующих слоев укладки термопластика. При распространении вдоль слоев скорость распространения выше, чем при распространении поперек слоев. Данный эффект наблюдается на всех исследованных образцах (табл. 2). При использовании «концентрического» способа укладки слоев возникающая разница в скоростях меньше, чем при «перекрестном» способе.

Таблица 2

Величина скорости и коэффициента затухания продольной волны в образцах

Наименование материала образца	Способ укладки нитей в формируемом слое	Скорость продольной волны, м/с		Коэффициент затухания продольной волны в материале образца, дБ/м	
		Поперек слоев	Вдоль слоев	Поперек слоев	Вдоль слоев
PLA	Перекрестный	1925	2064	850	868
	Концентрический	2029	2047	757	758
PETG	Перекрестный	1660	1843	779	700
	Концентрический	1741	1783	582	554
SBS	Перекрестный	1637	1837	756	790
	Концентрический	1640	1821	564	538
ASA	Перекрестный	1310	1459	813	725
	Концентрический	1379	1518	694	698

Коэффициент α для продольной волны практически не зависит (в пределах погрешности) от направления распространения волны относительно слоев укладки термопластика (Таблица 2). Однако наблюдается зависимость от режима укладки нитей расплава термопластика в процессе печати. При использовании «перекрестной» схемы укладки нитей коэффициент затухания волны выше, чем при использовании «концентрической» схемы. Средняя величина коэффициента затухания в образцах термопластиков составила 700-800 дБ/м.

Таким образом, проведенные исследования показывают, что акустические свойства образцов из термопластиков зависят от примененной схемы укладки слоев при печати на 3D-принтере. Однако необходимо провести дополнительные экспериментальные и теоретические исследования в этом вопросе для выявления других технологических режимов и степени заполнения внутреннего пространства изделий (образцов) с целью неразрушающего контроля таких изделий.

Также необходимо производить исследования как прочностных, так и деформационных свойств данного материала в условиях ползучести.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Полимерные композиционные материалы на термопластичной матрице / Е. Н. Каблов, Л. В. Семенова, Г. Н. Петрова [и др.] // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2016. Т. 59. № 10. С. 61-71.
2. Полимерные композиционные материалы конструкционного назначения с функциональными свойствами / С. В. Кондрашов, К. А. Шашкеев, Г. Н. Петрова, И. В. Мекалина // Авиационные материалы и технологии. 2017. № S. С. 405-419. DOI 10.18577/2071-9140-2017-0-S-405-419.
3. Павлюк, Б. Ф. Основные направления в области разработки полимерных функциональных материалов // Авиационные материалы и технологии. 2017. № S. С. 388-392. DOI 10.18577/2071-9140-2017-0-S-388-392.
4. Обзор 3D-принтера CREALITY Ender 3 Pro. URL: <https://top3dshop.ru/blog/3d-printer-creality-ender-3-pro-review.html>.
5. Ultimaker Cura: Powerful, easy-to-use 3D printing software. URL: <https://ultimaker.com/software/ultimaker-cura>.
6. Драчев К. А., Римлянд В. И., Савченко В. В. Автоматизированная измерительная система для проведения акустических измерений // Вестник Тихоокеанского государственного университета. 2017. № 1(44). С. 13-20.
7. Драчев К. А., Римлянд В. И. Измерения акустических параметров с использованием радиопульса // Измерительная техника. 2017. № 6. С. 60-64.

СОЗДАНИЕ УСТАНОВКИ ДЛЯ СВЕТОВОЙ КРИПТОГРАФИИ

В. М. Петкевич, В. Г. Ефременко, С. А. Пячин

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
Хабаровск, e-mail: seva_seva2312@mail.ru

Цель работы заключалась в создании установки, которая реализуют передачу и прием шифрованного сигнала в виде набора импульсов поляризованного света. В состав собранной установки входит лазерный модуль для Ардуино КУ-008 с длиной волны 650 нм, два фотодатчика, кристалл кальцита, обладающий способностью к двулучепреломлению, поляроиды, светоразделительная система лучей различной поляризационной направленности. Проведены испытания лазерной установки.

Способы передачи информации с помощью электронных устройств нашли широкое распространение в повседневной жизни. Помимо большого количества достоинств, подобные методы обладают и существенным недостатком: существует вероятность утечки информации. Эту проблему решает квантовая криптография [1–5].

Для использования оптической схемы шифрования необходимо выполнение двух условий. Во-первых, использовать два связанных между собой ключа при помощи теории чисел. Первый открытый ключ применяется для шифрования, второй секретный ключ, известный только получателю, служит для дешифрования. Во-вторых, необходим генератор случайных чисел, в выходном сигнале которого нет какой-либо закономерности. В качестве такого источника можно использовать излучение световых волн множества определенных атомов, которое представляет собой набор хаотически поляризованных световых векторов. При пропускании такого света через поляризатор можно фильтровать электромагнитные волны определенной поляризационной ориентации.

Направление вектора поляризации можно представить в виде логических символов – «единица» и «ноль», как указано на рис. 1. Отправитель и получатель выбирают определенный базис в качестве ключа шифрования, далее пропускают закодированный набор случайных чисел, расшифровать который можно только при знании базиса.

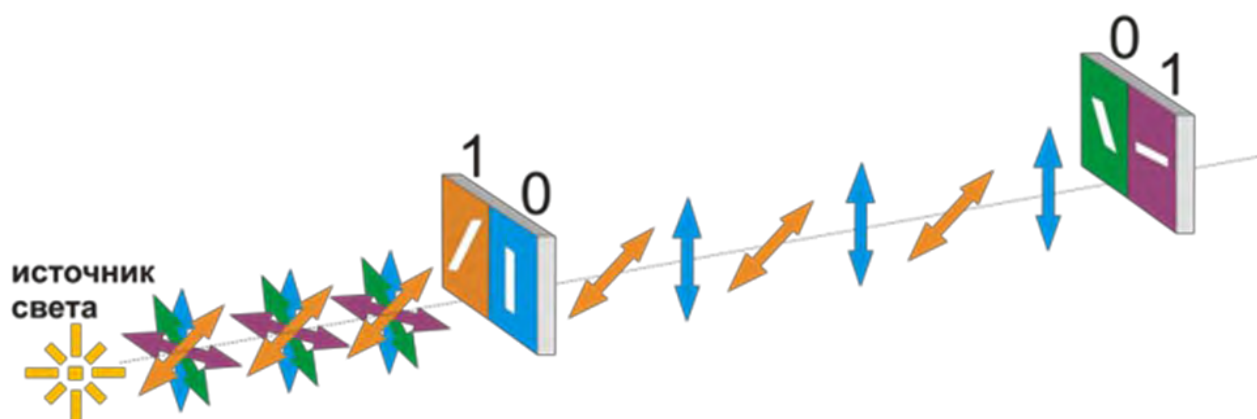


Рис. 1. Схема формирования зашифрованного светового сигнала

Цель работы заключалась в создании установки, которая реализуют передачу и прием шифрованного сигнала в виде набора световых импульсов различной поляризации.

В состав собранной установки входят: лазерный модуль для Ардуино KY-008 с длиной волны 650 нм; два фотодатчика; кристалл кальцита, обладающий способностью к двулучепреломлению; поляризаторы; светоразделительная система лучей различной поляризационной направленности. Управление работой фоторезисторов и лазерного модуля осуществляется с помощью плат Arduino Uno, схема подключения которых представлена на рис. 2. Программа управления написана на языке программирования Arduino C.

Внешний вид установки представлен на рис. 3. Лазерный луч проходит через кристалл кальцита и разделяется на обыкновенный и необыкновенный луч с взаимноперпендикулярной поляризацией. Прохождение лучей через анализатор зависит от положения его главной плоскости. Интенсивность прошедшего через анализатор луча определяется с помощью фотодатчика.

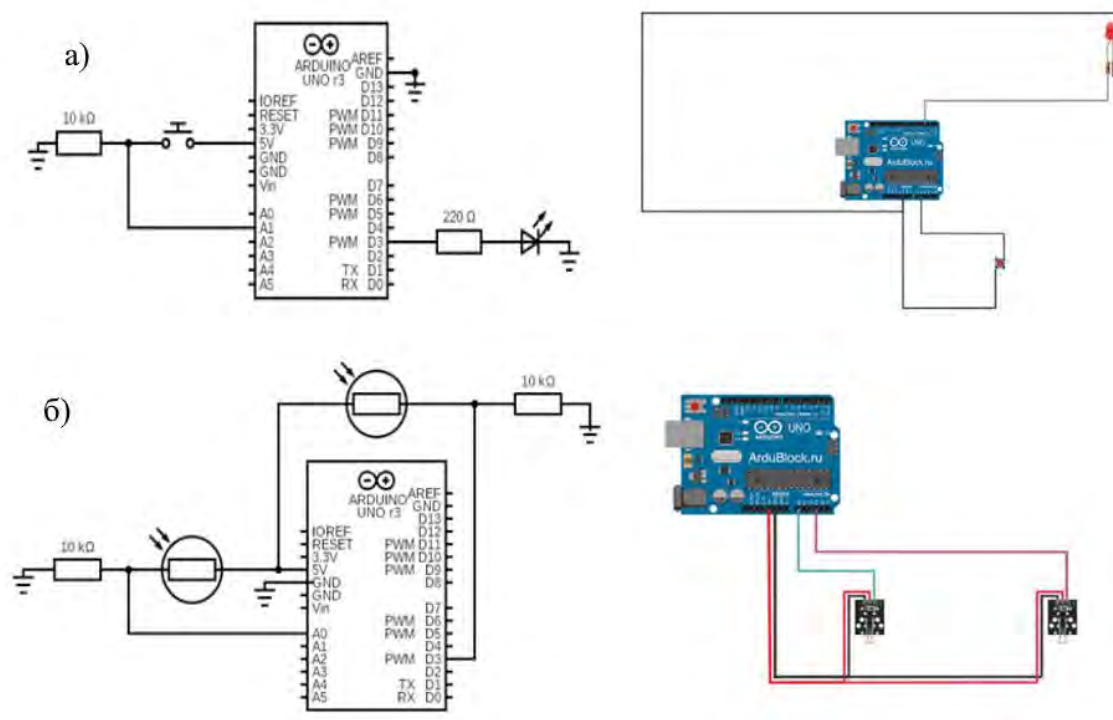


Рис. 2. Электрическая (слева) и монтажная (справа) схемы:
 а) управления лазером; б) управления фоторезисторами

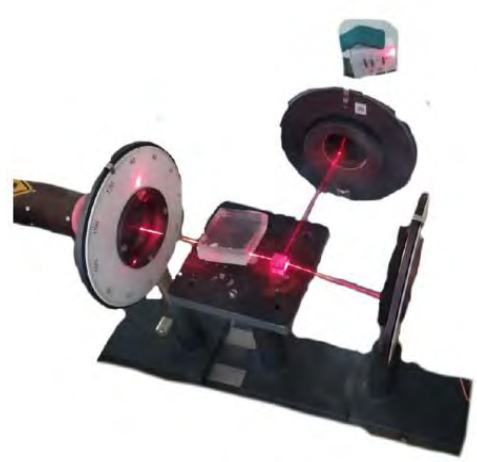


Рис. 3. Внешний вид экспериментальной установки

Отправитель и получатель выбирают вертикально-горизонтальный базис. Отправитель ставит поляризатор в вертикальное положение и пропускает световой импульс лазера, тем самым подавая «логическую единицу». Получатель принимает обыкновенный и необыкновенный лучи, выходящие из кристалла кальцита, с помощью фоторезисторов. Аналоговый вход А0 (рис. 2) платы Arduino Uno принимает изменение напряжения и преобразует его в числовое значение от 0 до 1023. При увеличении интенсивности света сопротивление фоторезистора уменьшается, а поскольку напряжение прямо пропорционально сопротивлению, то оцифрованные значения напряжения тоже уменьшатся.

$$U = R_{\phi} \cdot I \quad (1)$$

где U – напряжение на фоторезисторе; R – сопротивление фоторезистора; I – сила тока на фоторезисторе.

На рис. 4, а изображена схема движения луча с вертикальной плоскостью поляризации. Дошедший до фоторезистора луч вызывает увеличение силы тока в цепи, которая регистрируется АЦП платы, аналоговый пин номер 3. Таким образом, формируется «логическая единица». Горизонтальное положение плоскости поляризации соответствует «логическому нулю». Тогда отправитель поворачивает поляризатор на 90° и передает импульс. На рис. 4, б показано движение луча с горизонтальным вектором поляризации. Дошедший до фоторезистора луч вызовет увеличение силы тока во втором датчике. Так получается «логический ноль».

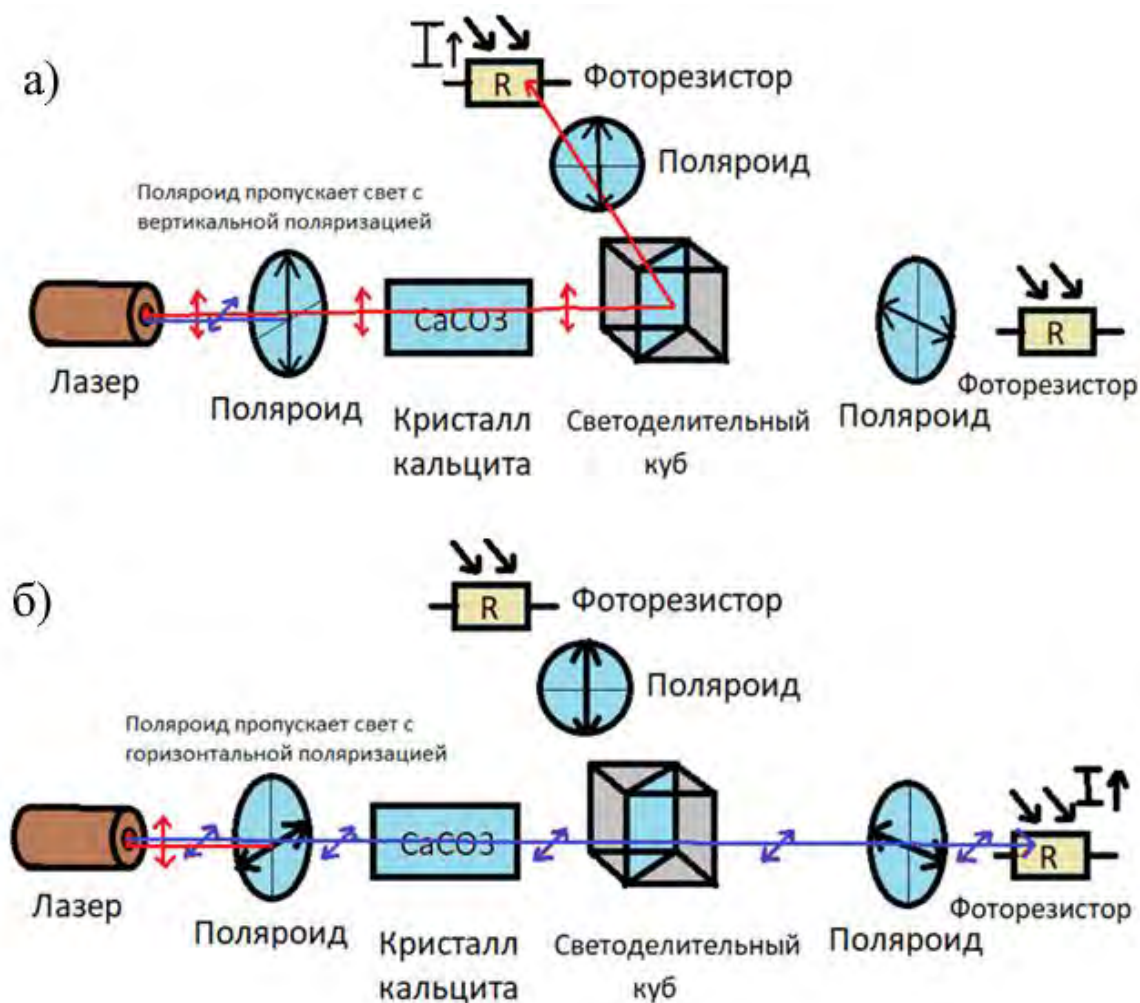


Рис. 4. Генерация и прием импульса с (а) вертикальной и (б) горизонтальной поляризацией

Для примера на рис. 5 изображены графики изменений оцифрованных напряжений на аналоговых пинах с течением времени во время передачи шести световых сигналов, соответствующих набору 101011.

Таким образом, изменяя положение входного поляризатора, можно передавать зашифрованный сигнал в виде набора световых импульсов разной поляризации. Собрана установка, которая реализует передачу закодированной информации в виде световых импульсов с разными направлениями поляризации.

Пока скорость передачи импульсов низкая из-за необходимости изменять вручную плоскость поляризаторов. В дальнейшем планируется усовершенствовать установку путем использования оптических кристаллов, способных вращать плоскость поляризации при приложении внешних полей.

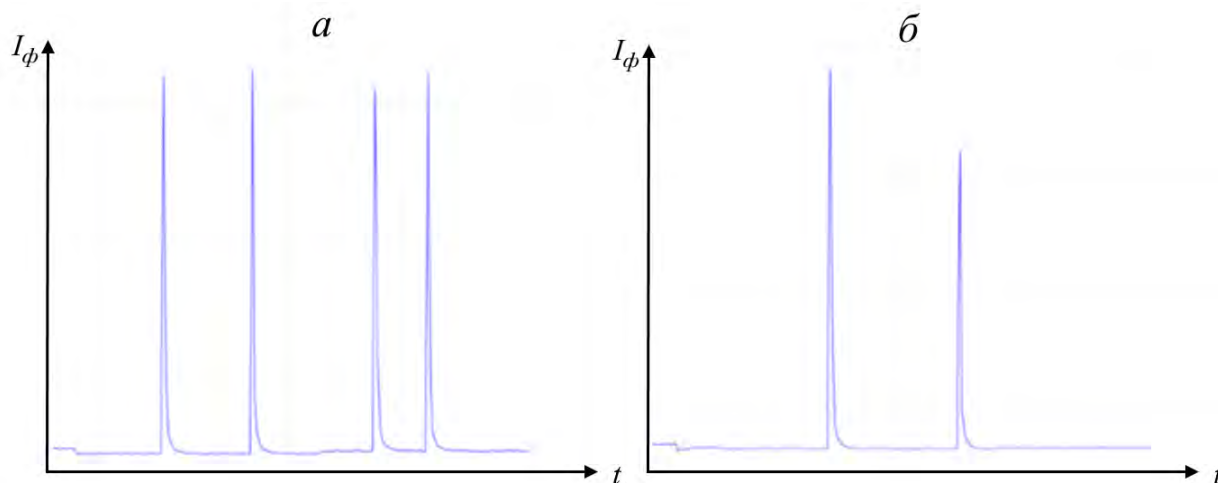


Рис. 5. Изменения напряжений на аналоговых пинах с течением времени:
а) вертикальная поляризация; б) горизонтальная поляризация

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Вашукевич Е. А., Лосев А. С., Голубева Т. Ю. Томография квантовых состояний : учебно-методическое пособие. СПб: Типография «Фалкон Принт», 2021. 36 с.
2. Филиппов С. Н. Квантовые поляризационные состояния фотонов : учебно-методическое пособие. Москва: МФТИ, 2017. 36 с.
3. Основы квантовой коммуникации : учебно-методическое пособие. Часть 1 / А. В. Козубов, А. А. Гайдаш, С. М. Кынев, В. И. Егоров, А. Е. Иванова, А. В. Глейм, Г. П. Мирошниченко. СПб: университет ИТМО, 2019. 85 с.
4. Ориентационная зависимость пропускания системы поляризатор-кристалл-кристалланализатор / А. В. Сюй, Н. А. Кравцов, В. И. Строганов, В. В. Криштоп // Оптический журнал. 2007. Т. 74. № 7. С. 33-36.
5. Меланхолин Н. М. Методы исследования оптических свойств кристаллов. М.: Наука, 1970. 155 с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕРМОПАРЫ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ПЛЕНОК СИЛИЦИДА МАГНИЯ НА КРЕМНИИ

А. В. Поляков, И. О. Шолыгин, Т. Ш. Султанов, Д. С. Гаврилина, Д. В. Фомин

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
Благовещенск, e-mail: polyakov_a_1999@mail.ru

Пленки Mg_2Si , обладающие полупроводниковыми свойствами, представляют большой интерес как материал для приборов оптоэлектроники и термоэлектроники. Однако формирование пленок этого силицида методом твердофазной эпитаксии связано с рядом трудностей. Так при температуре подложки выше $200\text{ }^\circ\text{C}$ происходит активная десорбция атомов Mg. В связи с этим при проведении ростовых экспериментов необходим высокоточный температурный контроль, а также определение надёжных способов низкотемпературного прогрева образца. В данной работе представлены результаты поиска этих методов с использованием термопары К-типа. В первом эксперименте использовался косвенный прогрев образца. При этом в результате калибровки источника косвенного прогрева термопарой, было установлено, что источник в виде кремниевой пластины, расположенный на расстоянии $d = 3\text{ мм}$ и разогретый до $T_{н.} = 1200\text{ }^\circ\text{C}$ нагревает образец до $T_{н.} = 101,2\text{ }^\circ\text{C}$. Во втором эксперименте, через образец пропускали постоянный ток. Степень нагрева образца определялась также с помощью термопары. В результате было установлено, что температура подложки $T_{н.} = 199,5\text{ }^\circ\text{C}$ достигается при токе $I_{н.} = 7\text{ мА}$. С использованием полученных данных были сформированы две пленки, содержащие Si и Mg. Методом рентгенофазового анализа было установлено наличие Mg_2Si во втором образце, полученном при температуре $199,5\text{ }^\circ\text{C}$.

Из справочной литературы известно, что тонкопленочный Mg_2Si обладает люминесценцией в ближнем инфракрасном (от 1100 до 1500 нм) и видимом (от 580 до 630 нм) спектрах [1]. Также силициду магния свойственна фотопроводимость [1, 2]. Исследование фотоэлектрических свойств показало, что фоточувствительность при воздействии лазерного излучения мощностью 2 мВт при 1310 нм составляет около 22 мА/Вт и 42 мА/Вт при напряжении смещения 0 и минус 0,1 В соответственно [2]. При росте обратного напряжения смещения величина светочувствительности увеличивается [2]. Спектральная фоточувствительность при нулевом напряжении смещения наблюдается от 1200 до 2100 нм, при этом она монотонно возрастает с энергией фотонов выше 0,6 эВ [2]. Также важно отметить, что Mg_2Si обладает высокой термоэлектрической мощностью [3]. Эти факты позволяют рассматривать Mg_2Si как материал, перспективный для фото- и термодатчиков. С целью снижения стоимости их производства и повышения эффективности, необходимо использовать силицид магния в низкотемпературном состоянии. Поэтому формирование и исследование тонких пленок Mg_2Si является актуальной научной задачей в настоящее время.

По результатам экспериментов, представленных в работах [4–7], установлено, что скорость десорбции атомов магния увеличивается при температуре выше $200\text{ }^\circ\text{C}$. В лаборатории физики поверхности научно-образовательного центра ФГБОУ ВО АмГУ в последние несколько лет формируются и исследуются тонкие пленки разных силицидов: Ca_2Si , Ca_3Si_4 , $BaSi_2$, Mg_2Si [8–10 и др.]. Для формирования, например, дисилицида бария использовалась температура нагрева образца свыше $600\text{ }^\circ\text{C}$. В связи с тем, что значения токов, используемых для нагрева, лежали в диапазоне от 1 до 8 А, сложностей при калибровке в этом случае не возникало. Так как для силицида магния необходима температура до $200\text{ }^\circ\text{C}$, то через подложку необходимо пропускать постоянный ток в диапазоне от 1 до 10 мА. Для этого потребовался прецизионный источник тока, а также возникла необходимость провести калибровоч-

ные эксперименты с использованием термопары К-типа. Для нее был изготовлен держатель, установленный в СВВ камеру Varian вместо одного из образцов (рис. 1).



Рис. 1. Термопара К-типа, установленная на центральный держатель образца

Первый эксперимент проводился по схеме, представленной на рис. 2, а, и заключался в измерении температуры косвенного прогрева от источника Si.

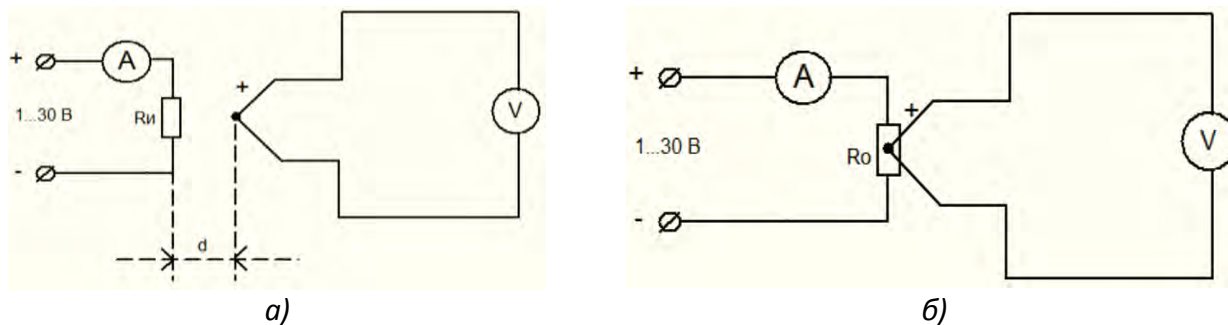


Рис. 2. Схемы калибровки термопарой К-типа: косвенным прогревом без образца (а), совместно с прогревом образца (б)

Значение напряжения на концах термопары, подключенной к токовводам, измеряли мультиметром, Victor 88В, включенном в режиме вольтметра в диапазоне от 0 до 200 мВ с погрешностью измерения 0,5 %.

Все измерения проводились при комнатной температуре. Источник кремния вырезали из промышленной шайбы FZN – 100 Si (111) n-типа проводимости с удельным сопротивлением от 50 до 85 Ом·см.

Для оценки температуры косвенного прогрева образца термочувствительный элемент в процессе калибровки постепенно приближали к источнику кремния на расстояние от 10 до 3 мм между ними.

Данный эксперимент проводили при температуре источника Si от 1000 °С до 1200 °С с интервалом температур 25 °С. В результате путем проведенного измерения установлено, что косвенный прогрев образца от источника Si, расположенного на расстоянии $d = 3$ мм и разогретого до $T_{и.} = 1200$ °С приводит к нагреву подложки до $T_{п} = 101,2$ °С.

Второй эксперимент проводился по схеме, представленной на рис. 2, б.

Термопара К-типа соприкасалась с кремниевой пластиной, вырезанной из шайбы КЭФ-100 Si (111) с удельным сопротивлением от 2 до 15 Ом·см с такими же размерами, как и источник.

Термочувствительный элемент в процессе калибровки постепенно нагревался от образца Si, при пропускании через последний постоянного электрического тока. Этот эксперимент проводили при температуре образца от 400 °С до 900 °С вначале по известным данным с целью калибровки самой термопары, определения поправочного коэффициента.

Расчет изменения температуры образца $\Delta T_{п}$ проводился по формуле (1):

$$\Delta T_{п} = T_{п} - T_0, \quad (1)$$

где $T_{п}$ – температура образца при пропускании через него постоянного тока; T_0 – комнатная температура образца и термопары ($T_0 = 24$ °С).

По измеренным значениям напряжения определили изменение температуры рабочего конца термопары с помощью таблицы, отражающей зависимость E ($\Delta T_{терм.}$) [11].

Поправочный коэффициент, учитывающий частичное поглощение тепла образца термопарой, рассчитали по формуле (2):

$$K = \frac{\Delta T_{п}}{\Delta T_{терм.}} \quad (2)$$

Результаты измерения напряжения представлены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты измерения напряжения на концах термопары и расчетов по формулам (1) и (2)

$T_{п.}, ^\circ\text{C}$	$\Delta T_{п.}, ^\circ\text{C}$	$E, \text{ мВ}$	$\Delta T_{терм.}, ^\circ\text{C}$	K	$T_{п.}, ^\circ\text{C}$	$\Delta T_{п.}, ^\circ\text{C}$	$E, \text{ мВ}$	$\Delta T_{терм.}, ^\circ\text{C}$	K
400	376	3,2	78	4,8	660	636	5,9	144	4,4
420	396	3,4	83	4,8	680	656	6,1	149	4,4
440	416	3,6	88	4,7	700	676	6,2	152	4,4
460	436	3,8	93	4,7	720	696	6,5	159	4,4
480	456	4,0	98	4,7	740	716	6,7	164	4,4
500	476	4,2	102	4,7	760	736	6,9	169	4,4
520	496	4,5	110	4,5	780	756	7,0	171	4,4
540	516	4,7	115	4,5	800	776	7,1	174	4,5
560	536	4,9	120	4,5	820	796	7,3	179	4,4
580	556	5,1	124	4,5	840	816	7,5	184	4,4
600	576	5,3	129	4,5	860	836	7,6	187	4,5
620	596	5,5	134	4,4	880	856	7,7	189	4,5
640	616	5,7	139	4,4	900	876	7,9	194	4,5

Далее провели калибровку прецизионного источника постоянного тока с целью определения величины $I_{п.}$, который необходимо пропускать через подложку для получения температур, благоприятных для формирования Mg_2Si . Расчет температуры прямого прогрева образца проводился по формуле (3):

$$T_{п.} = T_0 + \langle K \rangle \cdot \Delta T_{терм.} \quad (3)$$

При усреднении поправочных коэффициентов K_1 из таблицы 1 получили, что $\langle K \rangle = 4,5$. Величину $\Delta T_{терм.}$ определяли по измеренному значению напряжения на концах термопары (см. табл. 2).

Результаты измерения напряжения на концах термопары и расчетов по формуле (3)

I, мА	E, мВ	$\Delta T_{\text{терм.}}, ^\circ\text{C}$	$T_{\text{п.}}, ^\circ\text{C}$
1	0,8	20	114,0
2	1,1	28	150,0
3	1,2	30	159,0
4	1,3	33	172,5
5	1,4	35	181,5
6	1,5	37	190,5
7	1,6	39	199,5
8	1,7	42	213,0
9	1,8	45	226,5
10	1,9	48	240,0

По результатам данного эксперимента было установлено, что $T_{\text{п.}} = 199,5 ^\circ\text{C}$ достигается при $I_{\text{п.}} = 7 \text{ мА}$.

Результаты проведенных измерений и расчетов использовались для формирования тонких плёнок силицида магния методом твердофазной эпитаксии. Для первого образца температура косвенного прогрева подложки составила $101,2 ^\circ\text{C}$; для второго образца – $199,5 ^\circ\text{C}$.

Первым этапом на всех подложках Si (111) был сформирован буферный слой кремния толщиной 60 нм. Далее эксперимент проводился разными способами для каждого образца. Для первого образца на буферный слой кремния вначале осадили затравочный слой Mg толщиной 1,5 нм. Затем было проведено соосаждение магния и кремния с соотношением скоростей 16:1. Для второго образца на буферном слое поочередно осаждали слои магния и кремния толщиной 20 и 10 нм соответственно. Осаждение этих слоев повторяли трехкратно. В результате данных экспериментов методом ТФЭ были сформированы тонкие пленки толщиной 100 нм для первого образца и 90 нм для второго образца.

Для того чтобы установить, присутствует ли в составе сформированных пленок Mg_2Si , их исследовали методом рентгенофазового анализа.

Рентгенограммы первого и второго образцов представлены на рис. 3.

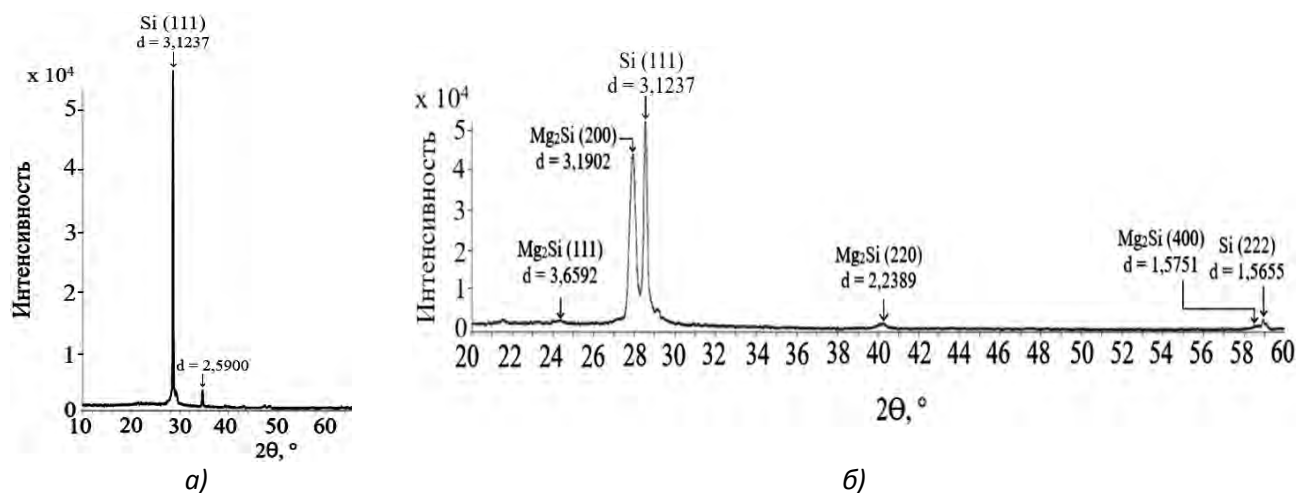


Рис. 3. Рентгенограмма образца 1 (а), образца 2 (б)

Из анализа рентгеновских спектров установлено, что на дифрактограммах обоих образцов наблюдается пик наибольшей интенсивности при $2\Theta = 28,5^\circ$, который принадлежит к материалу подложки – Si (111). Возможно присутствие в составе пленки первого образца Mg, на что указывает пик при $2\Theta = 34,6^\circ$. На спектре второго образца идентифицирована фаза Mg_2Si . Наличие пика высокой интенсивности при $2\Theta = 27,9^\circ$ свидетельствует о преобладающем росте Mg_2Si вдоль кристаллографического направления (200).

Таким образом, по результатам данной работы можно заключить, что косвенный прогрев образца источником Si, расположенным на расстоянии $d = 3$ мм и разогретым до $T_{и} = 1200$ °С, приводит к нагреву этого образца до $T_{п} = 101,2$ °С, что недостаточно для формирования Mg_2Si . Во втором случае, путем пропускания постоянного тока $I_{п} = 7$ мА через образец, удалось разогреть его до температуры $199,5$ °С, что в совокупности с послойным осаждением привело, согласно данным рентгенофазового анализа, к формированию пленки, содержащей Mg_2Si .

ЛИТЕРАТУРА

1. Probing the Mg_2Si/Si (111) heterojunction for photovoltaic applications /A. Shevlyagin [et al.] // Solar Energy. 211. 2020. P. 383-395.
2. Fabrication of Mg_2Si pn-junction Photodiode with Shallow Mesa-structure and Ring Electrode / T. Akiyama, N. Hori, S. Tanigawa, D. Tsuya, H. Udono // 011102 JJAP Conf. Proc. 5. 011102. 2017.
3. Galkin N.G., Galkin K. N., Vavanova S. V. Multilayer Si (111) / Mg_2Si clusters / Si heterostructures: formation, optical and thermoelectric properties // E-journal of Surface Science and Nanotechnology. Vol. 3. 2005. P. 12-20.
4. Mahan E.J., Vantomme A., Langouche G. Semiconducting Mg_2Si thin films prepared by molecular-beam epitaxy // Physical review. B. Vol. 54. № 23. 1996. P. 16965-16971.
5. Vantomme A. Thin film growth of semiconducting Mg_2Si by codeposition / J. E. Mahan, G. Langouche, J. P. Becker, M. Van Bael, K. Temst, C. Van Haesenn-donck // Appl. Phys. Lett. V. 70. № 9. 1997. P. 1086-1088.
6. Оптические свойства пленки полупроводникового силицида Mg_2Si на Si (111) в области температурной стабильности / С. А. Доценко, Д. В. Фомин, К. Н. Галкин, Н. Г. Галкин // Химическая физика и мезоскопия. Т. 12. вып. 3. 2010. С. 376-381.
7. Synthesis of Mg_2Si precipitates in Mg-implanted silicon by pulsed ion-beam treatment / S. V. Vavanova [et al.] // Physics Procedia. 23. 2012. P. 29-32.
8. SPE grown $BaSi_2$ on Si(111) substrates: Optical and photoelectric properties of films and diode heterostructures on their base / N. G. Galkin, D. L. Goroshko, K. N. Galkin [et al.] // Japanese Journal of Applied Physics. 2020. Vol. 59. No SF. P. SFFA11. DOI 10.35848/1347-4065/ab6b76.
9. Comparison of crystal and phonon structures for polycrystalline $BaSi_2$ films grown by spe method on Si(111) substrate / N. G. Galkin, K. N Galkin, D. V. Fomin, V. L. Dubov, S. A. Pyachin, A. A. Burkov // Diffusion and Defect Data. Pt A Defect and Diffusion Forum. 2018. Т. 386 DDF. С. 48-54.
10. Фомин Д. В. Формирование и полупроводниковые свойства тонких слоев на основе Fe и Ca_2Si на Si(111) : специальность 01.04.10 «Физика полупроводников» : диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Владивосток, 2010. 137 с.
11. ГОСТ Р 8.585-2001. Государственная система обеспечения единства измерений. Термпары. Номинальные статические характеристики преобразования : введен 2002-07-01 / Госстандарт России. Москва : ИПК Изд-во стандартов, 2002 г. III, 77 с.

**ИЗМЕНЕНИЕ РЕФРАКТИВНЫХ СВОЙСТВ СУСПЕНЗИИ
ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ****С. А. Пячин, В. И. Иванов, В. С. Цай**ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
Хабаровск, e-mail: pyachin@mail.ru

Поведено математическое моделирование рефрактивных свойств полидисперсной суспензии при ее облучении однородным потоком лазерного излучения. Под действием силы рэлеевского рассеяния более крупные частицы передвигаются в направлении лазерного луча быстрее, чем мелкие. Поэтому происходит светоиндуцированное перераспределение частиц внутри дисперсной среды, что влияет на ее оптические свойства. Вычисления показывают, что показатель преломления суспензии не постоянен и изменяется во время лазерного облучения. С увеличением продолжительности воздействия лазерного излучения показатель преломления уменьшается с 1,338 до 1,335 в центральной области кюветы, а вблизи дна кюветы возрастает до 1,346.

При создании микроустройств, анализе газообразных и жидких проб, химическом синтезе возникает необходимость перемещать микро- и наночастицы по заданной траектории в определенное место. В настоящее время разработаны различные физические способы, позволяющие прецизионно перемещать молекулы, ионы и мелкие частицы. Эти методы основаны на применении внешних полей различной природы, таких как постоянное и переменное электрическое поле; световые волны в виде лазерного излучения; акустические и магнитные поля [1]. Среди них широкое распространение получил способ, называемый «оптическим пинцетом» [2, 3]. В основе метода лежит применение сфокусированного лазерного излучения для захвата и переноса микрочастиц.

Существуют другой подход, нацеленный на разделение частиц внутри дисперсной системы, который также использует лазерное излучение для создания направленного движения частиц при облучении суспензии. Этот метод подробно описан в работах [4, 5]. Для нестационарного фотоиндуцированного массопереноса в дисперсной системе характерно то, что скорость движения частицы пропорциональна ее радиусу в шестой степени. В результате этого более крупные частицы перемещаются быстрее, чем мелкие. Это приводит к тому, что смесь нанопорошков приобретает неоднородность по плотности, что должно отражаться на оптических характеристиках такой системы.

Цель работы заключалась в исследовании влияния светоиндуцированных диффузионных процессов на оптические (рефрактивные) свойства наносуспензии с неоднородным распределением частиц по их размерам. Для решения этой задачи было проведено математическое моделирование изменения концентрации наночастиц в жидкой среде, облучаемой мощным световым потоком, и выявлены зависимости показателя преломления от продолжительности лазерного облучения.

Рассмотрена задача диффузионного перемещения наночастиц в жидкости, поверхность которой облучается однородным потоком лазерного излучения. Влияние гравитационных сил на распределение частиц в жидкости не учитывается, поскольку размер частиц менее одного микрометра. Предполагаем, что суспензия заполняет кювету глубиной l и толщиной d (рис. 1). Мощный лазерный поток воздействует на верхнюю поверхность суспензии ($z = 0$). Диагностический луч проходит через боковую поверхность кюветы и отклоняется от своего первоначального направления на некоторый угол φ .

Изменение объемной концентрации частиц $C(z,t)$ в такой суспензии можно определить на основе решения одномерного диффузионного уравнения с учетом дополнительного потока, возникающего под действием сил светового давления,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v \frac{\partial c}{\partial z}, \quad (1)$$

где v – скорость равномерного движения частиц; D – коэффициент диффузии.

Скорость перемещения частиц зависит от длины волны λ и интенсивности лазерного излучения I_0 , скорости света c , показателей преломления дисперсионной и дисперсной среды n_1 и n_2 соответственно [4]

$$v = \frac{64 a^5 \pi^4 n_1 (n_2^2 - n_1^2)^2}{9 \eta c \lambda^4 (n_2^2 + 2n_1^2)^2} I_0. \quad (2)$$

Коэффициент диффузии можно вычислить на основе закона Стокса как

$$D = \frac{kT}{6\pi a \eta}. \quad (3)$$

где k – постоянная Больцмана; T – температура дисперсионной системы; η – вязкость жидкости; a – радиус частиц.

Начальная концентрация частиц радиусом a во всем объеме полидисперсной суспензии определяется функцией распределения $f(a)$ частиц по радиусу

$$C_a(z, 0) = f(a) \frac{N_0}{V} = f(a) C_0, \quad (4)$$

где N_0 – общее число частиц; V_0 – объем кюветы; $C_0 = \frac{N_0}{V_0}$ – объемная концентрация всех частиц в суспензии. В начальный момент времени концентрация частиц не зависит от глубины, т.е. предполагается, что частицы распределены по объему равномерно.

Краевые условия определяются запретом перемещения частиц за пределы рассматриваемой системы

$$\frac{\partial C}{\partial z} - \frac{v}{D} C = 0 \quad \text{для } z = 0 \text{ и } z = l. \quad (5)$$

Решение нестационарного уравнения (1) имеет вид [5]

$$C_a(z, t) = C_0 f(a) \frac{vl}{D} \left[\frac{\exp\left(\frac{vz}{D}\right)}{\exp\left(\frac{vl}{D}\right) - 1} + \exp\left(\frac{vz}{2D}\right) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2(k\pi)^2 \left(1 - (-1)^k e^{-\frac{vl}{2D}}\right)}{\left(k^2\pi^2 + \left(\frac{vl}{2D}\right)^2\right)^2} \left(\frac{vl}{2k\pi D} \sin \frac{k\pi z}{l} + \cos \frac{k\pi z}{l}\right) \exp\left(-\left(k^2\pi^2 + \left(\frac{vl}{2D}\right)^2\right) \frac{Dt}{l^2}\right) \right]. \quad (6)$$

Распределение концентрации частиц с разными радиусами будет различаться. Более крупные частицы под действием лазерного излучения перемещаются ко дну кюветы.

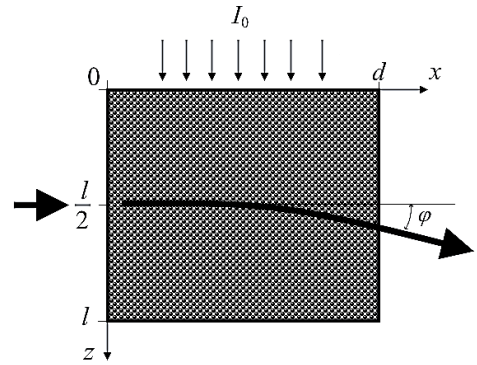


Рис. 1. Схема движения луча через суспензию, которая облучается лазерным потоком

Показатель преломления среды, содержащей частицы с радиусом много меньшим длины волны излучения, пропорционален объемной доле частиц в суспензии [6]:

$$n = n_1 + (n_2 - n_1)\omega. \quad (7)$$

где $\omega = \sum_a \omega_a = \sum_a V_a C_a = \sum_a \frac{4}{3}\pi a^3 C_a$ – объемная доля частиц в дисперсной среде, ω_a – объемная доля частиц радиусом a ; V_a – объем частицы с радиусом a . Концентрация частиц вычисляется на основе уравнения (6).

Луч, проходя через дисперсную систему толщиной d , будет отклоняться на угол φ , который можно вычислить по выражению [7]:

$$\varphi = \frac{d}{n} \frac{\partial n}{\partial z}. \quad (8)$$

Расчеты выполнены для водной суспензии, содержащей частицы диоксида кремния. Показатель преломления частиц SiO_2 – $n_2 = 1,56$; показатель преломления воды – $n_1 = 1,33$. Температура дисперсной среды – 293 К. Глубина кюветы – $l = 10$ мм. Вязкость воды принималась равной 0,001 Па·с. Моделировалось воздействие на дисперсную системы излучения газового неоновом лазера. Длина волны лазерного излучения $\lambda = 632$ нм, а его интенсивность – 50 кВт/м². Начальная концентрация наночастиц в воде составляет $C_0 = 10^{19}$.

Проанализировано осаждение частиц, которые характеризуются несимметричным распределением по размерам в диапазоне от $a_{min} = 10$ нм до $a_{max} = 200$ нм. Использована функция распределения вида

$$f(a) = \frac{Aa^3}{e^{-Ba} - 1},$$

где A, B – постоянные коэффициенты. Условие нормировки данной функции

$$\int_{a_{min}}^{a_{max}} f(a) da = 1.$$

Рассмотрены три варианта продолжительности лазерного воздействия, соответствующих отношению $t_1:t_2:t_3 = 1:20:400$, где $t_1 = 2,5 \cdot 10^5$ с. При осаждении частиц из полидисперсной суспензии, в которой распределение по размерам имеет несимметричный характер, увеличивается концентрация частиц радиусом более 100 нм вблизи дна кюветы. При этом на концентрационной зависимости появляется второй максимум в области 130 нм, высота которого растет с увеличением продолжительности воздействия светового потока. На рис. 2 показано, как изменяется объемная доля частиц разного радиуса на разных областях кюветы, заполненной наносуспензией.

Видно, что с увеличением продолжительности лазерного воздействия объемная доля частиц более 100 нм в дисперсной среде на глубине, равной половине высоты кюветы, начинает снижаться, а вблизи дна – концентрация таких частиц повышается. Особенно растет доля частиц радиусом около 150 нм. Значения суммарной объемной доли частиц на этих глубинах представлены в таблице.

Вычисления по формуле (7) показывают (см. таблицу), что показатель преломления среды в областях, глубина которых соответствует половине высоты кюветы, в процессе воздействия лазерного излучения снижается на 0,2 %.

В областях вблизи нижних слоев кюветы показатель преломления, наоборот, увеличивается на 0,6%. Это приводит к тому, что луч диагностического лазера при прохождении через среду на разной глубине будет отклоняться на разные углы.

Кроме того, значение угла рефракции изменяется в зависимости от времени облучения. Чем больше продолжительность воздействия светового потока на суспензию, тем больше угол преломления.

Например, с увеличением продолжительности облучения до времени t_3 , которое соответствует практически стационарному режиму диффузии, угол φ на глубине кюветы равен около $2,2^\circ$, который несложно наблюдать экспериментальными методами.

Таким образом, светоиндуцированное диффузионное перемещение наночастиц приводит к проявлению неоднородности рефрактивных свойств полидисперсной среды.

Объемная доля частиц и показатель преломления дисперсной среды

Глубина	$z = 0,5l$			$z = 0,9l$		
	ω	n	φ , deg.	ω	n	φ , deg.
Продолжительность облучения						
t_1	0.0334	1.338	$2.7 \cdot 10^{-6}$	0.0345	1.338	1.37
t_2	0.0240	1.336	0.92	0.0589	1.344	1.83
t_3	0.0206	1.335	1.23	0.0683	1.346	2.19

Проведено моделирование диффузионного перемещения наночастиц в жидкой среде, сопровождаемого воздействием силы рэлеевского рассеяния от светового потока.

Поскольку более крупные частицы передвигаются под действием этой силы в направлении лазерного луча быстрее, чем мелкие, происходит перераспределение концентрации частиц внутри дисперсной среды, что влияет на ее оптические свойства.

Вычисления показывают, что показатель преломления среды не постоянен и изменяется во время лазерного облучения.

В центральной области кюветы он снижается с 1,338 до 1,335, а вблизи дна кюветы возрастает до 1,346.

ЛИТЕРАТУРА

1. Евстапов А. А. Физические методы управления движением и разделением микрочастиц в жидких средах. I. диэлектрофорез, фотофорез, оптофорез, оптический пинцет // Научное приборостроение. 2005. Т. 15. №. 1. С. 3-20.
2. Optical tweezers and their applications / P. Polimeno, A. Magazzù, M. A. Iati, F. Patti; R. Saija, C. D. Esposti Boschi, M. G. Donato, P. G. Gucciardi, P. H. Jones, G. Volpe, O. M. Maragò // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2018. V. 218. P. 131-150.
3. Optical trapping with structured light: a review / Y. Yang, Y.-X. Ren, M. Chen, Y. Arita, C. Rosales-Guzmán // Advanced Photonics. 2021. V. 3 (3). P. 034001–1–40.
4. Иванов В. И., Пячин С. А. Сепарация частиц в полидисперсной наносуспензии в поле лазерного излучения // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2021. Вып. 13. С. 146-155.
5. Осаждение наночастиц под действием сил светового давления в жидких средах / В. И. Иванов, Г. Д. Иванова, В. И. Крылов, В. К. Хе // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2018. Вып. 10. С. 286-290.
6. Кирюшина С. И., Мяготин А. В. Нелинейно-оптическая диагностика наножидкостей // Современные наукоемкие технологии. 2015. Вып. 12-1. С. 34-36.
7. Buzzaccaro S. Kinetics of sedimentation in colloidal suspensions / S. Buzzaccaro, A. Tripodi, R. Rusconi, D. Vigolo, R. Piazza // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. V. 20. Iss. 49. P. 494219.

РАЗРАБОТКА АВТОМАТИЗИРОВАННОГО МЕТОДА ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИКИ ДЫХАНИЯ ПУТЕМ СОВМЕСТНОГО ПРИМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОМИОГРАФИИ И СПИРОИНТЕРВАЛОМЕТРИИ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ФУРЬЕ

В. Ф. Ульянычева¹, Н. В. Ульянычев²

¹ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»

²ФГБНУ «Дальневосточный научный центр физиологии и патологии дыхания»
Благовещенск, e-mail: nikolaj287@gmail.com

В данной работе рассмотрена задача реализации автоматизированного метода исследования дыхательной функции путем совмещения спироинтервалометрии и электромиографии на основе анализа Фурье. Конечным результатом работы является полностью работоспособный аппаратно-программный комплекс для автоматизированного исследования эффективности работы дыхательной мускулатуры. Разработанная система включает совместный анализ данных спирографии и миографии, и позволяет диагностировать различные состояния дыхательной системы.

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.

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.

Результирующая функциональная блок-схема системы внешнего дыхания человека представлена на рис. 1. В предлагаемой работе сделана попытка построения модели механики дыхания, в которой центральная роль отведена дыхательной мускулатуре. Этот подход позволяет детально рассмотреть любой дыхательный маневр и получить уравнения, описывающие его основные закономерности.

Основным в этой схеме является то, что подсистема газообмена формирует величину необходимой минутной вентиляции; на выходе из подсистемы механики дыхания получаем частоту и глубину дыхания, определяемые требуемой минутной вентиляцией и физико-механическими характеристиками мышц, легочных, грудных и абдоминальных структур.

Модель является источником гипотез о поведении исследуемой системы и требует создания аппарата для проверки этих гипотез. В рамках данной работы разрабатывается автоматизированный метод исследования механики дыхания, который позволит проводить опытную проверку разрабатываемой модели. Суть данного метода заключается в одновременной регистрации мышечной активности с помощью электромиографа и паттерна дыхания с помощью спирографа.

Следствием работы дыхательной мускулатуры является движение вдыхаемого и выдыхаемого воздуха. Поэтому наряду с электромиографическим исследованием в разрабатываемую установку были включены средства для определения характеристик паттерна дыхания. Одновременное исследование нескольких звеньев дыхательной системы позволяет выявить и

экспериментально подтвердить функциональную взаимосвязь между отдельными подсистемами, установить их роль и взаимный вклад в работу дыхательной системы.



Рис. 1. Функциональная блок-схема системы внешнего дыхания человека

Блок-схема разрабатываемой установки представлена на рис. 2.

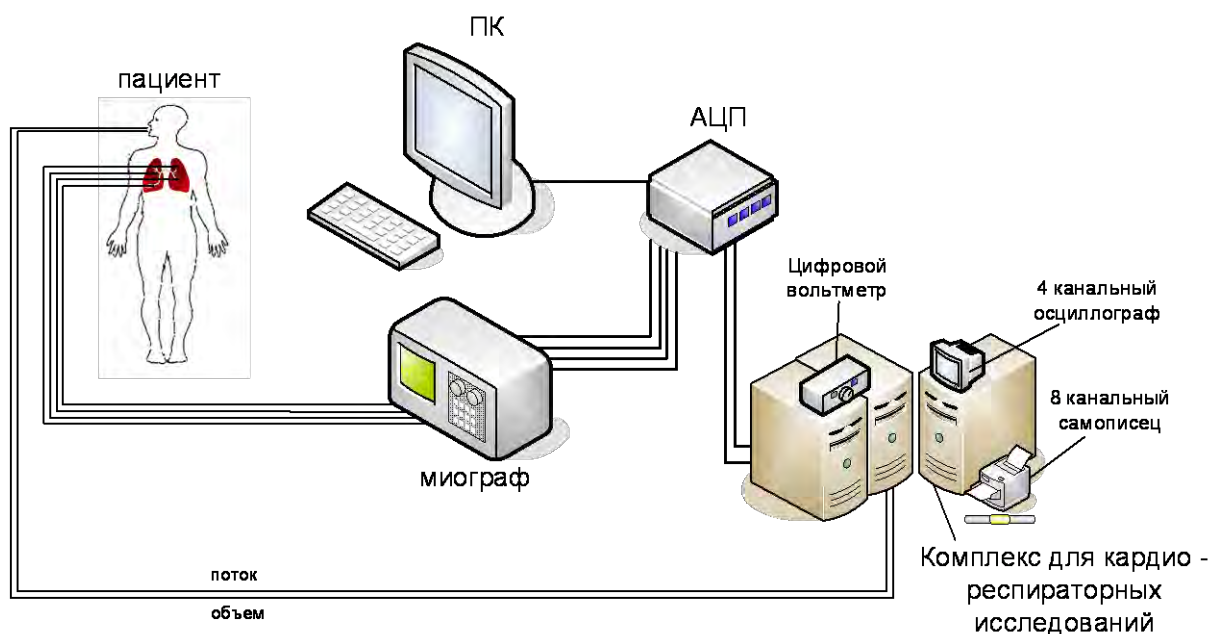


Рис. 2. Блок-схема разрабатываемой установки

Для получения первичных данных используются серийно выпускаемые медицинские приборы с сертифицированной метрологической характеристикой и электробезопасностью.

Работа устройства происходит по следующей схеме.

Биоэлектрические потенциалы, возникающие в мышцах, снимаются игольчатыми или поверхностными электродами.

Эти биоэлектрические сигналы усиливаются четырьмя каналами усиления настолько, чтобы сигнала, снятые с выходов усилителей были достаточно большие для подачи на блок АЦП. Одновременно по отдельным каналам на блок АЦП подаются сигналы потока и объема вдыхаемого - выдыхаемого воздуха со спирографа входящего в комплекс для кардиореспираторных исследований.

В блоке АЦП все каналы оцифровываются и далее по шине USB 2.0 подаются на ЭВМ в виде двоичного кода.

С помощью пакета специальных программ данные электромиографии и спирографии пациента обрабатываются в соответствии с выбранной методикой обследования.

Для полноценного функционирования системы разработан пакет специальных программ, которые осуществляют диалог с пользователем и управление аппаратными средствами разрабатываемого комплекса.

Состав программного обеспечения можно разделить на следующие подпрограммы:

1. Главная программа.
2. Подпрограмма снятия и визуального отображения данных (СВОД).
3. Подпрограмма расчета показателей спирограммы (СПИРО).
4. Подпрограмма расчета показателей миограммы (МИО).

Структура программного обеспечения имеет блочную структуру, где каждый блок является самостоятельной законченной программой, что позволяет легко наращивать число решаемых задач простым добавлением новых блоков.

Главная программа обеспечивает диалог с пользователем и взаимодействие подпрограмм между собой. Окно программы состоит из нескольких частей: области отображения данных, область вывода результатов расчета показателей, область ввода-вывода параметров работы АЦП, область управления программой и обеспечения диалога с пользователем.

Подпрограмма СВОД (рис. 3) осуществляет снятие, предварительную обработку, фильтрацию данных и передает их в главную программу для отображения на экране компьютера.

Снятие и фильтрация данных происходит в режиме реального времени (on-line), что позволяет пользователю своевременно контролировать поступающий поток данных. Подпрограмма СВОД представляет собой отдельный поток в операционной системе. Это позволяет производить сбор данных параллельно с работой основной программы и при необходимости отменить сбор данных, удалив поток, не дожидаясь завершения его работы.

Подпрограмма СПИРО осуществляет расчет основных характеристик паттерна дыхания на основе данных передаваемых Главной программой.

Главная программа передает в подпрограмму СПИРО данные по потоку и объему вдыхаемого-выдыхаемого воздуха.

Подпрограмма расчета показателей миограммы (МИО) получает данные сигнала миографии из главной программы, а также характеристики паттерна дыхания, полученные подпрограммой СПИРО.

Расчет показателей миограммы ведется отдельно для каждой фазы дыхательного цикла. Отдельно рассматривается работа дыхательных мышц во время вдоха и во время выдоха.

С помощью Фурье-анализа для сигнала миографии вычисляются частотные характеристики, которые не менее информативны, чем амплитудные и временные характеристики миографического сигнала.

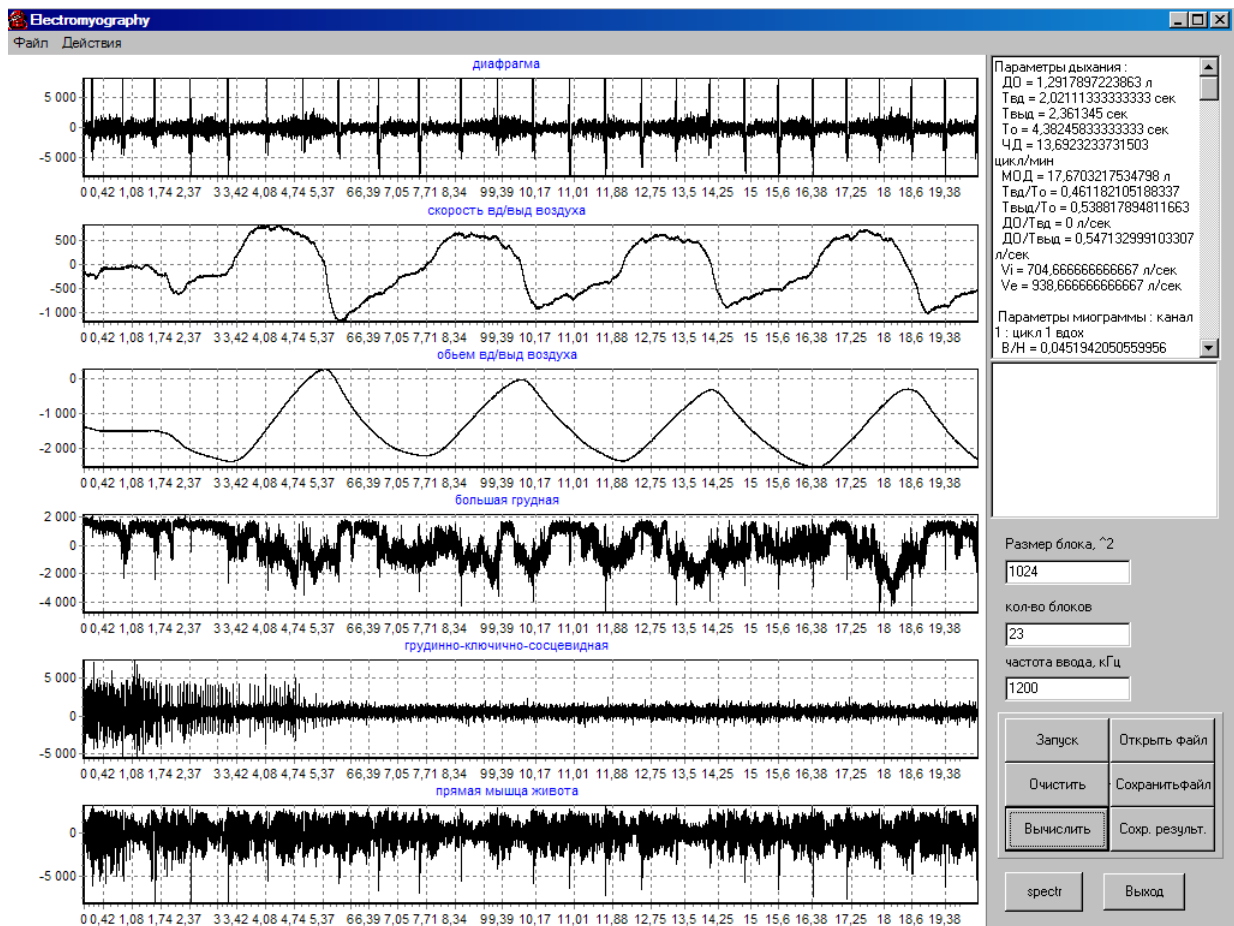


Рис. 3. Главное окно программы

На рис. 4 показан внешний вид сигнала электромиографии, снятый с важнейшей инспираторной (т. е. отвечающей за вдох) мышцы – диафрагмы. Шумы накладываются от электрокардиографического сигнала (ЭКГ), обусловленного близостью сердца с дыхательной системой. Для фильтрации полезного сигнала от сигнала ЭКГ использовался цифровой частотный фильтр, характеристики которого задаются формой АЧХ фильтра. Применение данного способа фильтрации обусловлено различием в спектральных составляющих сигналов электромиографии и ЭКГ. Фильтрацию сигнала выполняет подпрограмма СВОД.

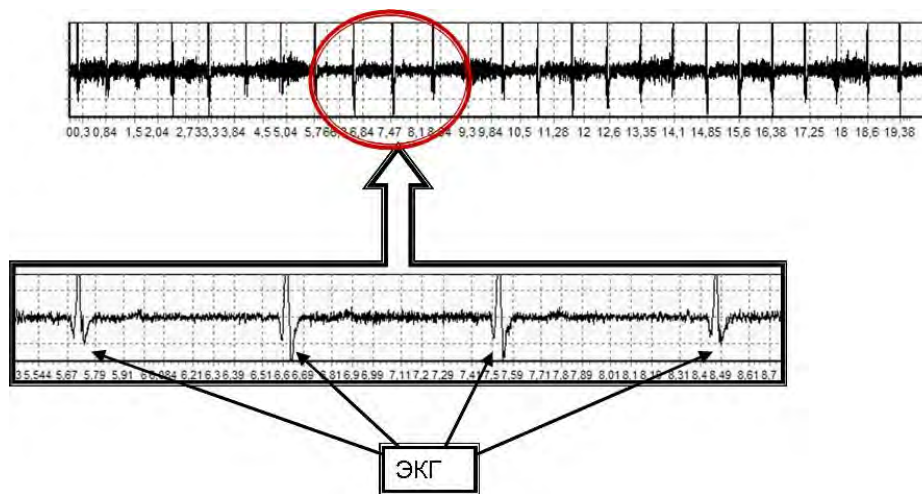


Рис. 4. Внешний вид сигнала электромиографии

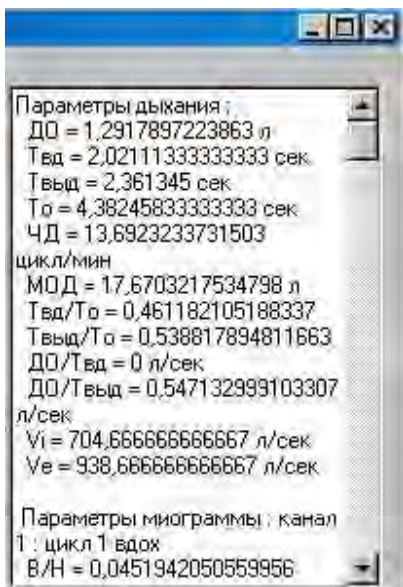


Рис. 5. Окно с выходными параметрами

На рис. 5 показан пример окна с выходными параметрами, полученными после анализа сигнала. Полученные данные являются объективной оценкой функционального состояния дыхательной мускулатуры и всей системы в целом.

Разработанная автоматизированная система исследования дыхательной мускулатуры внедрена в клиническую практику ФГБНУ «Дальневосточный научный центр физиологии и патологии дыхания». Первые исследования на реальном контингенте показали работоспособность, а также удобство применения разработанного метода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Биофизика: учеб. для студ. высш. учеб. заведений / В. Ф. Антонов, А. М. Черныш, В. И. Пасечник [и др.]. М: Гуманит. изд. центр ВЛАДОС, 2002. 288 с.
2. Бегун П. И., Шукейло Ю. А. Биомеханика : учебник для вузов / П. И. Бегун, СПб: Политехника, 2003. 463 с.
3. Рошупкин Д. И., Фесенко Е. Е., Новоселов В. И. Биофизика органов : учебное пособие. М.: Наука, 2000. 255 с.
4. Волькенштейн М. В. Общая биофизика: монография. М.: Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1978. 592 с.
5. Макаров И. М. Компьютерные модели и прогресс медицины. М.: Наука, 2001. 300 с.
6. Дюк В., Эммануэль В. Информационные технологии в медико-биологических исследованиях. Л.: Питер, 2003. 528 с.
7. Кулаичев А. Компьютерная электрофизиология в клинической и исследовательской практике. М.: Информатика и компьютеры, 2003. 428 с.
8. Зенков Л. Р., Ронкин М. А. Функциональная диагностика нервных болезней. М.: Медицина, 1982. 413 с.
9. Шик Л. Л., Канаева Н. Н. Руководство по клинической физиологии дыхания. Л.: Медицина, 1988. 375 с.
10. Руководство «Электромиограф МГ42». Россия: МЕДИКОР, 1979. 42 с.
11. Технический паспорт «Комплекс для кардио-респираторных исследований». ФРГ: Э. Егер. 158 с.
12. Руководство пользователя и программиста «USB3000». Россия: R-Technology, 2006. 59 с.
13. Стернин У. Е. Сбор и обработка данных: системный подход // ПТЭ. 1985. № 11. С. 55-63.
14. Немирко А. П. Цифровая обработка биологических сигналов. М.: Наука, 1984. 141 с.
15. Александров В. В., Шнейдеров В. С. Обработка медико-биологических данных на ЭВМ. Л.: Медицина, 1984. 156 с.
16. Гофман В. Э., Хомоненко А. Д. Delphi: быстрый старт. СПб.: БХВ-Петербург, 2002. 288 с.
17. Дарахвелидзе П. Г., Марков Е. П. Программирование в Delphi 7. СПб.: БХВ-Петербург, 2003. 784 с.
18. Фленов М. Е. Программирование в Delphi глазами хакера. СПб.: БХВ-Петербург, 2003. 368 с.
19. Дженкинс Г., Ваттс Д. Спектральный анализ и его приложение. М.: Мир, 1971. 316 с.
20. Отнес Р., Эноксон Л. Прикладной анализ временных рядов. Основные методы. М.: Мир, 1982. 428 с.
21. Блейхут Р. Быстрые алгоритмы цифровой обработки сигналов. М: Мир, 1989. 448 с.
22. Хемминг Р. В. Цифровые фильтры. М.: Сов. радио, 1980. 224 с.

МОДЕРНИЗАЦИЯ УСТРОЙСТВА АВТОМАТИЧЕСКОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ИСТОЧНИКОВ ПИТАНИЯ ОБРАЗЦА

Д. В. Фомин, А. В. Поляков, Д. О. Струков

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
Благовещенск, e-mail: e-office@yandex.ru

В работе представлены результаты модернизации разработанного ранее авторами устройства для автоматического переключения источников питания кремниевой подложки, используемой в качестве основы при формировании тонких пленок различных силицидов. В ходе проведения ростовых экспериментов в сверхвысоковакуумной камере, схема автоматического переключения образца с источника переменного тока на источник постоянного тока, была протестирована и доработана. Внесенные изменения представлены на принципиальной схеме. В работе приводятся осциллограммы поясняющие работу модернизированного устройства, а также подробно описывается принцип его работы. Установлено время срабатывания прибора, составившее в реальном эксперименте 10 мс.

В Научно-образовательном центре АмГУ на базе лаборатории физики поверхности с 2007 года и по настоящее время осуществляются эксперименты по формированию на кремниевых подложках пленок полупроводниковых силицидов. В разное время, методами реактивной или твердофазной эпитаксии, соосаждением или послойным осаждением, получали пленки Ca_2Si , FeSi_2 , Ca_3Si_4 , BaSi_2 и Mg_2Si [1–2 и др.]. В качестве подложек образцов используются кремниевые пластины, изготавливаемые из промышленных шайб с разным типом проводимости и удельным сопротивлением, например, КДБ-100 Si(111), КЭФ-100 Si(111) и др. Ко всем этим подложкам применяются одинаковые методы их очистки. Самый распространенный – это прогрев. В условиях сверхвысоковакуумной камеры он осуществляется путем попеременного подключения кремниевых пластин вначале к источнику переменного тока (для осуществления пробоя Si), а затем – к источнику постоянного тока.

Были проанализированы различные схемотехнические решения для автоматизации указанного процесса [3–4 и др.]. Затем авторами было предложено собственное уникальное устройство, описанное в [5]. По результатам его положительного макетного тестирования было принято решение изготовить данный прибор и испытать. В настоящей работе представлены сведения о доработке и результатах новых испытаниях прибора, не вошедшие в [5].

Была исправлена часть схемы (рис. 1), отвечающая за подключение образца к ЛАТРу Т1, который используется в качестве источника переменного тока нагрузки (R_H). Подобраны номиналы сопротивлений R1 и R2 (указаны на схеме).

В ходе исследования работы устройства под нагрузкой были сняты осциллограммы (рис. 2) в его четырех ключевых точках. Эти диаграммы отличаются от тех, что были получены при изучении работы макетной платы [3].

Точка № 1 находится на выходе транзисторной оптопары, которая используется как гальваническая развязка, отделяя часть схемы работающей на переменном токе, от схемы, работающей на постоянном токе.

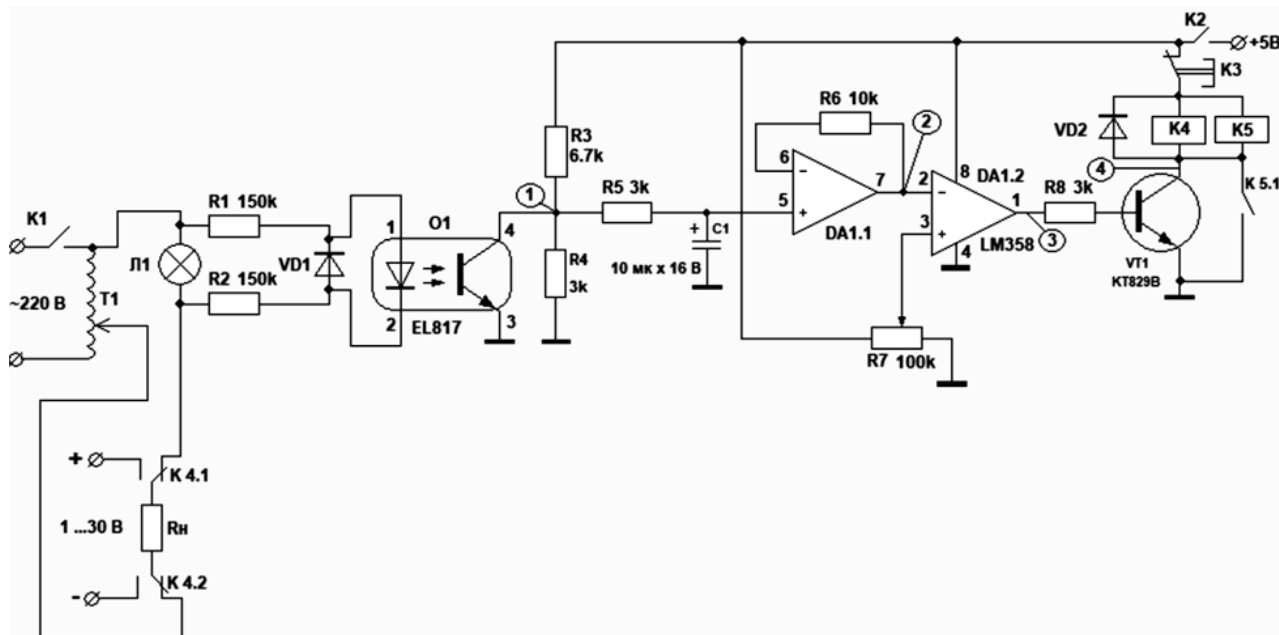


Рис. 1. Принципиальная схема устройства автоматического переключения источников питания образца

Оптопара реагирует на изменение падения напряжения на лампе Л1, которая выступает и в роли шунта при пробое Si, и в роли датчика. По мере роста напряжения на лампе, увеличивается амплитуда сигнала в цепи коллектора транзистора оптопары. Этот сигнал подается через повторитель DA1.1 на вход компаратора DA1.2, где сравнивается с опорным напряжением $U_{оп}$, задаваемым резистором R7 (график точки № 2 на рис. 2). Когда уровень напряжения входного сигнала и уровень опорного напряжения на компараторе сравняются, то он переключится в состояние, соответствующее «единице» в цифровой электронике.

Этот процесс можно наблюдать на графике, соответствующем точке № 3. Срабатывание компаратора приведет в свою очередь к открыванию силового транзистора VT1 (график точки №4 на рис.2), в цепь коллектора которого включена нагрузка в виде обмоток двух реле. Одно из них – K4, своими контактами K4.1 и K4.2 переключит нагрузку с источника переменного тока на источник постоянного тока. При этом другое реле – K5, своими контактами шунтирует транзистор VT1, поскольку после переключения образца на источник постоянного тока, сигнал с лампы Л1 перестает поступать на оптрон и далее в схему, и, транзистор VT1 закрывается.

На рис. 2 буквами обозначены: *a* – начало электрического пробоя Si (510 мс), *b* – начало процесса переключения Si с источника переменного тока на источник постоянного тока (590 мс), *c* – окончание процесса переключения (600 мс). Таким образом, время срабатывания устройства составило 10 мс.

Для осуществления повторного автоматического переключения нагрузки с одного источника питания на другой, необходимо вернуть рукоятку ЛАТРа Т1 в положение, соответствующее 0 В, а также нажать кнопку сброса К3, для отключения реле К5.

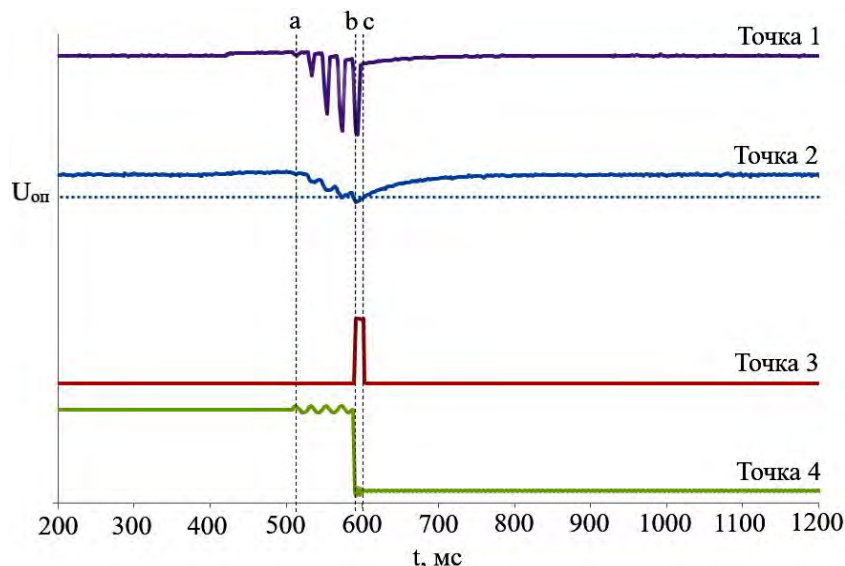


Рис. 2. Осциллограммы, полученные при исследовании работы устройства автоматического переключения источников питания нагрузки

Таким образом, в данной работе представлены результаты модернизации разработанного ранее авторами устройства для автоматического переключения источников питания кремниевой подложки, используемой в качестве основы при формировании тонких пленок различных силицидов. В результате проведенной доработки была исправлена часть схемы прибора, отвечающая за подключение образца к ЛАТРу - источнику переменного тока нагрузки. Вненесенные изменения были представлены на принципиальной схеме устройства. В ходе исследования его работы, в реальном эксперименте, были получены осциллограммы, с использованием которых выполнено подробное описание принципов работы прибора. Также установлено время его срабатывания на переключение, составившее 10 мс.

Данное устройство, предназначенное для автоматического переключения нагрузки с источника переменного тока на источник постоянного тока, может найти применение в ряде других экспериментов, а также послужить основой при разработке узлов автоматики, направленных на коммутацию нагрузки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Comparison of crystal and phonon structures for polycrystalline BaSi₂ films grown by spe method on Si(111) substrate / N. G. Galkin, K. N. Galkin, D. V. Fomin, V. L. Dubov, S. A. Pyachin, A. A. Burkov // Diffusion and Defect Data. Pt A Defect and Diffusion Forum. 2018. Т. 386 DDF. С. 48-54.
2. Оптические свойства пленки полупроводникового силицида Mg₂Si на Si(111) в области температурной стабильности / С. А. Доценко, Д. В. Фомин, К. Н. Галкин, Н. Г. Галкин // Химическая физика и мезоскопия. 2010. Т. 12. № 3. С. 376-381.
3. Ключ на базе симистора для коммутации нагрузок переменного тока / В. Г. Петько, И. А. Рахимжанова, А. М. Старожуков // Известия Оренбургского государственного аграрного университета. 2018. № 3(71). С. 167-168.
4. Костяев П. В. Универсальное реле времени / П. В. Костяев, А. И. Ахмерова, А. И. Коротенко, М. А. Терентьев // Современные проблемы проектирования, производства и эксплуатации радиотехнических систем : Сборник научных трудов. Ульяновск: Ульяновский государственный технический университет, 2020. С. 199-200.
5. Фомин Д. В., Струков Д. О., Поляков А. В. Устройство для автоматического переключения источников питания нагрузки // Вестник Амурского государственного университета. Серия: Естественные и экономические науки. 2022. № 97. С. 54-58. DOI 10.22250/20730268_2022_97_54.

УДК 378.14

**НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ РАБОТА
КАК ИНСТРУМЕНТ РАЗВИТИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ КОМПЕТЕНТНОСТИ
И ИНЖЕНЕРНОГО МЫШЛЕНИЯ СТУДЕНТОВ**

А. В. Казарбин¹, Ю. В. Лунина², К. А. Драчёв¹

¹ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»

²КГБПОУ «Хабаровский государственный медицинский колледж»

Хабаровск, e-mail: 000283@pnu.edu.ru.

В статье авторы рассматривают научно-исследовательскую работу студентов как технологичный инструмент формирования исследовательской компетентности студентов, инженерного мышления и высоких личностных качеств будущих инженеров.

В последнее время в обществе и государстве возросло понимание важности естественнонаучной подготовки будущих квалифицированных кадров для высокотехнологичного производства.

Несмотря на политическую ситуацию, под давлением санкций в стране формируется национальная система инновационной экономики, которой нужен приток компетентных конкурентоспособных специалистов инженерно-технического профиля, готовых к творческой и инициативной деятельности в рамках выполнения национальных и интернациональных социально-инженерных проектов.

Технологические потребности современной экономики существенно меняют характер инженерного образования, определяя более широкий спектр ключевых компетенций, чем при узкоспециализированном освоении научно-технических и инженерных дисциплин.

Современные специалисты должны быть способными к самостоятельному поиску и системному действию в профессиональной ситуации, к анализу и проектированию своей деятельности; обладать стремлением к самосовершенствованию (самосознанию, самоконтролю, саморегуляции, саморазвитию); стремиться к творческой самореализации.

Производству нужны самостоятельные, творческие специалисты, инициативные, предприимчивые, способные приносить прибыль, предлагать и разрабатывать идеи, находить нетрадиционные решения и реализовывать экономически выгодные проекты, именно поэтому развитие исследовательской компетентности студентов, как инструмента развития инженерного мышления представляется крайне актуальным.

Под исследовательской компетентностью авторы понимают интегральные качества личности, выражающиеся в готовности и способности к самостоятельному решению исследовательских и творческих задач, владении технологией исследовательской деятельности, признании ценности исследовательских умений и готовности их использования в профессиональной деятельности.

Развитие исследовательской компетентности студентов достигается средствами учебно-исследовательской и научно-исследовательской деятельности [1].

Под исследовательской деятельностью студентов мы понимаем выполнение студентами творческих исследовательских задач посредством основных этапов исследования:

- постановка проблемы, формулирование темы;
- целеполагание, выдвижение гипотез;
- ознакомление с соответствующей литературой;
- подбор методик исследования;
- сбор материала, его анализ;
- выводы.

Общепринятыми считаются следующие формы учебно-исследовательской работы студентов:

- выполнение лабораторных работ;
- написание рефератов;
- участие в предметных олимпиадах;
- подготовка докладов;
- выполнение заданий, содержащих элементы научных исследований;
- выполнение конкретных нетиповых заданий научно-исследовательского характера в период учебных и производственных практик;
- изучение теоретических основ методики, постановки, организации выполнения научных исследований по курсам специальных дисциплин;
- курсовые, дипломные работы и проекты.

Учебно-исследовательская деятельность выполняет следующие дидактические функции:

- мотивационную, которая заключается в создании таких стимулов для студентов, которые побуждают их к изучению данного предмета, формируют интерес и позитивное отношение к работе;
- информационную, позволяющую студентам расширить объем знаний всеми доступными способами преподнесения информации;
- контрольно-корректирующую (тренировочную), которая предполагает возможность проверки, самооценки, коррекции хода и результатов обучения, а также выполнение тренировочных упражнений для формирования необходимых умений и навыков.

Научно-исследовательская работа – процесс, формирующий будущего специалиста путем индивидуальной познавательной работы, направленной на получение нового знания, решение теоретических и практических проблем, самовоспитание и самореализацию исследовательских способностей и умений.

Основной целью организации и развития научно-исследовательской деятельности студентов является повышение уровня научной подготовки специалистов и выявление талантливой молодежи для последующего обучения по направлениям высшего образования.

Научно-исследовательская работа (во внеучебное время, НИРС) – это работа студентов в научных кружках и семинарах, инновационных работах, участие студентов в международных исследованиях, в конкурсах на получение грантов, работа в научно-исследовательских подразделениях и т.п. Руководство деятельностью студентов осуществляется научными руководителями темы.

Одним из важных элементов основной образовательной программы подготовки инженера является научно-исследовательская практика.

Целью научно-исследовательской практики является проработка теоретических вопросов в рамках выбранного профиля подготовки, участие в научных исследованиях, школах, семинарах и конференциях.

Авторы считают, что исследовательская работа студентов является незаменимым инструментом формирования критического и независимого инженерного мышления молодого специалиста, развития его интеллекта, высоких личностных и морально-этических качеств и должна рассматриваться как обязательная форма учебного процесса.

Систематическое участие в реальной научной работе в команде, возглавляемой опытным педагогом-исследователем, формирует у студента собственный уникальный опыт участия в НИР, возможность формирования профессиональных компетенций и пополнения портфолио своих достижений.

Главным инструментом развития исследовательского поведения в образовании выступают исследовательские методы обучения – средство формирования научного мировоззрения, развития мышления и познавательной самостоятельности.

Исследовательские методы традиционно входят в арсенал методов, применяемых педагогами, но современная ситуация требует не простого фрагментарного использования исследовательских методов, а их доминирования в образовательной практике над репродуктивными методами [4]. Использование исследовательских методов обучения создает условия для овладения студентами логикой научного поиска.

Специфика данной деятельности, отличающая ее от традиционного обучения, состоит в том, что студент выступает в роли активного субъекта познавательного процесса.

Нельзя не отметить наблюдаемые авторами проблемы и трудности, связанные с практической реализацией технологического подхода к формированию и развитию исследовательских компетенций учащихся.

Нередко преподаватели в вузах сталкиваются с наличием лишь поверхностных знаний, вчерашние школьники не умеют использовать полученные знания в ситуациях, когда необходимо сравнивать, делать выводы, обосновывать ответы, интерпретировать и обобщать результаты деятельности, применять их в повседневной жизни.

Это обусловлено тем, что они слабо владеют навыками самостоятельной исследовательской работы, в том числе с книгой и другими источниками информации, не умеют выделять главное, существенное, усваиваемые знания воспроизводят лишь на репродуктивном уровне, не имеют внутренних мотивов самостоятельной познавательной деятельности, не владеют объективными критериями самооценки и др.

Также необходимо отметить [2, 3, 5]:

1. Низкая мотивация учащихся к учебе вообще и ее специальным разделам, требующим дополнительной умственной работы, в особенности.

2. Низкий уровень общей начальной (школьной) математической и естественнонаучной подготовленности учащихся, который остается недостаточным и в период обучения в вузе. Низкий уровень межпредметных знаний учащихся нередко становится практически непреодолимым барьером на пути реализации подхода.

3. Отсутствие интереса у учащихся к деятельному освоению новых смежных знаниевых областей.

4. Недостаточна информационная и ИКТ подготовленность учащихся. Студенты испытывают затруднения в поиске в Интернет первоисточников по четко определенной тематике, плохо владеют офисными пакетами (MS Word: набор и редактирование сложного текста с таблицами, формулами, необходимостью правильного оформления списка литературы и т.п.; MS Excel: работа с массивами данных, построение и редактирование диаграмм, работа с формулами и встроенными процедурами пакета и т.п.).

5. Низкий уровень языковой подготовки учащихся (прежде всего, слабый уровень владения английским языком).

6. Недостаточный уровень развития мышления в целом: даже найдя необходимый первоисточник данных, учащиеся испытывают затруднения в правильной интерпретации данных, в их категоризации, в их преобразовании к требуемому формату и т.п. Авторы

подробно обсуждали проблему несформированности инженерного мышления в статье [6], где выявляли причины данного явления,

Деятельность, направленная на развитие НИРС, в Тихоокеанском государственном университете дает свои результаты, так, например, в 2021 г. к научным исследованиям, проводимым на кафедрах и в лабораториях, было привлечено 2413 студентов, или 35% от контингента студентов (2020 г. – 2214).

Количество научных студенческих публикаций – 1439 (в 2020 г. – 1287) из них без соавторов – работников вуза 255 (в 2020 г. – 238); докладов, сделанных студентами на научных (научно-технических) конференциях, семинарах и т. п. всех уровней (в том числе студенческих), – 1315 (в 2020 г. – 1223); медалей, дипломов, грамот, премий и т. п., полученных студентами, – 1085 (в 2020 г. – 851).

НИРС постепенно и уверенно формирует высокие профессиональные и личностные качества студентов, эффективно развивает их интеллектуальные и когнитивные способности, формирует прочные навыки в поиске, анализе и переработке информации, развивает языковые и коммуникативные навыки.

Авторы считают, что научно-практическая направленность обучения студентов, а также решение научно-исследовательских задач являются залогом успеха развития инженерного мышления и универсальных знаний, что будет способствовать становлению современного, востребованного специалиста на рынке труда.

Правильно поставленная НИРС в вузе является технологичным инструментом формирования исследовательской компетентности студентов и высоких личностных качеств будущих инженеров.

Используя НИРС в образовательном процессе, вузы смогут обеспечить подготовку инженерных кадров, обладающих знаниями, навыками, качествами и компетенциями, отвечающими требованиям современной экономики, целям и задачам социально-экономического развития и структуры рынка труда страны.

ЛИТЕРАТУРА

1. Арсентьева М. В., Воротилин М. С. Формирование исследовательской компетенции студентов вуза // Известия Тульского государственного университета. Технические науки, 2018.
2. Бодряков В. Ю., Ушакова Л. Р., Башкатов А. Н. Развитие исследовательских компетенций студентов как инструмент формирования высоких профессиональных качеств современного инженера // Формирование инженерного мышления в процессе обучения : Материалы международной научно-практической конференции, Екатеринбург, 07-08 апреля 2015 года / Т. Н. Шамало (отв. ред.). Екатеринбург: Уральский государственный педагогический университет, 2015. С. 33-36.
3. Борусяк Л. Почему они знают, но не умеют // Вести образования. URL: vogazeta.ru. (дата обращения: 25.08.2022).
4. Гвоздева Е. Е. Практико-ориентированные подходы к обучению. Технология исследовательского обучения в учреждениях профессионального образования // Молодой ученый. 2014. № 6-3(65). С. 21-25.
5. Казарбин А. В., Драчев К. А., Лунина Ю. В. Развитие инженерного мышления средствами научно-исследовательской деятельности студентов // Педагогический журнал. 2021. Т. 11. № 3-1. С. 213-221. DOI 10.34670/AR.2021.82.75.026.
6. Казарбин А. В., Лунина Ю. В. Естественнонаучные дисциплины как основа развития инженерного мышления // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование : XVII региональная научная конференция, посвященная 150-летию открытия периодической таблицы химических элементов Д. И. Менделеева, Благовещенск, 15-21 сентября 2019 года. Благовещенск: Амурский государственный университет, 2019. С. 233-237. DOI 10.2250/PFARE.2019.233-237.

РОЛЬ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ ЗНАНИЙ В ПОДГОТОВКЕ ИНЖЕНЕРОВ

И. Б. Копылова

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
Благовещенск, e-mail: kopylovaib@mail.ru

Формирование современной картины мира возможно лишь при изучении Проблемы изучения естественнонаучных дисциплин являются общими как для общеобразовательной школы, так и для высшей школы. Современные технологии строятся на знаниях физики, химии, биологии и других дисциплин и включают знания всех дисциплин в совокупности. Поэтому подготовка высококвалифицированных инженеров строится именно на «естественнонаучной грамотности».

В настоящее время Правительством Российской Федерации приняты ряд постановлений, обеспечивающих программу развития страны вплоть до 2030 года. Обеспечение выполнения всех планов подразумевает развитие и переоснащение не только промышленных мощностей, но и развитие науки, создание новых инновационных технологий и внедрение их в технологический цикл, а также подготовку высококвалифицированных специалистов.

Развитие современных высокотехнологичных технологий требует от специалистов различных областей хорошей инженерной подготовки и знаний в области естественнонаучных дисциплин: физики, химии, биологии, математике, информационных технологиях. Подготовка специалистов в различных областях техники невозможна без базовых знаний, которые закладываются при обучении в школе.

Последние тенденции сдачи ЕГЭ по естественнонаучным дисциплинам показывает, что не более 10–20 процентов выпускников школ сдают экзамен по физике, химии и биологии. Математика же является обязательным предметом, математические знания являются обязательными при освоении многих профессий. Статистика сдачи ЕГЭ по физике, химии и биологии приведена в таблице.

Статистика сдачи ЕГЭ по физике, химии и биологии

Год выпуска	Число выпускников (тыс. чел)	Физика		Химия		Биология	
		Количество участников	% от числа выпускников	Количество участников	% от числа выпускников	Количество участников	% от числа выпускников
2019	733,1	139500	19	92301	17,7	128584	17,5
2020	786,5	139574	12,5	81695	10,3	124599	15,8
2021	835,1	128000	15,3	93000	1,11	127000	15,2

Никто не отрицает, что освоение естественнонаучных дисциплин не является простой задачей, но, в то же время, это возможно, а главное необходимо для развития производства. Сложность заключается в том, что существующее разделение школьников на «гуманитариев» и «математиков» создает ограничение в выборе экзаменов ЕГЭ. Выбор инженерных направлений подготовки является недоступным многим выпускникам, которые хотели бы получить инженерные профессии.

Разделение школьников на «гуманитариев» и «математиков» является не совсем точным, так как законы мышления для всех одинаковы, в возрасте 10-12 лет невозможно определить способности школьника, выбор за него делают родители. Кроме того, существует интерес в изучении тех или иных дисциплин, набор которых включает школьные предметы различной направленности.

Подготовка школьников в советские годы не имела такого разделения, и выпускники имели хорошую подготовку по всем направлениям деятельности. Такой подход расширял возможности выпускников школ в выборе поля дальнейшей деятельности, а также получить подготовку в нескольких направлениях одновременно. Преимущество такого подхода в получении общего образования заключается еще и в том, что у выпускника формируется гибкое аналитическое мышление, математическая логика. Это особенно важно в настоящее время, когда технологии строятся на стыке многих наук, требуют хорошей подготовки в области информационных технологий.

Тестовая система сдачи итоговых экзаменов заставляет отрабатывать до автоматизма навыки решения ограниченного числа задач и практически полностью исключает творческий аналитический подход в достижении цели. Средний балл по ЕГЭ составляет 50-60. Это говорит о том, что решаются в основном типовые задачи.

В настоящее время в среде школьных преподавателей распространен термин «естественнонаучная грамотность», который подразумевает формирование системы знаний об устройстве окружающего мира и включает знания ряда дисциплин: физики, химии, биологии, географии и др. Особое и основное внимание обращается на математику, именно математика является языком, на котором излагаются основные законы других наук, а также основой современного моделирования и информационных технологий.

Можно согласиться с таким подходом, но фундаментальные науки – это основа современных технологий и изучать их необходимо в таком объеме, чтобы понимать главные законы и положения, уметь устанавливать взаимосвязи между основными положениями фундаментальных наук. Именно знание естественнонаучных дисциплин, в свою очередь, и позволит сформировать единую картину мира [3].

Необходимо отметить, что современные выпускники школ не представляют, что именно наличие аналитического подхода в решении поставленных задач, творческий подход, широкий кругозор, трудолюбие и стремление к самообразованию являются главными составляющими успеха в профессиональной деятельности. Таковы требования к выпускникам школ при поступлении в высшую школу, особенно, если они выбирают инженерную направленность обучения.

Как показывает практика преподавателей вузов задача формирования «естественнонаучной грамотности» в школе не решается для основной массы выпускников. Поэтому преподаватели фундаментальных, специальных и профессиональных дисциплин сталкиваются с некоторыми трудностями при формировании основных компетенций.

Это связано с двумя факторами: разрывом между знаниями, полученными в школе и требованиями высшей школы; подготовка в вузе не всегда следует требованиям времени [4].

Решение первой проблемы возможно только при согласовании учебных планов преподавателей школ и вузов.

Создание преемственности при получении знаний на протяжении всей жизни человека. Задача очень трудная, так как подход получения образования очень сильно отличаются на различных уровнях.

Вторая проблема – это повышение мобильности в преподавании специальных и профессиональных дисциплин, введение новых направлений подготовки в соответствии с требованиями современности.

Обучение в рамках существующей системы бакалавриата представляет собой трудную задачу. Это связано с ограничением числа дисциплин, изучаемых в рамках необходимых компе-

тенций, сокращению часов на изучение естественнонаучных и специальных дисциплин. Часто изучение естественнонаучных дисциплин вообще исключается из учебных планов, акцентируется внимание на получении навыков именно в рамках направления подготовки. Блок естественнонаучных дисциплин ограничивается изучением дисциплины «Концепции современного естествознания», временные затраты на изучение которого минимальны. Для гуманитарных направлений такой подход оправдан и используется во многих вузах страны.

Для инженерных направлений подготовки такой подход не является оптимальным и не позволяет формировать необходимые компетенции выпускника высшей школы, не обеспечивает возможность быстрого совершенствования в выбранном направлении деятельности выпускника: быстрое освоение практических навыков на рабочем месте, поступление в магистратуру, повышение квалификации в короткие сроки.

В свою очередь, преподаватели специальных дисциплин испытывают затруднения, связанные с отсутствием базовых знаний в области естественнонаучных дисциплин и не могут достигнуть основной цели обучения: выпуск компетентных специалистов в различных направлениях инженерной подготовки.

Преподаватели естественнонаучных дисциплин сталкиваются с проблемой отсутствия необходимого объема часов для проведения аудиторных занятий. Несмотря на практически такой же объем самостоятельной работы студентов фундаментальные дисциплины усваиваются студентами недостаточно полно.

Это связано, прежде всего, с неспособностью большинства студентов организовать самостоятельное изучение дисциплины, сложностью дисциплины. Нужно учитывать, что вузовский курс отличается от школьного, потому что изложение материала строится на более высоком уровне, применяется высшая математика для записи законов и более сложные понятия для понимания основных терминов.

Как правило, фундаментальные дисциплины в учебные планы включаются на младших курсах, когда курс математики еще не изучен или изучается параллельно. Для понимания многих теоретических положений необходимы знания в области смежных наук, необходимо представление обо всех естественнонаучных дисциплинах. Например: для понимания такой науки как физика необходимо не только знание математики, но и знание философии, химии. Большую роль играют общие понятия и интерпретация законов природы. Закон сохранения энергии работает и в физике, и в химии и в биологии. Таких примеров можно привести множество. Преподавание всех фундаментальных дисциплин способствует развитию логического и математического мышления, способности к самостоятельному анализу, решению практических задач, формированию системы взглядов на окружающий мир.

Самое главное, что «естественнонаучная грамотность» должна не только сформировать современную картину мира, но помочь студенту получать знания в выбранном направлении подготовки, лучшему пониманию сущности будущей профессиональной деятельности, совершенствованию знаний и умений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Итоги ЕГЭ по физике 2021 года. URL: <https://ege.lancmanschool.ru/poleznyie-stati/itogi-ege-po-fizike-i-geografii-2021-goda>.

2. Итоги ЕГЭ по химии и биологии 2021 года. URL: <https://ege.lancmanschool.ru/poleznyie-stati/itogi-ege-po-ximii-i-biologii-2021-goda>.

3. Валькова Е. В. Естественнонаучная грамотность – важнейшая проблема современности. Текст : электронный // Тезисы докладов IV Всероссийской научно-практической конференции преподавателей, учителей, студентов и молодых ученых. Актуальные проблемы преподавания дисциплин естественнонаучного цикла. 2020. С. 16-19. URL: https://lpi.sfukras.ru/files/aktualnye_problemy_prepodavaniya_disciplin_estestvennonauchnogo_cikla_2020.pdf

4. Шумилина Н. Г. Роль естественнонаучных дисциплин в формировании информационной компетентности у студентов вуза // NovaInfo.Ru. 2019. № 110. С. 100-101.

МЕТОДЫ ОБУЧЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫМ ДИСЦИПЛИНАМ В КОНТЕКСТЕ СОВРЕМЕННОСТИ

Т. Н. Корнеенко

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения»
Хабаровск, e-mail: tkorneenko1@gmail.com

Риски трансформационных изменений в мире обуславливают цели и задачи высшего образования. Вуз должен обеспечить выпуск специалистов готовыми включиться в работу, обладающими специальными и общими профессиональными компетенциями, и ценностями, а также навыками самообразования и саморазвития. В этой связи проблема методов и технологий становится одной из важных. В статье рассмотрена дидактическая структура методов И. Я. Лернера и педагогические средства, приемы и технологии, обеспечивающие ее эффективность сегодня. Подчеркнута необходимость образовательных практик сегодня.

Постоянные изменения в современном мироустройстве (экономические, социокультурные, политические) влияют на цели и задачи образования на всех уровнях. На примере системы высшего образования, можно указать, что подобная ситуация нарушает паритет между внутренней экосистемой (существующими образовательными программами, сложившимися связями с индустриальными партнерами, материальной базой, зарекомендовавшими себя эффективными образовательными технологиями) и внешним континуумом (требованиям к выпускникам со стороны общества, их компетенциям и навыкам на выходе, социокультурным условиям). Вузы постоянно вынуждены приспосабливаться к новым условиям, однако, в силу консервативности самой педагогической системы этот процесс происходит медленно, а поэтому крайне неэффективно.

Между тем, необходимость изменений в высшем образовании обусловлена не только внешними причинами, но и внутренними. Приведем некоторые факты [1]. С опорой на исследования Высшей школы экономики [1], можно говорить об изменившейся модели мотивации абитуриента при выборе вуза. Сегодня эта модель является транзакционной¹ или прагматической, когда абитуриент ждет от вуза конкретных знаний, компетенций, навыков, которые ему необходимы на рабочем месте [2]. Кроме того, сам выбор профессии выпускниками школ достаточно прагматичен и определяется материальными стимулами. Этот факт подтверждается опросом современных выпускников [2], пожелания которых направлены на изучение дисциплин не столько научного или общего плана, сколько заточенных под определенные компетенции в конкретной области, например, программирования или строительства, соответственно овладение языками программирования, специальными профессиональными программами т.п. Недостаточность такой практической подготовки выпускников вуза отмечают 45,60% работодателей. (3) При этом, по данным 2020 г. для успешной карьеры выпускника, работодатели отмечают также следующие важные качества: способность анализировать большие объемы информации (79%), умение выявлять и решать проблемы (70%), умение организовывать свою деятельность (62%), умение расставлять приоритеты (60%), способность генерировать идеи (55%).

Анализ предпочтений работодателя говорит о приоритетном запросе в отношении выпускников *общих профессиональных способностей или некогнитивных навыков*, а не

¹ Кроме транзакционной модели существуют инерционная, трансмиссионная и исследовательская модели поступления.

только профессиональных. Названный вывод подтверждается общероссийским исследованием. Так, в публикациях Института стратегических исследований и экономики знаний (НИУ ВШЭ) [1] показано, что наличие предпринимательских навыков у выпускников (выдвижение новых идей, разработка новых продуктов или технологий, нахождение практического применения полученным результатам, установление и поддержание связей сотрудничества с коллегами и партнерами, самостоятельность в работе (выполнение задачи в установленные сроки и с имеющимися ресурсами; обучение, переподготовка, освоение новых методов, технологий, установок и т.д.), умение публично презентовать результаты заказчикам, партнерам, покупателям своей работы) существенно улучшают карьерные возможности молодых специалистов, повышают их заработную плату [4]. Еще один аспект связан с динамичностью общественных процессов характеризуемым укорачиванием временных промежутков жизненного цикла новой продукции и сокращением сроков между открытиями в науке и технологиях. Это обстоятельство создаёт запрос к молодым людям, которые должны уметь не только адаптироваться, например, к очередному кризису, но и быть способными к самоопределению, выявлению собственных резервов роста, выстраиванию стратегии жизненного развития (преимущественно в гармонии с общественным). Поэтому университет как провайдер нового знания и технологий будущего не может оставаться в стороне от возможных экзистенциальных проблем человека, сопровождающих его на разных жизненных этапах: например, необходимостью менять профессию (по оценки специалистов уже сегодня человек меняет профессию до 4 раз на протяжении жизни) и, как следствие, необходимостью постоянного самообразования в течение жизни, адаптации и развитию в моменты мировых и личностных кризисов. Это значит, что создание условий в университете для развития **личностных самоорганизационных компетенций выпускника** (умение делать выбор, настойчивости в достижении цели, навыков самоопределения, самообразования, самореализации), становится не менее важным, чем развитие профессиональных компетенций. Поэтому, образовательные практики в университете должны предусматривать собой форматы, в которых эти навыки проявляются и развиваются.

Обозначенные особенности позволяют выделить несколько приоритетных направлений модернизации вуза, которые сегодня актуальны [3, 6]: (1) направленность образовательной среды университета на производство нового знания; (2) направленность образовательной среды на широкое образование, сочетающей собой различные культуры пребывания человека и (3) направленность образовательной среды на развитие студентом навыков управления собой в сложной среде (неопределенных условиях жизни (self-компетенций)), помогающих ему непрерывно совершенствовать себя на протяжении всей жизни (long-life).

Тем самым обучение в вузе становится не только подготовкой к профессии, но широким образованием личности, где:

1. Приобретается определенная модель поведения, которая при определенных условиях может быть востребована, переосмыслена, понята с иной точки зрения студентом.
2. Вырабатывается модель мышления, которая становится стилем в жизни, когда человек способен брать ответственность на себя, не боится начинать нового, сам определяет жизненную стратегию, взвешивая ресурсы и возможности.

Вышесказанное позволяет сформулировать принципы организации образовательного процесса (с опорой на исследования В. А. Куренного, [4]) в новых условиях деятельности университета:

1. Принцип единства обучения, исследования и практики: знание формируется через исследование.
2. Принцип деятельностного образования.
3. Принцип самостоятельного выбора траектории развития.
4. Принцип трех С: самоопределения, самообразования, самореализации студента.

Названные принципы позволяют подойти к разговору о педагогических методах и технологиях. Требуется их пересмотр в соответствии с новыми задачами, стоящими перед образованием. Для этого рассмотрим используемую сегодня классификацию обще дидактических методов. Наиболее удачной, с нашей точки зрения, является классификация педагогических методов, сделанная И. Я. Лернером [5]. Так, им проведено разделение методов с точки зрения социокультурного опыта личности, получаемого ею в течение жизни. Выделяются четыре вида опыта личности [5]: репродуктивный, продуктивный, творческий и эмоционально-ценностный. Причем все они одинаково важны для развития личности. Отсюда, методы деятельности педагога формулируются следующим образом: информационно-рецептивный, репродуктивный, метод проблемного изложения, эвристический и исследовательский методы. Поскольку сегодня социокультурный опыт личности в целом мало изменился (перестройка происходит в его составе, последовательности), то и обще дидактические методы остаются прежними. Однако, на частном уровне (уровне дисциплины или блока дисциплин) могут быть изменения. Нужно отметить, что применение того или иного метода, как и прежде, определяется целью и задачами, содержанием материала, особенностями учащегося. Рассмотрим применение каждого метода в отдельности.

Так, информационно-рецептивный метод соответствует первичной степени «раздражения» сознания новым знанием, которое изначально для учащегося выступает информацией. Одним из педагогических средств является лекция. Но сама лекция, в соответствии с новыми вызовами, сегодня претерпевает изменения.

Так, в зависимости от содержания материала и особенностей учащихся, первичная ступень познания может быть отдана на самостоятельное изучение (самообразование) – тогда лекция в аудитории становится познавательным диалогом (беседой по вопросам) или может быть построена по методу проблемного изложения материала, в последнем случае на самообразование отводятся вопросы-размышления, незначительно затронутые в лекции педагогом. Подобные педагогические приемы обеспечивают достижение цели – первичной ступени познания культуры (в широком смысле) человечества и способствуют переводу обучения с пассивной фазы в активную, с теоретического русла в практическое, которое сегодня крайне необходимо.

Репродуктивный метод выступает важным способом отработки навыка полученного знания. В вузе педагогическим средством данного метода становится самостоятельная работа студента, практика решения задач. Репродуктивным этот метод назван поскольку получение нового знания здесь не происходит, но происходит отработка навыка, осмысление знания с точки зрения его видения в определенной ситуации, а также стимулируется работа сознания по поиску соответствующего метода решения. Более того, здесь напрямую используются и отрабатываются студентом практические навыки и компетенции. Для того, чтобы повысить интерес студента к данному виду занятий можно применять приемы соревнования, группового решения, кейс-технологий (в определенной степени) и т.п.

Метод проблемного изложения материала можно применять в сочетании с уже рассмотренными методами, либо в отдельности. Так, соединяя методы проблемного изложения и репродуктивный, можно выйти на продуктивную деятельность студента, то есть такую деятельность результатом которой, является учебный продукт (новый для учащегося): комбинированный способ или метод деятельности, новый уровень осмысления знания, его доказательства, метод решения.

Сегодня появилось достаточно много технологий, относящихся к продуктивной деятельности студента: стартапы, учебные и производственные проекты, хоздоговорные работы. Продуктом в этом случае являются конкретный производственный заказ или инновация. Сочетание информационно-рецептивного метода и метода проблемного изложения, позволит существенно усилить эффект педагогических средств. Например, лекция или семинар преобразуются в дискуссии, позволяют подняться до нового уровня понимания или размышления.

Кроме того, результатом этого являются не только учебные навыки, но и некогнитивные способности (аргументации собственной точки зрения, доказательства, презентабельности, умения быстро и ясно отвечать на вопросы). Метод проблемного изложения может быть применен на лекции. Суть его здесь сводится к тому, что педагог ставит перед студентами проблему (либо подводит вопросами к ее обнаружению самими студентами), а дальше в ходе рассуждений акцентирует внимание на процессе решения, доказательствах, противоречиях. Одним из недостатков этого метода считают его временную затратность, однако, как отмечает сам И. Я. Лернер, метод проблемного изложения преследует другие цели, и он действительно позволяет учащемуся научиться мыслить, что существенно экономит время в дальнейшем.

Еще два метода – эвристический (творческий) и исследовательский методы – также относятся к освоению творческого опыта деятельности личности. Педагогические средства здесь могут быть лабораторные работы, кейсовые задания (в том числе мультидисциплинарные), проектные работы, научные исследования.

Разница в применении методов обусловлена целью занятия. Если эта цель связана с открытием нового и формированием соответствующей модели мышления, то сама организация образовательного процесса может быть иной, а именно: лабораторная работа (или проектное задание, в зависимости степени подготовки учащегося) – лекция (осмысление материала) – практика (закрепление нового знания). Если же цель стоит развитие исследовательских навыков, то структура деятельности может быть следующей: постановка задачи (теоретический уровень осмысления) – проведение лабораторного исследования (практический уровень осмысления) – практика (закрепление навыков).

Таким образом, применение того или иного метода обусловлено целью и содержанием изучаемого материала. Педагогические средства могут быть одинаковы, но в зависимости от цели применяются различно, а поэтому имеют разный эффект воздействия на личность. Например, лабораторная работа, с инструкцией к действиям больше служит научению по образцу – репродуктивному методу, тогда как без инструкции – выступает самостоятельным или командным исследованием.

Фундаментальные дисциплины (физика, математика, философия и т. п., в учебном плане подразумевают своей целью развитие мышления будущего инженера. Поэтому разнообразное применение методов (в зависимости от требуемого опыта личности) и цели изучаемого материала, существенно усилят образовательный эффект. В особенности, такие педагогические средства и технологии как кейс-технологии, проектное задание, учебные исследования, хозяйственные работы переводят образовательный процесс в русло широкой образовательной практики, что сегодня крайне важно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Карьерные ожидания студентов российских вузов / Е. Ю. Шибанова, С. С. Малиновский, М. М. Тойлуг-оол, А. И. Дудина ; Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Институт образования. М.: НИУ ВШЭ, 2021. 36 с. (Факты образования № 2 (36)).
2. Корнеенко Т. Н., Щеглова И. А. Оценка образовательного опыта студентов как инструмент принятия управленческих решений в университете // Университетское управление: практика и анализ. 2021. Т. 25. № 3. С. 82-99. DOI 10.15826/umpra.2021.03.029.
3. Левин М. И., Кузьминов Я. И., Юдкевич М. М. Университеты в России: как это работает // Вопросы экономики. 2022. № 6. С. 157-158. DOI 10.32609/0042-8736-2022-6-157-158.
4. Куренной В. А. Философия либерального образования: принципы // Вопросы образования. 2020. № 1. С. 8-39. DOI 10.17323/1814-9545-2020-1-8-39.
5. Лернер И. Я. Дидактические основы обучения // Москва: Просвещение, 1980. 154 с.
6. Щербенок А. В. Как трансформировать университет // Университетское управление: практика и анализ. 2018. Т. 22. № 6. С. 5-7.

**ФИЗИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ СТУДЕНТОВ-ГУМАНИТАРИЕВ
В КОНТЕКСТЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
«КОНЦЕПЦИИ СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ» (КСЕ)**

Д. И. Кузнецов

ФГБУВОиН «Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж. И. Алфёрова» РАН
Санкт-Петербург, e-mail: dkuznec@list.ru

Рассматривается проблема естественнонаучного образования для студентов юридических и гуманитарных направлений в Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого и о некоторой утрате учащимися этих направлений целостного и гармоничного осмысления действительности. Дан анализ необходимости изучения физических дисциплин в последовательном соотношении проблематики естественнонаучного мировоззрения в области гуманитарного и юридического образования в контексте актуальных проблем современности.

На всех уровнях физического образования, во всем многообразии его форм, характер деятельности в системе «преподавание – учение» постоянно трансформируется, появляются новые методики, отвечающие запросам техногенной и цифровой цивилизации, однако неизменным остаётся состав взаимодействующих субъектов процесса обучения. Это взаимодействие проявляется в единстве деятельности преподавания и деятельности учения, разворачивающихся в пространстве предметного содержания физического образования. Таким образом, главными составляющими, сущностными дидактическими характеристиками процесса обучения являются единство преподавания и учения. Именно в этом единстве разворачивается обучение физических и естественнонаучных дисциплин, которые являются составной частью культуры для студентов гуманитарных направлений. «Наука говорит нам, что мы способны познавать, но то, что мы способны познавать, ограничено, и если мы забудем, как много лежит за этими границами, то утратим восприимчивость ко многим очень важным вещам» [1]. Это одна из основных мыслей английского философа Бертрانا Рассела, который считал, что человек с университетским образованием, в гумбольдтовском понимании, должен обладать самыми широкими знаниями не только в области своей будущей специальности, но и в других областях, например, связанных с наукой, техникой и информатикой. Однако здесь мы сталкиваемся с другой проблемой. Сегодня виртуальное развитие детей значительно опережает их физическое созревание, что в конечном итоге приводит в некоторых случаях к социальному дискомфорту [2]. Достигая определенных успехов в информатике, дети очень часто оказываются абсолютно не подготовленными в области естествознания и точных наук.

При этом переход на Единый государственный экзамен заставил школьников, которые выбрали для себя учебу по гуманитарному направлению в вузе, практически не заниматься физикой или химией в последних классах. Итог данного образовательного процесса довольно печален: некоторые студенты гуманитарного факультета Санкт-Петербургского Политехнического университета не только не знают закон Кулона, но даже не имеют представления о том, в каком разделе физики он находится. Всё это приводит к тому, что человек с современным университетским образованием утрачивает целостное осмысление действительности. Понятно, что в некоторых случаях это делается специально, так как считается, что в глобальном мире бесформенной массой людей управлять легче. Однако не таким должен быть

путь российской системы образования. Наоборот, Россия за последние 150 лет была сильна именно качественным всесторонним университетским образованием и развивала гармоничную личность во всех направлениях.

Даже при изучении такого предмета как научный атеизм в советское время, благодаря профессиональному и опытному преподавателю, раскрывалась глубина, если не религиозного, то нравственно-философского или культурологического содержания данного предмета.

Что касается такой научной дисциплины как «Концепции современного естествознания» (КСЕ), то в настоящее время это уже далеко не новый учебный предмет. То, что преподают сегодня в российских университетах по этой дисциплине, советские выпускники 50-80-х гг. прошлого века должны были в полном объеме усвоить ещё в процессе своего школьного обучения. Но времена изменились, и мы стали пользоваться западными лекалами не только в сфере высшего образования, но и в сфере среднего. Так, в начале 90-х годов появились две новые дисциплины: культурология и концепции современного естествознания.

Однако возникает вопрос: насколько нужно знать современную науку человеку, который сам никогда не будет заниматься научной деятельностью? Для автора ответ очевиден: человек с университетским образованием и дипломом по любой специальности и в том числе гуманитарной должен иметь самые обширные знания в области естествознания, так как этот предмет имеет важное духовное и общекультурное значение. Данная образовательная дисциплина представляет собой не просто совокупность избранных глав традиционных разделов физики, а изучает трансдисциплинарные концепции в естествознании в целом, затрагивая такие научные области как химия, астрономия, биология, физиология, возникновение и эволюция жизни, природные начала и бытие человека, а также изучает саму историю естествознания.

Современному гуманитарю, а тем более юристу необходимо знать, что такое теория относительности, кибернетика, синергетика. Что такое вероятностный подход в квантовой механике. В чём заключается проблема свойств движения или конечности мира. На все эти вопросы отвечает предмет «Концепции современного естествознания», однако вопрос насколько глубокими знаниями должны обладать учащиеся гуманитарных вузов или факультетов, остается открытым.

Несмотря на то, что существуют общеобразовательные программы, утвержденные Министерством науки и высшего образования РФ по данной дисциплине, требования в различных вузах остаются дифференциальными, а дипломы во всех российских вузах выдаются одинаковые – государственного образца. Поэтому для того, чтобы будущий выпускник с дипломом по гуманитарному или юридическому направлению мог лучше себя чувствовать на рынке труда и не являлся бы только узкоспециализированным специалистом без коммуникативных навыков, ему необходимо прививать способность к целостному осмыслению мира и действительности.

Только так можно воспитать нравственно-культурного, гармоничного, а в конечном итоге и высококвалифицированного специалиста в любой гуманитарной области. В заключение хочется процитировать кандидата педагогических наук Ю. А. Буковского: «Тенденция к гармоничному синтезу двух компонентов культуры – естественнонаучной и гуманитарной, всегда была созвучна потребности общества в целом мировидении, мироощущении и миропонимании, которые в единстве формируют современное мировоззрение человека на основе физических знаний» [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Рассел Б. История западной философии. М.: АСТ, 2019. С. 12.
2. Шмид Э., Коэн Д. Новый цифровой мир. М.: Манн, Иванов и Фербер, 2013. С. 47.
3. Буковский Ю. А. Очерки по истории европейской научной мысли. СПб.: Политех-пресс, 2020. С. 238.

О НАПОЛНЕНИИ ШКОЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ СОВРЕМЕННЫМИ ФИЗИЧЕСКИМИ ЗНАНИЯМИ

Т. А. Мередилина

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
Благовещенск, biofirm@mail.ru

В статье показана необходимость приведения содержания школьного курса физики в соответствие с достижениями современной науки и техники. Предложены конкретные элементы физики твердого тела (ФТТ), которые возможно включить в школьную программу 11 класса с учетом возрастных особенностей учащихся.

Ускорение темпов научно-технического прогресса предъявляет к современной школе новые требования, начиная с пересмотра целей и задач обучения до изменения содержания конкретных предметов. Издано большое количество учебников по всем школьным предметам. Не является исключением и физика, существуют учебники разных авторов, разного уровня сложности, охватывающие разный объем и т. д., но преимущественно это классическая физика.

Очень редко авторы, боясь перегрузить учебник, не касаются проблем современной науки, за исключением некоторых примеров [1]. На самом деле отказ от изучения современных научных достижений ведет к нарушению принципа научности обучения, снижению качества знаний.

Физика 20 века сделала гигантские шаги, школьные учебники давно отстали и не выполняют своего прямого назначения – передача каждому молодому члену общества системы знаний, соответствующих уровню развития данного общества.

В данной статье показаны возможности программы физики 11 класса общеобразовательной школы для внедрения в нее учебного материала, который бы отвечал уровню научно-технического прогресса наших дней.

Анализ учебной программы и учебных пособий по физике 11 класса показал, что значительная часть этого курса посвящена наиболее позднему периоду развития физики, но наблюдается существенное отставание от реального научного уровня развития общества. Ребята черпают знания из средств массовой информации, интернета, научных статей, относятся к школьному учебнику как к «преданьям старины глубокой». Рассмотрим несколько конкретных примеров.

Традиционная в 11 классе тема «Закон электромагнитной индукции» подробно рассматривает историю открытия, демонстрируются интересные опыты, но для учеников это один из законов физики, который через некоторое время можно забыть.

На самом деле невозможно представить нашу жизнь без электромагнитной индукции, на ее принципе работают все электростанции мира, начиная от ветряков и заканчивая атомными.

О широком практическом применении этого явления практически не говорится в школьных учебниках, ребята в своем большинстве считают, что на атомных электростанциях электрический ток возникает каким-то образом в результате радиоактивного распада. Несколько параграфов о передаче и производстве электрической энергии совершенно не являются логическим продолжением изученного материала [2].

Не получила должного внимания в школьном курсе и квантовая электронная теория твердого тела. Теория, которая определяет принципы работы наших повседневных радиоэлектронных устройств.

В школьных учебниках в разделе о принципах радиосвязи рассматриваются достижения столетней давности, конечно, они являются основой передачи звука и изображения, но вакуумные электронные трубки для кинескопов, о которых пишут в учебниках, ушли давно в прошлое [2].

Не мешало бы современным ученикам познакомиться с разновидностями современных телевизоров, их как минимум сейчас три группы: плазменные, жидкокристаллические (LCD), жидкокристаллические со светодиодами (LED), на подходе OLED-телевизоры.

Создание современной электроники, получение новых материалов с экстремальными механическими, электрическими, оптическими свойствами, было бы невозможным без развития одного из важнейших разделов физики – физики твердого тела.

Исследования в области ФТТ являются опорой, на которой держатся современные прогрессивные технологии, без знаний физики твердого тела невозможно понять принципов работы современного оборудования, невозможно создать новые наиболее эффективные приборы, устройства и материалы.

Возникла социальная потребность в элементах физического образования, в которых бы отражались достижения науки и техники соответственно возрастным способностям учащихся.

Говоря о физике 11 класса, нельзя оставить без внимания физику атомного ядра и элементарных частиц.

Материал этого раздела невозможно рассматривать без квантово-физических описаний явлений. Прошло 10 лет, как был открыт Бозон Хиггса, ни в одном школьном учебнике мы не встретим параграфа, который расскажет о сути открытия, предсказанного 60 лет назад. О Большом адронном коллайдере, Чернобыльской катастрофе, Стандартной Модели Мира ребята узнают тоже не из школьных учебников.

К сожалению, не знают наши ученики, что такое ЦЕРН, величайшие события современности проходят мимо школьных программ. При колоссальной нагрузке школьному учителю в одиночку не решить этой проблемы, необходимо обновлять школьную программу, вводя в нее элементы современной физики.

Авторы учебников оправдываются, что современная физика сложна, требует серьезных математических вычислений, но приведенные в данной статье научные факты вполне доступны понимания школьников, могут быть представлены на качественном уровне без математических выкладок.

Содержание школьного физического образования должно совершенствоваться за счет изучения материала, знания которого необходимы современному молодому человеку. Необходимо проводить регулярный отбор фактического материала и адаптировать его к школьному курсу.

В современных условиях требуется не только своевременное наполнение учебных программ элементами физики твердого тела, но и принципиальные изменения в методике преподавания предметов естественно-научного цикла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кондратьев А. С. Тенденции развития обучения физике в средней школе // Методологические проблемы физического образования: Герценовские чтения, Санкт-Петербург, 15-16 мая 1995 года ; Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена. Санкт-Петербург: Образование, 1995. С. 3-4.

2. Мякишев Г. Я., Буховцев Б. Б. Физика : Учеб. для 11 кл. общеобразоват. учреждений. М.: Просвещение. 2004. 336 с.

ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ КУРСА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ РАЗДЕЛА «МЕХАНИКА» С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОБИЛЬНЫХ УСТРОЙСТВ

А. Ю. Милинский

ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
Благовещенск, e-mail: a.milinskiy@mail.ru

Предлагается авторская методика проведения лабораторного практикума по физике раздела «Механика» у студентов направлений подготовки 02.03.03 «Математическое обеспечение и администрирование информационных систем» и 09.03.02 «Информационные системы и технологии» с применением мобильных устройств. Исследовано влияние такого подхода на уровень знаний студентов.

В соответствии с государственными образовательными стандартами нового поколения выпускники вузов должны обладать широким набором компетенций, в том числе связанных с научно-исследовательской деятельностью [1]. Направленная на получение новых, ранее не известных результатов, она способствует развитию интереса к обучению, поиску, а также к критическому осмыслению имеющейся в литературе информации. Несоответствие выпускников вузов указанным критериям может привести к негативным последствиям [2].

Для направлений подготовки 02.03.03 «Математическое обеспечение и администрирование информационных систем» и 09.03.02 «Информационные системы и технологии» реализуемых в Благовещенском государственном педагогическом университете (ГПУ) физика, как базовая естественнонаучная дисциплина, включена в учебные планы. В процессе выполнения лабораторных работ по физике у студентов начинают формироваться навыки научно-исследовательской деятельности. Кроме того, знание выпускником фундаментальных физических законов и теорий позволяет быстро адаптироваться в мире стремительно развивающихся науки и технологий.

Цель исследования – разработать физический практикум по курсу «Механика» с использованием датчиков мобильных устройств и исследовать его влияние на уровень знаний студентов направлений подготовки 02.03.03 и 09.03.02.

У студентов направлений 02.03.03 и 09.03.02 физика изучается в течении двух семестров на втором курсе. В первом семестре второго курса изучаются разделы «Механика» и «Молекулярная физика и термодинамика» общего курса физики. На первый раздел отводится 4 четырехчасовые лабораторные работы. В процессе выполнения первой работы студенты учатся расчету погрешностей при прямых и косвенных физических измерениях. Далее следуют работы по исследованию колебаний маятников и закона сохранения механической энергии.

Группы указанных направлений подготовки всегда делятся на две подгруппы. Одна из подгрупп каждой группы была выбрана в качестве экспериментальной, а вторая контрольной. В контрольных подгруппах все лабораторные работы проводились по классическому подходу, а в экспериментальных две из четырех – по авторскому. Вторая и четвертая работы в экспериментальных группах являются авторскими. Для их выполнения студентам выдается необходимый перечень оборудования и материалов с указанием цели работы и кратким описанием задач. Студенты должны самостоятельно прийти к реализации экспериментальной установки, выполнить экспериментальные измерения и произвести расчеты требуемых физических величин.

ЛИТЕРАТУРА

1. Алексеева А. В., Пестенина И. В. Формирование компетенций студентов вуза средствами научно-исследовательской деятельности // Известия МГТУ МАМИ. 2014. Т. 5. № 3(21). С. 139-144.
2. Алпатов Г. Е. Последствия сокращения человеческого капитала в системе высшего образования // Научный журнал НИУ ИТМО. Серия: Экономика и экологический менеджмент. 2019. № 2. С. 36-41. DOI 10.17586/2310-1172-2019-12-2-36-41.

ПРИМЕНЕНИЕ СРЕДСТВ COMSOL MULTIPHYSICS В ЛАБОРАТОРНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

К. С. Погребняк, И. В. Верхотурова

ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
Благовещенск, e-mail: rusia@mail.ru

В данной работе представлены результаты применения средств Comsol Multiphysics для демонстрации в лабораторном эксперименте процесса обтекания ламинарным и турбулентными потоками тел различной геометрии.

В настоящее время в современном лабораторном практикуме модельный эксперимент, не являясь альтернативой реальному, с помощью компьютерных реализаций, сопровождающихся какой-либо формой визуализации изучаемого процесса, позволяет изучать недоступные или труднодоступные процессы для реальных опытов, позволяет лучше понимать изучаемый физический процесс или явление и делает их наглядными [1, 2].

В данной работе представлены результаты применения средств среды Comsol Multiphysics для выполнения одной из лабораторных работ модуля «Аэродинамика» дисциплины Газогазоаэродинамика.

Выполнение в рамках лабораторной работы моделирование процесса обтекания удобо- и неудобообтекаемых тел ламинарным и турбулентным потоками вязкой жидкости при различных числах Рейнольдса прекрасно дополняет теоретический материал некоторых тем модулей «Газовая динамика» и «Аэродинамика», изучаемый обучающимися.

Ввиду отсутствия оборудования для демонстрации процесса обтекания тел различной геометрической формы ламинарным и турбулентным потоками вязкой жидкости данный процесс предлагается реализовать в среде Comsol Multiphysics.

Это позволяет наглядно визуализировать пограничный слой, зоны его отрыва от поверхности обтекаемого тела, зоны максимальных скоростей в области миделевого сечения, зоны концевых эффектов в случае обтекания цилиндра и аэродинамического профиля. Для реализации процесса выбран программный продукт Comsol Multiphysics поскольку он предоставляет возможность моделирования физических процессов, описываемых частными дифференциальными уравнениями.

Программа Comsol Multiphysics – это интегрированная среда численного моделирования, которая обладает большим разнообразием решателей, широким функционалом, мощным графическим интерфейсом и высокой гибкостью использования, что позволяет пользователю решать самые сложные задачи [3].

Моделирование процесса обтекания тел различной геометрической формы турбулентными и ламинарными потоками предлагается обучающимся проводить с использованием интерфейса *Fluid Flow* и *Single – Phase Flow*.

Для решения задачи предлагается выбирать раздел *Laminar Flow* или *Turbulent Flow*. Моделирование можно проводить как в 3D, так и в 2D размерности пространства.

Последнее используется для моделирования обтекания аэродинамического профиля.

После выбора основных разделов, формируется дерево модели, в котором обучающий-

ся проводит построение геометрии обтекаемого тела и расчетного домена, задает начальные и граничные условия для дифференциальных уравнений, выбирает расчетную сетку и запускает решатель.

Построение удобообтекаемого (аэродинамический профиль) или неудобообтекаемого тела (сфера, цилиндр), а также расчетного домена (в виде прямоугольного параллелепипеда или прямоугольника), внутри которого находится обтекаемое тело, производится с помощью функции *Geometry*.

С помощью данной функции задаются как геометрические параметры обтекаемого тела и расчетного домена, так и координаты положения тела в домене. Процесс обтекания твердого тела жидкостью описывается системой дифференциальных уравнений, состоящей из уравнения Навье-Стокса и уравнения неразрывности (уравнение баланса массы), а также дополняющими их начальными и граничными условиями.

Граничные условия для параметров жидкости (газа) скорости и давления задаются с помощью функции *Inlet* для границы впуска жидкости, а с помощью команды *Outlet* для границы выпуска жидкости (рис. 1).

Граница выпуска жидкости расположена параллельно относительно границы впуска. Причем стенки параллелепипеда (или прямоугольника), не являющиеся границами впуска и выпуска жидкости, считаются не пропускающими жидкость.

Поэтому нормальную составляющую вектора скорости жидкости по отношению к поверхности этих стенок принимают равной нулю.

Начальное значение скорости задается в зависимости от режима течения, ламинарный или турбулентный. Физические свойства жидкости, такие как вязкость и плотность, а также материал обтекаемого тела, заданы выбранным материалом в разделе *Materials*.

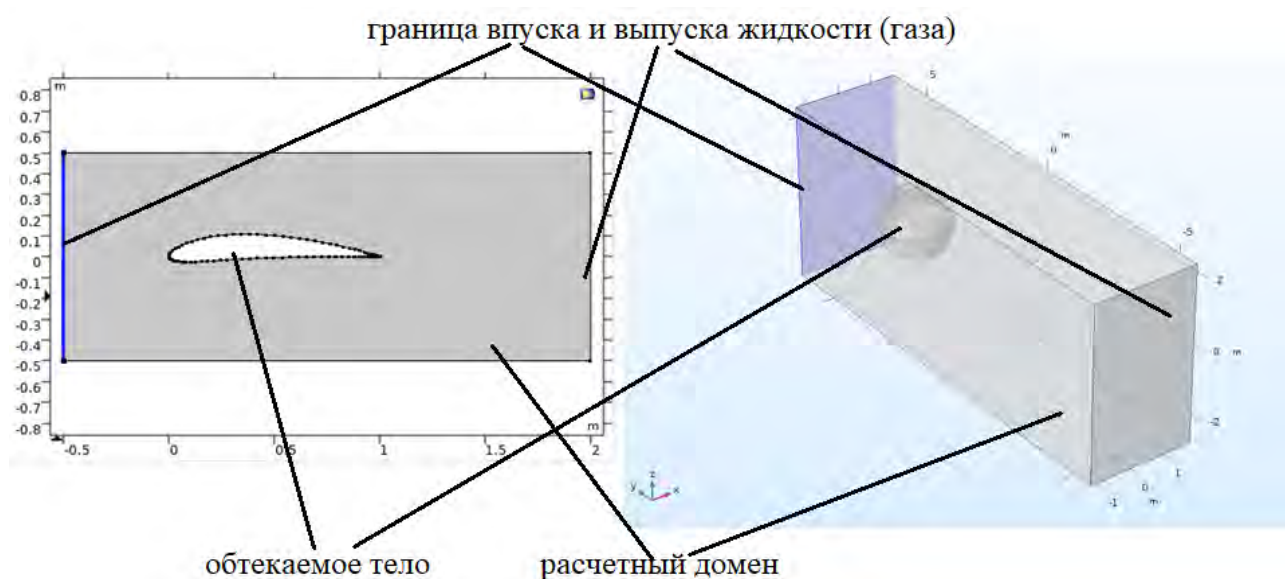


Рис. 1. Граничные области на расчетном домене

С помощью узла *Mesh* проводится задание расчетной сетки в виде малых тетраэдров обтекаемого тела и расчетного домена, в каждом из которых производится расчет скорости течения жидкости и давления.

Для того чтобы удостовериться в правильности полученных значений моделирования обучающийся может изменить плотность сетки и следить за изменением результатов. Если решение не изменяется в зависимости от параметров сетки в требуемых пределах, то пара-

метры сетки заданы оптимально.

Выполнив все этапы моделирования и запустив решатель обучающийся, выполняющий моделирование, получает полные картины распределения скоростей и давления по поверхности обтекаемого тела для разных режимов течения жидкости.

Для обзора возможностей применения среды Comsol Multiphysics в лабораторном эксперименте, ниже представлены результаты моделирования, которые отлично дополняют изучаемый теоретический материал.

На рис. 2 представлена картина распределения скоростей, полученная при моделировании неудобообтекаемого тела (сферы) турбулентным и ламинарным потоками вязкой жидкости, а на рис. 3 – картина распределения скоростей, полученная при моделировании удобообтекаемого тела (аэродинамического профиля, симметричного и несимметричного).

На картине темными линиями представлены линии тока, а цветовая гамма выражает поле скорости потока.

Это поле скоростей можно представить и в виде векторов скорости, касательных к линиям тока, но тогда не будет видно четких границ некоторых зон.

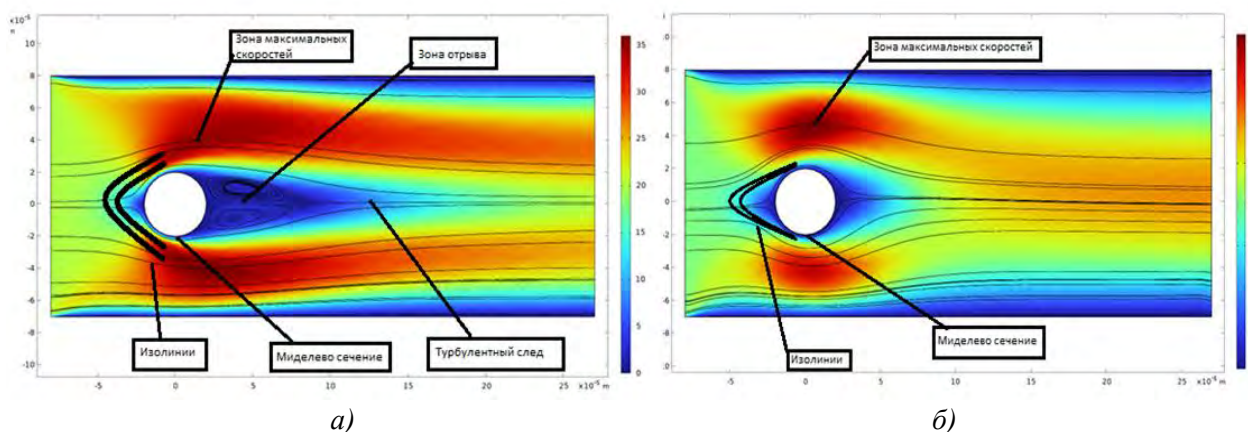


Рис. 2. Картина распределения скорости в окрестности сферы при обтекании его ламинарным (а) и турбулентным (б) потоками жидкости

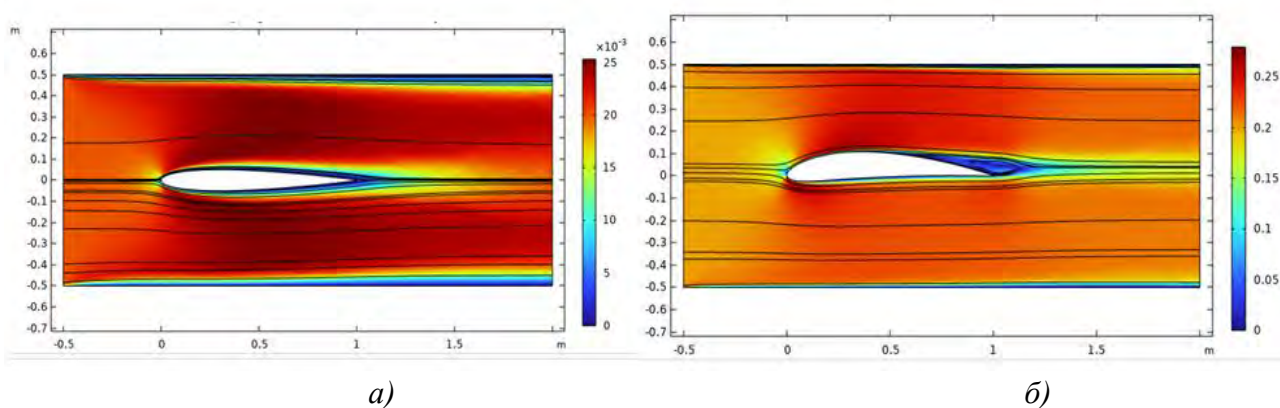


Рис. 3. Картина распределения скорости в окрестности аэродинамического профиля симметричного (а) и несимметричного (б) при обтекании турбулентным потоками жидкости

Опираясь на теоретические знания по полученным картинам распределения скорости и давления по поверхности обтекаемого тела, обучающиеся должны дать полное развернутое описание зон и явлений, возникающих при обтекании тела потоком жидкости.

Для примера, обучающиеся могут описать, наблюдаемую зону торможения вблизи передней точки соприкосновения потока с неудобнообтекаемым телом, в которой происходит снижение скорости потока до нуля и повышение давления в потоке до полного значения.

Описать изменение формы изолинии этой зоны (линий возмущения от сферы), как они по-разному распространяются вверх по потоку, в зависимости от режима течения потока и формы обтекаемого тела.

Описать пограничный слой, прилегающий к поверхности обтекаемого тела, и как в нем меняется скорость потока.

Выделить зону максимальных скоростей и описать причины ее формирования и изменения.

Описать и обосновать изменение давления по поверхности обтекаемого тела.

Особенно важным является описание обучающимся аэродинамического следа в кормовой части обтекаемого тела: описание его формирования, условия его распада и отрыва, изменения в нем скорости и давления, зависимость формы аэродинамического следа от формы обтекаемого тела и режима течения потока.

В дополнение к данной лабораторной работе в дальнейшем также планируется разработать еще одну работу для модуля «Аэродинамика» с применением средств среды Comsol Multiphysics.

В данной работе обучающимся предстоит моделировать процесс обтекания аэродинамического профиля (симметричного и несимметричного) под разными углами атаки.

Таким образом, в статье показано, что применения средств среды Comsol Multiphysics для реализации некоторых работ в лабораторном эксперименте по модулям «Газовая динамика» и «Аэродинамика» дисциплины Гидрогазоаэродинамика, весьма продуктивно. Поскольку ввиду отсутствия необходимого оборудования прекрасно дополняет теоретический материал изучаемых модулей, позволяя реализовывать различные условия обтекания тел разнообразной геометрической формы.

Полученные знания и навыки работы в среде Comsol Multiphysics могут быть также полезны для обучающихся в дальнейшем, при прохождении различных видов практик и написании выпускной квалификационной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Поляков К. А., Калабухов В. Н. Моделирование обтекания шара вязкой средой при наличии скольжения на поверхности в пакете ANSYS/CFX: электронное пособие для дистанционного обучения. М: СГУ. 2013. 67 с. Режим доступа: http://mmm_samgu.samsu.ru/posob.html.
2. Малюга В. С. Численное моделирование обтекания сферы потоком вязкой несжимаемой жидкости // Прикладная гидромеханика. 2013. Том 15. № 3. С.43-67. URL: [http://hydromech.org.ua/content/pdf/ph/ph-15-3\(43-67\).pdf](http://hydromech.org.ua/content/pdf/ph/ph-15-3(43-67).pdf).
3. Comsol.ru. Руководство пользователя. 2014. URL: <http://comsol.ru/support/knowledgebase>.

ОРГАНИЗАЦИЯ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ МЛАДШИХ КУРСОВ В УСЛОВИЯХ РЕАЛИЗАЦИИ ФГОС ВО

А. С. Стукалова

ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный медицинский университет»
Хабаровск, e-mail: stukalovaanna@mail.ru

Подготовка студентов к научно-исследовательской деятельности является отдельным важным направлением в системе высшего образования. Студенческая научная работа выступает условием личностного творческого роста, успешной тренировкой навыков самореализации и саморазвития и возможностью студенту узнать горизонты собственного развития как личности и будущего специалиста. Овладение методологией научных исследований может проводиться обучающимися через опыт публичных научных выступлений и написание научных статей под руководством преподавателя. В статье рассматриваются некоторые организационные формы работы преподавателя со студентами, направленные на развитие и совершенствование исследовательских компетенций обучающихся.

Современное общество, испытывающее в последнее время глобальные социально-экономические и научно-технические перемены, характеризуется острой потребностью в высококвалифицированных молодых профессионалах, способных обеспечить непрерывный прогресс и устойчивое развитие своей отрасли. Это не может не оказать влияние на систему образования, интегрированную с соответствующими профессиональными стандартами в научное пространство.

Новая образовательная парадигма, заложенная в ФГОС ВО последнего поколения, предполагает раннее формирование и развитие научно-исследовательских компетенций у студентов, вовлечение обучающихся в научно-творческую среду, активизацию системно-аналитической и проектной деятельности.

Университет выступает при этом организационной площадкой для представления итогов исследовательских работ студентов, их опыта ведения публичных научных дискуссий, создания условий для обмена мнениями. Работа студентов в данном направлении является обязательным элементом модели современного специалиста высшего профессионального образования.

Научная деятельность университета и собственно наука (фундаментальная или прикладная) отличаются [1]. Первая обязательно пронизана педагогической нагрузкой, ориентирована на формирование аналитических качеств студентов, ознакомление их с инновационными профессиональными технологиями, усиление их научно-исследовательских интересов и становление профессионального и научно-критического мышления в будущем.

Как правило, научно-исследовательские работы обучающихся своей проблематикой не выходят за рамки актуальных научных направлений структурных подразделений (кафедр), курирующих студентов, и апробируются на научных семинарах, круглых столах и конференциях различного уровня.

В основе мотивации проведения активной научно-исследовательской деятельности студентов авторы [2] рассматривают разные факторы – от собственно высокой познавательной активности и стремления повысить уровень личностных притязаний до административно-

управленческих (возможность получения повышенной стипендии, дополнительных баллов при поступлении в аспирантуру).

Формы научно-исследовательской работы студентов в Дальневосточном государственном медицинском университете (ДВГМУ) разнообразны: подготовка научных устных и стендовых докладов, написание статей и тезисных сообщений, активная работа в кафедральных научных кружках и научных сообществах университета.

Независимо от формы и вида деятельности от студента требуется развитие навыков планирования, структурирования, тщательного поиска и анализа материала и представление результатов исследования в определенном научном стиле изложения.

Для развития научного и интеллектуального потенциала студентов, обучения основам научно-исследовательской деятельности можно использовать определенные приемы и методы индивидуальной работы, стимулирующие творческое мышление.

На кафедре физики, математики и информатики ДВГМУ успешно функционирует научный кружок, являющийся частью студенческого научного объединения – Научного общества молодых ученых и студентов (НОМУС). НОМУС ДВГМУ представляет интересы молодых исследователей, способствует повышению качества профессиональной подготовки студентов, ординаторов, научной деятельности аспирантов и соискателей, расширяет общий и профессиональный кругозор молодых специалистов и является потенциальным резервом кадров высшей квалификации для профессорско-преподавательского состава.

Перспективные студенты и ординаторы имеют возможность заявить о себе на таких серьезных научных платформах как молодежные форумы с международным участием, в число организаторов которого входит и ДВГМУ [3].

В рамках кафедрального кружка заинтересованные студенты имеют возможность углубленно изучать частные вопросы биофизических направлений: основы функционирования зрительного и слухового аппарата, свойства и функции биологических мембран, биомеханику мышечных сокращений и многое другое.

Проводимые преподавателями кафедры тематические круглые столы и научные студенческие семинары позволяют сформировать у студентов опыт ведения публичных научных дискуссий.

Работу в этом направлении можно условно разделить на два этапа: подготовка текста сообщения и коллективная работа по обсуждаемой проблеме.

Как правило, обучающиеся, выбрав индивидуальную тему сообщения, в качестве источника информации предпочитают использовать глобальную сеть Интернет и ограничиваются первыми информационными сайтами в сетевом окне поиска.

Преподавателю следует предостеречь студентов от подобной ошибки, акцентировать их внимание на разницу в качестве информации, содержащейся на обезличенном сайте без указания автора и ресурсе, принадлежащем электронной библиотеке какой-либо учебной или научной организации.

Но даже если выбран носителем сведений академический источник, необходимо тщательно с ним поработать дополнительно: ознакомится с параграфами, близкими по смыслу и содержанию выбранной темы (быть в курсе контекста всего вопроса), перекомпоновать текст используемого издания под свое выступление (убрать «лишнюю» информацию, сделать пометки встречающихся незнакомых определений и терминов). При групповой работе в процессе заслушивания сообщения студенты учатся навыкам дисциплинированного учета времени выступления, умению задавать вопросы уточняющего характера, основам коммуникации и опыту публичных выступлений.

Полезной тренировкой, организуемой при помощи преподавателя, может выступить метод вопросов и контраргументов к докладчику со стороны слушателями (какие эксперимен-

ты подтвердили данную модель? что из перечисленных свойств являются основополагающими? какие доказательства из представленных кажутся недостаточными и почему?).

Если педагог использует научную дискуссию как инструмент для формирования критического мышления у студентов, умений выделить главное в большом объеме информации, навыков динамично и аргументировано вести диалоги, то полезным подспорьем может выступить ведение чек-листа с указанием результатов выполнения определенных критериев по шкале оценивания, например, от 0 до 3 баллов (табл. 1).

Завершающим этапом научного семинара может выступить анализ деятельности студентов, как со стороны преподавателя, так и в рамках интроспекции самими студентами – какие ошибки в научной дискуссии были допущены, выдержан ли баланс между активностью выступления и собственно учебно-познавательной частью проблемы, полемика выступления соответствовала ли заявленной теме.

Публикация студенческой научной статьи является весомым аргументом участия обучающегося в научной жизни университета. Она является итогом выполненной практической работы, самостоятельным логически цельным произведением, имеющим определенные каноны и требования.

Форматирование текста статьи ведется по общеизвестным правилам: аннотация, ключевые слова, актуальность, цели и задачи исследования, материалы и методы, результаты и их обсуждение, заключение с основными выводами.

Таблица 1

Чек-лист проведения научной дискуссии

Критерии	Иванов И. И.	Петров П. П.	...
Доступность и понятность изложения материала без потерь содержания	2 балла
Свободное владение понятийным аппаратом темы	1 балл
Конструктивность и готовность к сотрудничеству при контраргументах	2 балла
Представление материала (эмоциональность, иллюстративность)	0 баллов
Грамотная и структурированная речь	2 балла
Соблюдение временных рамок выступления	3 балла

Большинство студентов, несмотря на проявляемую активность и самостоятельность при выполнении экспериментальной части исследования, испытывают трудности с описанием результатов своей деятельности и сопоставлением их с теоретическим материалом разбираемой проблемы.

Инициировать данную форму работы преподаватель может с помощью анализа структуры и содержания уже готовых научных статей, даже не обязательно близких по тематике.

Предварительно обсудив составные элементы статьи, их назначение, содержание и отличительные черты, можно предложить студенту найти в готовых текстах устойчивые словосочетания, своего рода клише, которые соответствуют этой части публикации (табл. 2).

Если в дальнейшем предполагается систематическая работа по подготовке собственных публикаций, например, поступление в аспирантуру, продуктивным будет занесение подобных клише в специальный блокнот, поиск их при проработке научных текстов и активное использование в собственных сочинениях.

Эффективным приемом по развитию навыков анализа и структуризации информации будет постановка задачи студенту самостоятельно разбить готовую незнакомую статью на структурные элементы (актуальность, методология, результаты и т.д.).

Следующим логическим этапом тогда будет написание черного варианта собственной работы по тому же принципу, если шаг опознавания разделов выполнен удовлетворительно. Конечно, преподаватель еще внесет свою корректуру в текст, исправляя важность на актуальность, разделит новизну и значимость исследования, но самостоятельное составление основы, каркаса будущей статьи – это ценный опыт в научной практике обучающегося.

Таблица 2

Примеры фраз-клише структурных элементов научной статьи

Раздел научной статьи	Устойчивые словосочетания и фразы
Актуальность	В условиях научно-технического прогресса возрастает роль... Несмотря на прогресс в области... Являясь одной из важных проблем, данное исследование позволяет...
Цели и задачи исследования	На основе поставленной цели можно сформулировать следующие задачи... Проанализировать и систематизировать данные по вопросам Провести сравнительную оценку...
Материалы и методы	Оценить взаимосвязь показателей... Количественное определение показателей проводилось ... Статистическая обработка полученных данных выполнялась методом...
Результаты и их обсуждение	В ходе проведенного исследования было выявлено, что... С целью выявления было предложено... Анализируя структуру, нами отмечено...
Заключение	Полученные результаты могут использоваться... В целом следует отметить, что.... Перспективным представляется осуществление...

Безусловно, комплекс мероприятий, методов и форм работы, направленных на активизацию творческого мышления и улучшение динамики научно-исследовательской деятельности студентов, можно расширить. Главным условием остается искренний интерес студента к учебной и научной деятельности и способность к использованию и практическому применению фундаментальных и прикладных знаний для постановки и решения стандартных и инновационных задач исследования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Балашов В. В. Организация научно-исследовательской деятельности студентов в вузах России. М.: Гос. ун-т упр., 2002. 215 с.
2. Матерова А. В. Мотивация научно-исследовательской деятельности студентов // Вестник РУДН. Серия: Психология и педагогика, 2012, №1, с. 132-137.
3. Толстенко И. В., Дущенко А. А., Сазонова Е. Н. Опыт проведения молодежного форума, как площадки для формирования научного потенциала // Материалы XVI Съезда молодежных научных обществ медицинских и фармацевтических вузов России и стран СНГ : Сборник материалов, посвященный 100-летию Самарского государственного медицинского университета и 10-летию Федерации молодежных научных обществ медицинских вузов (г. Самара, 08-10 ноября 2019 г.). Самара, 2019. С. 157-160.

СОДЕРЖАНИЕ

Секция «Теоретическая физика и вычислительная математика»	3
<i>Бухаров Д. Н.</i> Моделирование структуры нанокластеров теллурида свинца	3
<i>Гладких Д. А.</i> Численное моделирование полета ракеты в атмосфере Земли	5
<i>Демьяненко Е. В., Мазур А. И.</i> Влияние фазово-эквивалентных преобразований на теоретические предсказания свойств дейтрона	11
<i>Ефименко М. К., Мазур И. А.</i> Исследование первого возбужденного состояния ядра ${}^6\text{He}$ на основе расчетов <i>AB INITIO</i> с реалистическим нуклон-нуклонным взаимодействием	19
<i>Жукова В. И., Жуков Е. А., Панасюк С. Р.</i> Взаимодействие магнитных волн с доменной границей в ортоферрите иттрия	24
<i>Насыров В. В.</i> Применение методов теории рассеяния для расчета дискретного спектра двухэлектронной атомной системы	28
<i>Севериненко В. И., Бурков С. М.</i> Расчеты характеристик фотоионизации атомов и ионов	31
Секция «Физика конденсированных сред»	37
<i>Барышников С. В.</i> Зависимость диэлектрических свойств композитов на основе нитрата рубидия от характеристик матриц внедрения	37
<i>Верхотурова И. В., Нецименко В. В., Бурова А. И.</i> Механизмы радиационного дефектообразования в оксиде цинка при комплексном облучении	42
<i>Круглов М. С., Пячин С. А., Бондарева Т. В., Кожемяко Н. В.</i> Повышение фотокаталитической активности оксида висмута обработкой плазмой высокочастотного разряда	48
<i>Леоненко Н. А., Капустина Г. Г., Мирошниченко Г. И.</i> Атомно-силовая микроскопия природных субмикронных форм золота	53

Ливашвили А. И., Виноградова П. В., Костина Г. В. Динамика наночастиц в жидкофазной среде с учетом нелинейной концентрационной зависимости коэффициента вязкости.....	57
Павлов А. В., Стукова Е. В. Диэлектрические свойства сегнетоэлектрического композита на основе бромид диизопропиламмония и нитрата цезия	61
Трофимова Л. А., Кузьмина Д. Ю. Изучение оптических свойств хлорида палладия в полимерной матрице методом абсорбционной спектроскопии	64
Филимонов А. В., Бондаренко В. Б. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах	68
Фролов А. М., Крайнова Г. С., Ткачев В. В., Плотников В. С., Должиков С. В., Ралин А. Ю. Структура аморфного сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$ в зависимости от режимов получения.....	72
Чернечкин И. А., Милинский А. Ю. Диэлектрические и тепловые свойства нитрата цезия, внедренного в углеродные нанотрубки	78
Чибисов А. Н. Формирование физических принципов квантовых вычислений как основы для создания будущих квантовых компьютеров на основе тонких слоев Si и Ge	81
Шолыгин И. О., Поляков А. В., Рябов И. А., Фомин Д. В. Формирование тонких пленок силицида магния на Si (111) и исследование их элементного состава	86
Юрина В. Ю., Нецименко В. В. Моделирование прохождения потока протонов и электронов с различными частицами оксида алюминия	90
Секция «Физическое материаловедение»	93
Галкин Н. Г., Ян Д. Т., Галкин К. Н., Непомнящий А. В. Корреляция между коэффициентами отражения и значениями пористости слоев мезопористого кремния с различной морфологией поверхности	93
Дорошенко Е. М., Ниёззода Т. Д., Новиков А. А., Ри Хо Сен Термодинамическое моделирование взаимодействия арсенипирита и касситерита с солями калия и натрия	103
Зайцев А. В., Астапов И. А., Кириченко Е. А., Круглов М. С. Исследование фотокаталитической активности $\text{СахTi}_y\text{O}_z$ покрытий, полученных методом лазерного воздействия на раковинах двустворчатых моллюсков	107

<i>Латынцев А. В., Римлянд В. И.</i> Измерение механических свойств полимерных материалов в процессе отверждения	111
<i>Попова В. С., Ермаков М. А., Дорошенко К. В., Чешев С. С.</i> Компьютерное моделирование термодинамических процессов высокоэнтропийных сплавов системы Fe-Ni-Cr-Co-Mn-Al-V	115
<i>Пошарникова К. С., Драчёв К. А.</i> Исследование акустических свойств эпоксидных композиций с добавлением пластификатора ДЭГ-1	121
<i>Соболев К. В., Сюй А. В., Целиков Г. И., Арсенин А. В., Родионова В. В., Волков В. С.</i> Синтез и структура мхенов $(Ti, Ta)_3C_2T_x$ и $(Ti, Nb)_3C_2T_x$	125
Секция «Общая и техническая физика. Оптика»	130
<i>Драчёв К. А., Булах С. С.</i> Исследование акустических свойств термопластов, применяемых в 3D-печати	130
<i>Петкевич В. М., Ефременко В. Г., Пячин С. А.</i> Создание установки для световой криптографии	135
<i>Поляков А. В., Шолыгин И. О., Султанов Т. Ш., Гаврилина Д. С., Фомин Д. В.</i> Использование термопары при формировании пленок силицида магния на кремнии	139
<i>Пячин С. А., Иванов В. И., Цай В. С.</i> Изменение рефрактивных свойств суспензии под действием лазерного излучения	144
<i>Ульянычева В. Ф., Ульянычев Н. В.</i> Разработка автоматизированного метода исследования механики дыхания путем совместного применения электромиографии и спироинтервалометрии на основе анализа Фурье	148
<i>Фомин Д. В., Поляков А. В., Струков Д. О.</i> Модернизация устройства автоматического переключения источников питания образца	153
Секция «Физическое образование (школьное и вузовское)»	156
<i>Казарбин А. В., Лунина Ю. В., Драчёв К. А.</i> Научно-исследовательская работа как инструмент развития исследовательской компетентности и инженерного мышления студентов	156
<i>Копылова И. Б.</i> Роль естественнонаучных знаний в подготовке инженеров	160
<i>Корнеенко Т. Н.</i> Методы обучения фундаментальным дисциплинам в контексте современности	163

Кузнецов Д. И. Физическое образование студентов-гуманитариев в контексте учебной дисциплины «Концепции современного естествознания» (КСЕ)	167
Мерделина Т. А. О наполнении школьной программы современными физическими знаниями	169
Милинский А. Ю. Лабораторный практикум курса общей физики раздела «Механика» с использованием мобильных устройств	171
Погребняк К. С., Верхотурова И. В. Применение средств COMSOL MULTIPHYSICS в лабораторном эксперименте.....	172
Стукалова А. С. Организация научно-исследовательской работы студентов младших курсов в условиях реализации ФГОС ВО	176

Научное издание

**ФИЗИКА: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ, ОБРАЗОВАНИЕ**

Материалы XX региональной научной конференции
(Хабаровск, 3–7 октября 2022 г.)

В авторской редакции

Компьютерная верстка *Е. А. Кулагиной*

Дизайнер обложки *К. А. Драчёв*

Подписано в печать 04.10.2022. Формат 60x84 ¹/₁₆.
Усл. печ. л. 10,81. Тираж 100 экз. Заказ 200.

Издательство Тихоокеанского государственного университета.
680035, Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136.
Издательско-копировальный отдел Тихоокеанского государственного университета.
680035, Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136.

ISBN 978-5-7389-3638-8



9 785738 936388