МНСК Международная научная студенческая конференция

Материалы секции
ФИЗИКА

10-20 апреля 2022

НОВОСИБИРСК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

МНСК-2022

АЭРОФИЗИКА
ФОТОНИКА И КВАНТОВЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ
ФИЗИКА ПЛАЗМЫ
ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА
ТЕПЛОФИЗИКА
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ
ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ, АСТРОФИЗИКА И КОСМОЛОГИЯ
ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ

Материалы
60-й Международной научной студенческой конференции
10–20 апреля 2022 г.

Новосибирск
2022

УДК 533; 535; 533.9; 53; 004.67; 519; 532-539; 544; 62; 621; 662; 669; 681; 33; 15.010; 63
ББК 22.3; 22.34я431; 22.379я431; 30вб; 31.3; Б в672я431; Ю9; 40я431
А992

А992 Аэрофизика. Фотоника и квантовые оптические технологии. Физика плазмы. Физика твердого тела. Теплофизика. Физические методы в естественных науках и материаловедении. Физика элементарных частиц, астрофизика и космология. Инструментальные методы и техника экспериментальной физики : Материалы 60-й Междунар. науч. студ. конф. 10–20 апреля 2022 г. / Новосиб. гос. ун-т. — Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2022. — 310 с.

ISBN 978-5-4437-1296-3

Данное издание представляет собой публикации тезисов 60-й Международной научной студенческой конференции 2022 года (МНСК-2022) по физике (аэрофизика; фотоника и квантовые оптические технологии; физика плазмы; физика твердого тела; теплофизика; физические методы в естественных науках и материаловедении; физика элементарных частиц, астрофизика и космология; инструментальные методы и техника экспериментальной физики).

Материалы конференции представляют интерес для студентов, аспирантов, преподавателей, научных работников, сотрудников образовательных учреждений.

УДК 533; 535; 533.9; 53; 004.67; 519; 532-539; 544; 62; 621; 662; 669; 681; 33; 15.010; 63
ББК 22.3; 22.34я431; 22.379я431; 30вб; 31.3; Б в672я431; Ю9; 40я431

© СО РАН, 2022
© Новосибирский государственный университет, 2022

ISBN 978-5-4437-1296-3

SIBIRIAN BRANCH OF RAS
MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION
OF THE RUSSIAN FEDERATION
NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY

ISSC-2022

AEROPHYSICS
PHOTONICS AND QUANTUM OPTICAL TECHNOLOGIES
PLASMA PHYSICS
SOLID STATE PHYSICS
THERMOPHYSICS
PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES
ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS, ASTROPHYSICS AND COSMOLOGY
INSTRUMENTATION IN EXPERIMENTAL PHYSICS

Proceedings
of the 60th International Scientific Student Conference
April, 10–20, 2022

Novosibirsk
2022

УДК 533; 535; 533.9; 53; 004.67; 519; 532-539; 544; 62; 621; 662; 669; 681; 33; 15.010; 63
ББК 22.3; 22.34я431; 22.379я431; 30вб; 31.3; Б в672я431; Ю9; 40я431
А992

А992 Aerophysics. Photonics and quantum optical technologies. Plasma physics. Solid state physics. Thermophysics. Physical methods in natural sciences. Elementary particle physics, astrophysics and cosmology. Instrumentation in experimental physics : Proceedings of the 60th International Students Scientific Conference. April, 10–20, 2022 / Novosibirsk State University. — Novosibirsk : IPC NSU, 2022. — 310 p.

ISBN 978-5-4437-1296-3

This edition represents the publications of the 60th International Scientific Student Conference 2022 (ISSC-2022) theses in physics (aerophysics; photonics and quantum optical technologies; plasma physics; solid state physics; thermophysics; physical methods in natural sciences; elementary particle physics, astrophysics and cosmology; instrumentation in experimental physics).

These Conference materials can be of interest for students, Ph. D. candidates, professors, scientists, and members of educational institutions.

УДК 533; 535; 533.9; 53; 004.67; 519; 532-539; 544; 62; 621; 662; 669; 681; 33; 15.010; 63
ББК 22.3; 22.34я431; 22.379я431; 30вб; 31.3; Б в672я431; Ю9; 40я431

ISBN 978-5-4437-1296-3

© SB RAS, 2022
© Novosibirsk State University, 2022

АЭРОФИЗИКА

Научный руководитель секции —
акад. РАН, д-р физ.-мат. наук, проф. *В. М. Фомин*

Председатель секции — д-р физ.-мат. наук, проф. *С. Г. Миронов*

Ответственный секретарь секции — канд. физ.-мат. наук *А. А. Яцких*

Экспертный совет секции
д-р физ.-мат. наук *А. Н. Кудрявцев*
д-р физ.-мат. наук *А. Е. Медведев*
д-р физ.-мат. наук *Г. А. Поздняков*
канд. физ.-мат. наук *Д. А. Бунтин*
канд. физ.-мат. наук *А. С. Верещагин*
канд. физ.-мат. наук *Г. В. Шоев*

AEROPHYSICS

Section scientific supervisor — Acad. RAS, Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *V. M. Fomin*

Section head — Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *S. G. Mironov*

Responsible secretary — Cand. Phys.-Math. Sci. *A. A. Yatskikh*

Section scientific committee
Dr Phys.-Math. Sci. *A. N. Kudryavtsev*
Dr Phys.-Math. Sci. *A. E. Medvedev*
Dr Phys.-Math. Sci. *G. A. Pozdnyakov*
Cand. Phys.-Math. Sci. *D. A. Bountin*
Cand. Phys.-Math. Sci. *A. S. Vereshchagin*
Cand. Phys.-Math. Sci. *G. V. Shoev*

УДК 535.36; 551.501.776

Оптические и микрофизические характеристики облаков верхнего яруса по данным зенитно-ориентированных лидарно-пиранометрических измерений

Н. М. Андреянов

Томский государственный университет

Облака верхнего яруса (ОВЯ) являются важным фактором, влияющим на формирование погоды и климата. Обладая большой горизонтальной протяженностью, достигающей тысячи километров [1], такие облака могут покрывать до половины земной поверхности [2]. Их вклад в парниковый эффект существенный, несмотря на малую оптическую толщу [3]. Тем не менее их микроструктура остается недостаточно изученной и весьма грубо учитывается в численных моделях прогноза погоды и климата, что влечет за собой неминуемые ошибки.

Высотный поляризационный лидар НИ ТГУ обеспечивает экспериментальное определение оптических и геометрических характеристик ОВЯ. Для оценки их влияния на распространение оптического излучения в атмосфере используется зенитный пиранометр ИМКЭС СО РАН, обеспечивающий измерения потока рассеянной солнечной радиации в околозенитной области небосвода [4].

Для совместного анализа и интерпретации данных комплексных лидарно-пиранометрических измерений разработана оригинальная программа. В докладе описывается выборка экспериментальных данных, процедуры их обработки и сопоставления. Рассматриваются результаты комплексных экспериментов по исследованию ОВЯ с наличием преимущественно горизонтально ориентированных ледяных частиц и без них.

1. Фейгельсон Е. М., Суханов М. А., Горчанок Г. И. и др. Радиационные свойства перистых облаков. М.: Наука, 1989. 220 с.

2. Heymsfield A. J., Kramer M., Luebke A. et al. Cirrus clouds // Meteor. Monogr. 2017. Vol. 58.

3. Воробьева В. В., Володин Е. М. Численное моделирование воздействия на климат путем изменения свойств облаков верхнего яруса в климатической модели ИВМ РАН // Тр. Гидрометцентра России. 2017. Вып. 363. С. 19–34.

4. Брюханов И. Д., Зуев С. В., Самохвалов И. В. Влияние зеркальных облаков верхнего яруса на потоки рассеянной солнечной радиации в зените // Оптика атмосферы и океана. 2021. Т. 34, № 4. С. 272–279.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. И. В. Самохвалов

УДК 532.6

Критерий подобия в задаче сверхзвукового обтекания пористого тела

И. Р. Валиуллин, Т. С. Милицина

Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный технический университет

В настоящей работе экспериментально и численно исследуется метод снижения аэродинамического сопротивления с использованием пористых материалов на примере сверхзвукового обтекания цилиндра с передней вставкой из высокопористого ячеистого материала под разными углами атаки.

Для определения аэродинамических характеристик реального объекта по результатам исследований их небольших моделей необходимо найти критериальные зависимости аэродинамических коэффициентов от скорости потока, диаметра пор материала, характерного размера тела. Ранее был найден параметр подобия сверхзвукового обтекания цилиндра с передней пористой вставкой под нулевым углом атаки для разных диаметров цилиндра и диаметра пор при числах Маха M_∞ = 4,85; 7; 21. Цель данной работы — найти критерий подобия аэродинамических коэффициентов для разных углов атаки.

Численное моделирование сверхзвукового обтекания цилиндра с передней вставкой из высокопористого ячеистого материала проводилось с помощью пакета ANSYS Fluent в рамках трехмерных уравнений Навье — Стокса, осредненных по Рейнольдсу. Для описания реального образца ВПЯМ используется тороидальная модель, которая состоит из набора соосных колец круглого сечения. Определяющими параметрами модели являются пористость (95 %) и размер пор (2 мм) реального ячеистого материала.

Экспериментальное исследование было выполнено в сверхзвуковой аэродинамической трубе Т-327 ИТПМ, при числе Маха M_∞ = 7 и единичном числе Рейнольдса $1{,}5 \times 10^6$ 1/м на моделях цилиндра различного диаметра с передней пористой вставкой из ячеисто-пористого никеля с пористостью 95 % и различным диаметром пор. В экспериментах измерялась сила сопротивления модели в потоке с помощью 3-компонентных аэродинамических весов тензометрического типа при вариации угла атаки модели от 0 до 25°.

Получена аналитическая зависимость нормированного коэффициента аэродинамического сопротивления для разных углов атаки от параметра подобия, в который входит отношение диаметра цилиндра к диаметру пор материала и число Маха. Показано, что в диапазоне углов атаки $0 \div 10°$ нормированный коэффициент сопротивления подчиняется критерию подобия, полученному для нулевого угла атаки.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук, проф. С. Г. Миронов,
д-р физ.-мат. наук Т. В. Поплавская

УДК 532.5.032

Численное моделирование взрывного обжатия цилиндрической кумулятивной облицовки

Д. В. Гусаченко

Новосибирский государственный университет
Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск

В ранних работах [1, 2] процесс схлопывания осесимметричных облицовок рассматривался в рамках простейшей модели идеальной несжимаемой жидкости. Однако экспериментальные данные, полученные при рентгеноимпульсной съемке, показали неприменимость данной модели при рассмотрении окончания процесса схлопывания. Использование модели вязкой несжимаемой жидкости позволило расширить область применения первоначальной модели, а также объяснило некоторые возникающие эффекты: наличие критического радиуса, при котором облицовка прекращает схлопываться; кумулятивный нагрев внутренних слоев и последующее испарение материала облицовки; потеря устойчивости.

В работе [3] показано аналитическое решение задачи движения металлической цилиндрической облицовки при взрывном обжатии, численный расчет радиального распределения температуры, а также определение среднего коэффициента вязкости в однофазном приближении. Авторами был показан нагрев материала облицовки до температур плавления и испарения, соответственно, использование однофазного приближения с применением среднего коэффициента вязкости является весьма грубым.

Для уточнения аналитического решения была построена численная модель, в основе которой положено взрывное обжатие двухфазной облицовки. Также в рамках данной модели произведена проверка задачи на устойчивость. Новая модель лучше согласуется с экспериментальными данными, является более точной, нежели однофазная, и может быть распространена до многофазной модели с динамическим коэффициентом вязкости.

1. Кинеловский С. А., Матюшкин Н. И., Тришин Ю. А. Схождение несжимаемого кольца к центру под воздействием продуктов взрыва // Динамика сплошной среды. 1970. № 5. С. 23–32.
2. Кинеловский С. А., Матюшкин Н. И., Тришин Ю. А. О движении цилиндрического поршня к центру // Динамика сплошной среды. 1971. № 7. С. 105–114.
3. Матюшкин Н. И., Тришин Ю. А. О некоторых эффектах, возникающих при взрывном обжатии вязкой цилиндрической оболочки // ПМТФ. 1978. № 3. С. 99.

Научный руководитель — Я. Л. Лукьянов

УДК 533.599, 533.17, 539.198, 544.277.6, 544.435.2

Исследование процесса рассеяния кластеров и мономеров молекулярного пучка на статичных фоновых частицах

Е. Д. Деринг

Новосибирский государственный университет

Исследование сверхзвуковых потоков разреженных газов, истекающих из сопел различных конфигураций, является важной научно-прикладной задачей. В ходе ее решения активно используются методики, основанные на регистрации излучения, инициированного электронным разрядом, а также молекулярно-пучковая масс-спектрометрия (МПМС), поскольку использование распространенных методик исследования газовых потоков затрудняется малой плотностью газа и ее большим градиентом вниз по потоку.

В рамках МПМС из локального объема сверхзвукового газового потока посредством скиммера формируется молекулярный пучок, частицы которого, ввиду разрежения, летят, не сталкиваясь между собой и с частицами остаточного фонового газа (длина свободного пробега превышает размер послескиммерной и детекторной секций). Ввиду ограниченности откачной способности вакуумных установок в послескиммерной секции может создаться избыточное фоновое давление, препятствующее бесстолкновительному пролету частиц молекулярного пучка в область детектирования. В данной работе проанализирован процесс рассеяния мономерных и кластерных частиц молекулярного пучка на статичных фоновых частицах в послескиммерной секции.

Работа выполнена на вакуумном экспериментальном газодинамическом стенде отдела прикладной физики физического факультета НГУ «ЛЭМПУС-2».

В ходе работы проведена серия измерений амплитуд сигналов масс-спектрометра, соответствующих мономерным, димерным и тримерным частицам в сформированном из сверхзвукового потока молекулярном пучке. Для исследования процесса рассеяния молекулярного пучка давление в послескиммерной секции варьировалось в диапазоне 10^{-4}–10^{-2} Па. В качестве рабочих газов были использованы азот, аргон и диоксид углерода. Полученные результаты регистрации амплитуд пересчитаны в сечения столкновений. В работе проанализированы особенности и различные следствия рассеяния легких мономеров и тяжелых кластеров потока на статичных фоновых частицах.

Научный руководитель — К. А. Дубровин

УДК 533.9.072

Исследование формы и динамики перемещения радиального анодного участка столба дуги в двухкамерном цилиндрическом электроде

Н. Ибраемов

Новосибирский государственный университет

Эрозия электрода является определяющим фактором, ограничивающим время работы плазмотрона. Интенсивность эрозии зависит от приэлектродных процессов и процессов, происходящих в теле электрода. Ранее при исследовании двухструйного плазмотрона с цилиндрическими электродами был обнаружен режим его работы с низким уровнем эрозии анода. Было установлено, что условием низко эрозионного режима работы цилиндрического анода является скорость непрерывного перемещения анодной области дуги V ⩾ 20 м/с, при которой не происходит оплавление рабочей поверхности электрода. Скорость перемещения анодной области дуги зависит от величины расхода плазмообразующего газа. Режим работы струйных плазмотронов характеризуется существенно более высоким расходом газа, чем в двухструйных и плавильных плазмотронах. Однако к настоящему времени не определен диапазон скорости перемещения анодной области дуги, обеспечивающий низко эрозионный режим работы двухкамерного цилиндрического анода. Исследование динамики перемещения радиального анодного участка столба дуги в цилиндрическом электроде электродугового плазмотрона направлено на решение этой проблемы. В данной работе было установлено, что по мере увеличения величины расхода плазмообразующего газа происходит квазилинейное возрастание скорости перемещения анодного участка столба дуги. Однако была обнаружена немонотонная (U-образная) зависимость эрозии анода от скорости движения анодной области дуги, что противоречит существующим представлениям о условиях существования низко эрозионного режима работы анода. При скорости движения анодной области дуги свыше 50 м/с наблюдается резкий рост уровня эрозии анода, которая при V = 67 м/с достигает величины $G = 3*10^{-7}$ г / Кл. Увеличение эрозии анода свидетельствует о начале оплавления рабочей поверхности электрода. В связи с этим был проведен анализ теплового взаимодействия анодной области дуги с электродом и были выдвинуты гипотезы, направленные на выяснение причин данного феномена. Одной из возможных причин может являться тот факт, что при увеличении скорости перемещения анодного участка дуги происходит интенсификация обдува ее пристенной области, что может приводить к увеличению плотности тока, а следовательно, и плотности теплового потока в анод. Кроме того, обнаруженное в ходе исследований торможение прианодной области дуги вызывает ее вытягивание вдоль поверхности электрода. Это также может приводить к усилению теплообмена дуги с электродом и, как следствие, к увеличению температуры его поверхности.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. О. Б. Ковалев

УДК 004.9

Разработка алгоритмов расчета скорости движения и ускорения частиц на основе оптической триангуляции их траекторий

Е. Е. Кирчанова

Новосибирский государственный университет
Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Методы получения полной картины потока широко используются в различных областях, таких как строительство мостов и зданий, авиа- и судостроение, создание воздушных и газотурбин. Одной из основных характеристик потока является поле скоростей. Определив мгновенное поле скорости, можно рассчитать другие характеристики, такие как поле ускорения потока или поле давления.

Целью данной работы является разработка метода измерения скорости и ускорения частиц, основанного на оптической триангуляции их траекторий с использованием их изображений.

Был реализован алгоритм восстановления траекторий частиц на основе двумерных проекций исходя из существующих решений. Также была разработана и внедрена программа для тестирования алгоритма расчета скорости и ускорения частиц.

Было проведено сравнение с методом трехмерной анемометрии слежения за частицами, основанным на триангуляции и синтетических данных. Точность нахождения координат частиц превысила в 10 раз метод трехмерной анемометрии. Было оценено количество частиц, найденных в результате работы алгоритма. На основе этих сравнений алгоритм показал себя лучше, обнаружив на 5 % частиц больше.

Помимо этого, было проведено сравнение с методом томографической цифровой трассерной визуализации, получающим пространственное изображение частиц, а затем с помощью кросс-корреляции строящим поле скорости, при обработке данных с реального эксперимента. Алгоритм восстановления частиц, реализованный в данной работе, показал себя значительно лучше, обнаружив уже на первых 4 кадрах на 20 % процентов больше частиц, чем метод томографической цифровой трассерной визуализации. Для остальных кадров — больше на 10 %.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук В. М. Дулин

УДК 535.36; 551.501.776

Интерпретация результатов лазерного поляризационного зондирования конденсационных следов самолетов с применением реанализа ERA5

О. Ю. Локтюшин

Томский государственный университет

Влияние облаков верхнего яруса (ОВЯ) на формирование климата общепризнано. Вместе с тем в существующих моделях атмосферы особенности микроструктуры таких облаков не учитываются [1]. Конденсационные следы самолетов являются ОВЯ антропогенного происхождения. Как и естественные, они состоят в основном из ледяных частиц несферической формы.

Важной особенностью ОВЯ является возможность ледяных частиц иметь в них преимущественно горизонтальную ориентацию. Контактными средствами определить ориентацию частиц в облаках невозможно из-за ее нарушения при заборе проб воздуха. Однако оценить этот и другие параметры микроструктуры можно, анализируя изменение поляризации оптического излучения при взаимодействии с исследуемой средой. Эта идея реализована в поляризационном лидаре ТГУ.

Оценка метеорологических условий на высотах исследуемых ОВЯ требует анализа вертикальных профилей метеовеличин. Ранее для этого использовались данные аэрологического зондирования. Ближайшие к Томску аэрологические станции расположены на удалении около 250 км; измерения на них выполняются дважды в сутки. В поисках источника метеоданных с более высоким пространственно-временным разрешением анализировались данные реанализа ERA5 Европейского центра среднесрочных прогнозов погоды (ECMWF) [2]. Выполнялось сопоставление вертикальных профилей ряда метеовеличин, полученных на основе расширенного массива данных аэрологических измерений и реанализа. В докладе представлены оценки применимости данных ERA5 для интерпретации результатов лидарных экспериментов и приведены ее примеры на основе использования метеорологических данных из обоих источников.

1. Дмитриева-Арраго Л. Р., Трубина М. А., Толстых М. А. Роль фазового состава облаков в формировании потоков коротковолновой и длинноволновой радиации // Тр. Гидрометцентра России. 2017. № 363. С. 19–34.

2. Локтюшин О. Ю., Брюханов И. Д., Ни Е. В. и др. Сравнение метеовеличин по данным аэрологических измерений и реанализа ERA5 для интерпретации данных лидарного зондирования // Актуальные проблемы радиофизики: IX Междунар. науч.-практ. конф. (г. Томск, 20–22 октября 2021 г.). Томск: Изд. дом ТГУ, 2021. С. 180–184.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. И. В. Самохвалов

УДК 629.7.017

Численное моделирование процесса обледенения в программном пакете FlowVision на примере крыла NACA0012 и цилиндра

Д. С. Нестерок

Новосибирский государственный университет
Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск

Обледенение летательных аппаратов — опасное явление, приводящее к изменению аэродинамических характеристик самолета, а также к блокированию рулевых механизмов и потере управляемости, особенно в режиме посадки [1]. Интенсивность образования и форма льда на поверхностях тел значительно зависят от параметров набегающего потока (скорость, температура, объемное содержание частиц воды, их размер и т. д.), а также от материала и формы обтекаемого тела. Предсказание и создание средств предотвращения обледенения являются сложной задачей, обладающей как фундаментальным, так и прикладным значением.

Для получения новых фундаментальных результатов и создания прикладных методов предсказания обледенения и борьбы с ним необходимы систематические совместные экспериментальные и численные исследования. В Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН создается новый экспериментальный комплекс для изучения процессов обледенения — климатическая аэродинамическая труба с возможностью установления температуры потока и контролируемого обводнения потока. Для дополнения экспериментальных данных необходимо проведение сопровождающих расчетов для условий потока, реализуемого в аэродинамической трубе.

В данной работе представляются результаты численного моделирования обледенения с помощью программного комплекса FlowVision. Освоен численный метод моделирования процесса обледенения и выполнены верификационные расчеты. Проведено сравнение с литературными данными [2]. Получены данные по образованию ледяного нароста на примере крыла NACA0012 и цилиндра для параметров потока, характерных для создаваемой в ИТПМ СО РАН установки.

1. Богатырев В. В. Исследование влияния обледенения на аэродинамические характеристики самолета в режиме посадки // Уч. зап. ЦАГИ. 2014. Т. XLV, № 4. С. 37–47.
2. Сорокин К. Э. и др. Численное моделирование обледенения в программном комплексе FlowVision // Компьютерные исследования и моделирование. 2020. Т. 12, № 1. С. 83–96.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. Н. Семенов

УДК 778+534.2

Определение параметров пылевого облака из вольфрама методами СИ и PDV

К. В. Новоселов

Новосибирский государственный университет

Исследования воздействия ударно-волнового нагружения на различные материалы выявили эффект, известный как пыление. Суть этого эффекта заключается в образовании потока (облака) из микро- и наночастиц при выходе сильной ударной волны на свободную поверхность. При взаимодействии волны разрежения с шероховатостями поверхности материала развиваются неустойчивости, приводящие к формированию микроструй, распадающихся в пылевой поток. Экспериментальные исследования разреженного скоростного пылевого потока представляют собой сложную научно-техническую проблему.

В работе представлены результаты экспериментального исследования пылевого потока из вольфрамовых микрочастиц, ускоренных ударной волной. С использованием методики синхротронного излучения были измерены распределения интенсивности рентгеновской тени от облака частиц. Проведена калибровка и по полученным данным был произведен расчет распределения массы вольфрамовой пыли. Одновременно в экспериментах методом PDV измерялись скорость облака микрочастиц и скорость танталовой фольги в методе индикаторных фольг. По измеренной скорости фольги было измерено распределение массы налетающего пылевого облака. Приведены отличия в полученных данных.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук К. А. Тен

УДК 532.5.032

Активное управление нестационарным закрученным потоком в модели гидротурбины Френсиса

Д. А. Суслов

Новосибирский государственный университет
Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Регулирование режимов работы гидротурбины, исходя из объема необходимой энергии, приводит к работе в неоптимальных или нерасчетных режимах. В таких режимах поток, сходящий с кромок рабочего колеса турбины Френсиса, имеет большую остаточную закрутку и чрезвычайно восприимчив к возмущениям [1]. В этих условиях в потоке возникают когерентные вихревые структуры, которые сложным образом взаимодействуют со всей гидравлической системой и вызывают мощные пульсации давления, значительный шум, нежелательные вибрации, которые впоследствии оказывают влияние на кавитационную эрозию и усталость металла [2]. В этой связи актуальна задача по управлению такими вихревыми явлениями.

В работе приведены результаты экспериментальных исследований по подавлению амплитуды прецессирующего вихревого ядра, основанные на использовании аксиальной струи воздуха постоянного расхода, подаваемой через центр тела обтекания рабочего колеса. Измерения пульсаций давления проведены акустическими датчиками, установленными в количестве четырех штук заподлицо со стенками отсасывающей трубы гидротурбины, с целью получить информацию о частоте и амплитуде возникающих пульсаций давления, вызванных вихревыми структурами. Обработка сигналов пульсаций давления осуществлена путем анализа периодограмм Уэлча и Ломба. Получено, что расположение вдуваемой струи, а также углы подачи значительно влияют на эффективность подавления ПВЯ. Увеличение управляющего расхода немонотонно влияет на эффективность подавления вихревых структур. В зависимости от типа создаваемой струи оптимальный расход подавления вихревых структур оказывается различен.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ МК-1504.2021.4.

1. Escudier M. Confined Vortices in Flow Machinery // Annu. Rev. Fluid Mech. 1987. Vol. 19, № 1. P. 27–52.
2. Trivedi C., Cervantes M. J. Fluid-structure interactions in Francis turbines: A perspective review // Renewable Sustainable Energy Reviews. 2017. Vol. 68. P. 87–101.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук И. В. Литвинов

УДК 532.529.5

Экспериментальное исследование высокоскоростного взаимодействия метаемых микрочастиц с преградой

Р. Е. Тюстин

Новосибирский государственный университет

Модификация поверхности твердых материалов с помощью высокоскоростного потока микрочастиц является актуальной задачей, решение которой позволит получить новые свойства рабочих поверхностей. Одним из перспективных способов ускорения микрочастиц является использование рельсового ускорителя масс, имеющего ряд преимуществ перед методами детонационного и холодного газодинамического напыления.

В работе исследовалось высокоскоростное взаимодействие роя микрочастиц со преградой из инструментальной стали. В момент разгона частицы были заключены в диэлектрический контейнер, движение которого прерывалось с помощью отсекателя, после чего движение микропорошка в сторону мишени происходило по инерции. Мишень располагалась на расстоянии 10 мм от выходного отверстия отсекателя.

Во время эксперимента происходила регистрация электрических параметров работы рельсотрона с помощью трансформаторов тока, цифровых осциллографов и картины взаимодействия ускоряемых микрочастиц с преградой. Съемка движения микрочастиц производилась на фоне мощной подсветки с использованием камеры Photron SA-Z. Скорость порошка определялась с помощью программы обработки, написанной в Matlab.

На кадрах видеосъемки было обнаружено, что процесс движения двухфазного высокоскоростного потока, состоящего из воздуха и микрочастиц, сопровождался образованием ударной волны и ее отражением от поверхности мишени. Структура потока микрочастиц претерпевала изменения при их пролете через ударную волну, что выражалось в концентрации частиц вдоль видимой границы, двигающейся навстречу потоку. Отсюда можно сделать вывод о влиянии газодинамических эффектов на процесс ускорения частиц до их соударения с мишенью. В результате столкновения микропорошка с мишенью образовывался кратер околоцилиндрической формы, при этом диаметр кратера оставался практически неизменным для различных скоростей и видов микрочастиц. Были измерены объемы вытесненного металла мишени и построены графики их зависимости от скоростей микрочастиц. Показано, что форма кратера и зависимость его глубины от скорости взаимодействия значительно отличаются от случаев взаимодействия макроударников с преградами.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. А. Ядренкин

УДК 533.1

Исследование влияния температуры на коэффициент проницаемости материала стенки кремнеземных микросфер

М. В. Фролов

Новосибирский государственный университет

Разработка эффективных методов по выделению гелия из природного газа является актуальной, так как гелий — важный элемент многих отраслей, а его доля в природном газе составляет порядка 0,2–0,7 % от общего объема. Сотрудниками Института теоретической и прикладной механики СО РАН была предложена уникальная мембранно-сорбционная технология, особенностью которой является использование полых синтетических стеклянных микросфер в качестве мембран. Стенки данных микросфер обладают высокой селективной проницаемостью по отношению к гелию и остаются практически непроницаемыми для метана и остальных компонентов природного газа. Из физических свойств микросфер, важных для извлечения гелия, можно выделить сферическую форму частиц, низкую насыпную плотность, термостабильность, химическую инертность и высокую гидростатическую прочность. Гелий способен диффундировать внутрь микросферы, так как некоторые стекла обладают селективной проницаемостью.

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию влияния температуры на коэффициент проницаемости материала стенки кремнеземных микросфер. В качестве сорбентов использовались кремнеземные микросферы, химический состав которых содержит SiO_2 > 80 % и малое количество примесей, их размеры составили 12–240 мкм, а насыпная плотность — 0,2 г/м^3. Измерения проводились в диапазоне температур 20,8–110 °C.

Расчет проницаемости по отношению к гелию основан на зависимости падения давления гелия в адсорбере от времени. В результате расчета параметров, характеризующих падение давления, были получены зависимости коэффициентов проницаемости от температуры и энергия активация.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. С. Верещагин

УДК 533.6.011

Исследование ветрового комфорта в пешеходной зоне

П. Д. Шульженко

Сибирский федеральный университет, Красноярск

Ветровая комфортность пешеходной зоны в реалиях современной застройки становится с каждым днем все более и более актуальной. Способствует этому два фактора: экологическая ситуация в крупных городах и некорректная планировка зданий при застройке микрорайонов. Плохая экология и специфическое расположение зданий в микрорайоне могут привести к формированию потенциально опасных зон, в которых будет высокая концентрация загрязняющих веществ вследствии плохой экологии и низкая продуваемость из-за сформированных зон застоя. Все это становится причиной растущей популярности оценки комфортности пешеходной зоны. Чтобы дать какую-либо оценку, необходимо изучить аэродинамическую обстановку в исследуемом районе.

Цель научного исследования — определение характерных зон, образуемых в результате обтекания потоком воздуха близко расположенных двух моделей, имитирующих здания разной высоты и длины с плоской кровлей. В ходе проделанного модельного эксперимента в аэродинамической трубе на базе СФУ были изучены несколько потенциально возможных расположений зданий и получены наглядные данные в виде фото- и видеоматериалов. Параллельно физическому эксперименту были произведены расчеты с использованием программного обеспечения SigmaFlow. Результатами численного моделирования стали карты движения воздушных масс с детальным описанием скорости и направления ветрового потока, а также образовавшиеся зоны. Численный эксперимент был верифицирован физическим экспериментом и позволил получить более детальную информацию об аэродинамической обстановке.

Исходя из полученных данных об аэродинамических особенностях исследуемых объектов, можно сделать выводы о потенциальной ветровой комфортности, при необходимости могут быть даны указания по ее улучшению. В перспективе такие исследования могут стать одними из базовых при проектировании микрорайона для застройки.

Научный руководитель — канд. техн. наук А. А. Дектерев

УДК 533.6.011

Численное моделирование газодинамики струй азота в сильно разреженном пространстве

Л. В. Ярков

Новосибирский государственный университет
Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск

Данная работа посвящена численному моделированию истечения струй молекулярного азота (N_2) из форкамеры, в которой параметры газа (температура, давление) удерживаются постоянными, через сопло в разреженное пространство или вакуум. Численное моделирование такого процесса сопряжено с изрядными трудностями, возникающими из-за нарушения гипотезы сплошной среды и гипотезы локального равновесия.

Для решения задачи использовался гибридный подход, который заключался в объединении континуального (численное решение уравнений Навье — Стокса с помощью программы ANSYS Fluent) и кинетического подходов (прямое статистическое моделирование Монте-Карло с помощью программного комплекса SMILE).

Выбранный подход позволял учесть нарушение гипотезы сплошной среды и температурную неравновесность, при которой поступательная температура газа отличается от вращательной.

Была проведена верификация используемого подхода через сравнение результатов численных расчетов с данными, полученными на основании приближенных аналитических моделей.

Сравнение расчетных данных с экспериментальными, полученными сотрудниками лаборатории молекулярной кинетики отдела прикладной физики ФФ НГУ [1] на экспериментальном стенде ЛЭМПУС-2 [2], показало, что с учетом общей погрешности экспериментальных измерений предсказание численной модели хорошо совпадает с экспериментальными данными.

1. Лаборатория молекулярной кинетики ОПФ ФФ НГУ. URL: http://www.opf.nsu.ru/ru/content/лаборатория-молекулярной-кинетики/ (дата обращения: 17.02.2022).
2. Универсальный газодинамический вакуумный стенд ЛЭМПУС-2. URL: http://www.opf.nsu.ru/ru/content/Lempus-2/ (дата обращения: 17.02.2022).

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. В. Зайцев

ФОТОНИКА И КВАНТОВЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Научные руководители секции
акад. РАН *С. Н. Багаев*
акад. РАН *А. М. Шалагин*

Председатель секции — д-р физ.-мат. наук, доц. *С. М. Кобцев*

Ответственный секретарь секции — канд. физ.-мат. наук *А. В. Иваненко*

Экспертный совет секции:
д-р физ.-мат. наук, проф. *Е. В. Бакланов*, д-р техн. наук *В. П. Корольков*, канд. физ.-мат. наук, доц. *Б. Н. Нюшков*, чл.-корр. РАН *И. И. Рябцев*, чл.-корр. РАН, проф. *М. П. Федорук*, д-р физ.-мат. наук, проф. *П. Л. Чаповский*, д-р физ.-мат. наук *Д. В. Чуркин*

PHOTONICS AND QUANTUM OPTICAL TECHNOLOGIES

Section scientific supervisors
Acad. RAS *S. N. Bagaev*
Acad. RAS *A. M. Shalagin*

Section head — Dr Phys.-Math. Sci., Assoc. Prof. *S. M. Kobtsev*

Responsible secretary — Cand. Phys.-Math. Sci. *A. V. Ivanenko*

Section scientific committee:
Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *E. V. Baklanov*, Dr Eng. Sci. *V. P. Korolkov*, Cand. Phys.-Math. Sci., Assoc. Prof. *B. N. Nyushkov*, Corr. Member RAS *I. I. Ryabtsev*, Acad. RAS, Prof. *M. P. Fedoruk*, Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *P. L. Chapovsky*, Dr Phys.-Math. Sci. *D. V. Churkin*

УДК 535.3, 535-4

Влияние формы оптических поверхностей линз и зеркал на распределение энергетических и поляризационных характеристик прошедшего пучка излучения по его сечению

А. А. Андрикович

Томский государственный университет

Основными элементами любой оптической системы являются линзы и зеркала, формы которых могут быть сферическими или асферическими. Асферические оптические поверхности в основном используются для улучшения качества изображения (коррекция аберраций). Линзы и зеркала с такими оптическими поверхностями находят применение в разнообразных оптических приборах, в том числе в передающих и приемных оптических системах, используемых для дистанционного лазерного зондирования атмосферы (лидары).

В некоторых задачах дистанционного лазерного зондирования [1] важно знать распределения энергетических и поляризационных характеристик регистрируемого пучка излучения по его сечению. Такие характеристики могут претерпевать некоторую трансформацию на элементах оптической системы. В лидарных исследованиях эта трансформация может влиять на корректность интерпретации результатов лазерного зондирования.

Анализ трансформации энергетических и поляризационных характеристик излучения в оптической системе удобно проводить с помощью численного моделирования. Существующие коммерчески доступные программные продукты позволяют проводить такой анализ для случаев распространения излучения с равномерным распределением характеристик по сечению пучка. В Томском государственном университете разработана программа, в которой возможно моделирование излучения с неравномерным распределением характеристик по сечению пучка. Алгоритм программы основан на методе матриц Мюллера [2] и трассировке излучения по алгоритму Федера [3].

В докладе обсуждаются результаты численного моделирования распространения поляризованного излучения через оптические поверхности разных асферических форм. Основное внимание уделяется распределению энергетических и поляризационных характеристик прошедшего излучения по сечению пучка.

1. Самохвалов И. В., Брюханова В. В., Дорошкевич А. А. и др. Коаксиальный лидар многократного рассеяния: распределение степени поляризации излучения в плоскости регистрации // Изв. вузов. Физика. 2012. Т. 55, № 9/2. С. 141–142.
2. Шерклифф У. Поляризованный свет. М.: Мир, 1965. 264 с.
3. Михельсон Н. Н. Оптика астрономических телескопов и методы ее расчета. М.: Физ.-мат. лит-ра, 1995. 383 с.

Научный руководитель — А. А. Дорошкевич

УДК 001.8

Стандарт частоты на основе эффекта КПН в ячейке с парами Rb87

И. Н. Асхадуллин

Новосибирский государственный технический университет

Стандарты частоты широко применяются в метрологии, локации, геофизике, связи и т. д. В таких задачах требуется использование высокостабильных стандартов частоты, при создании которых на первый план выходит проблема получения узкого резонанса с большой амплитудой: чем выше отношение амплитуды к ширине, тем более высокая стабильность может быть достигнута.

КПН — возникновение в многоуровневой квантовой системе в результате взаимодействия с лазерным излучением суперпозиционного состояния, не взаимодействующего с этим излучением, что приводит к очень узкому провалу в спектре поглощения [1].

Параметры и характеристики лазерного излучения не остаются строго постоянными во времени. Флуктуация параметров работы лазера определяет нестабильность стандарта частоты. Различают долговременную и кратковременную стабильность. На долговременную влияют следующие факторы: сдвиги от давления и температуры ячейки с буферным газом, сдвиг частоты в магнитном поле, сдвиг от изменения тока и температуры диодного лазера [2]. Кратковременная зависит от шумов на рабочей частоте, которые определяются амплитудными и частотными шумами диодного лазера и шумами фотоприемника.

Цель работы — показать метод стабилизации частоты излучения диодного лазера, используя эффект КПН в ячейке с парами Rb87 и оценить его эффективность.

В результате работы была собрана оптическая схема эксперимента и измерена долговременная стабильность частоты за 1000 с, она равна $5 \cdot 10^{-13}$. Для оценки возможности повышения этого показателя получены зависимости оптической частоты лазера от температуры и тока, а при помощи фотоприемника снята вольт-амперная характеристика диодного лазера, а также относительный сдвиг частоты КПН резонанса от изменения тока и уровня модуляции СВЧ.

1. Agap'Ev B. D. et al. Coherent population trapping in quantum systems // Phys.-Uspekhi. 1993. Т. 36, № 9. С. 763.

2. Баранов А. А. и др. Световые сдвиги частоты радиооптического резонанса в парах рубидия при селективной оптической накачке // Науч.-техн. вед. СПГПУ. Физ.-мат. науки. 2012. № 1 (141).

Научный руководитель — Н. Л. Квашнин

УДК 535.4

Исследование методов структурирования импульсного лазерного излучения и его свойств

Н. В. Бочкарев

Новосибирский государственный университет

Структурирование света — процесс трансформирования излучения с известными параметрами в излучение с желаемыми нетривиальными распределениями поля и фазы с помощью задания специальной функции пропускания. Структурирование световых полей сложной амплитуды применяется для создания бездифракционных бесселевских и вихревых пучков, в квантовой оптике. Функция пропускания при таком подходе должна преобразовывать и амплитуду, и фазу излучения. В настоящее время множество преобразований можно выполнить и с чисто фазовой модуляцией с использованием современных математических методов благодаря пространственным модуляторам света. На таких устройствах относительно просто создать цифровые голограммы, которые реализуют общую комплексную амплитудную модуляцию для создания произвольных полей. В подобных экспериментах важно обеспечить максимально возможную дифракционную эффективность, а также проконтролировать, что воздействие модулятора не меняет свойств излучения кардинальным образом.

Цель данной работы — исследование методов структурирования импульсного лазерного излучения. Для этой цели собрана экспериментальная установка, включающая пространственный модулятор света, автокоррелятор и измеритель мощности. Планируется провести эксперименты по измерению дифракционной эффективности, пространственных и временных свойств структурированного излучения.

Научный руководитель — М. Д. Гервазиев

УДК 535.4

Автокорреляционные измерения излучения фемтосекундного титан-сапфирового лазера

В. Е. Бояркина, С. В. Рева

Новосибирский государственный университет

Цель работы — определение предельного временного разрешения оптической схемы, которая в дальнейшем будет использована для исследования временных и спектральных характеристик излучения Новосибирского лазера на свободных электронах. Схема является аналогом классического двухщелевого интерферометра Юнга. Однако рассчитана на измерение временных характеристик исследуемого излучения. Импульсы субпикосекундной длительности титан-сапфирового лазера исследуются методом деления волнового фронта, а также при помощи стандартного автокоррелятора на нелинейном кристалле. Сравнение данных, полученных двумя независимыми методиками, даст возможность оценить применимость первой из них в средней инфракрасной области, где лежит спектр излучения НовоЛСЭ.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. О. И. Мешков

УДК 621.37

Методика контроля ключевых характеристик электрооптического модулятора лазерного излучения на основе высокоомного кристалла KTP

А. А. Глуцкая

Новосибирский государственный технический университет
Институт лазерной физики СО РАН, Новосибирск

Благодаря своим высоким электрооптическим и нелинейно-оптическим свойствам кристалл титанил-фосфата калия нашел широкое применение в лазерной технике. Электрооптическая модуляция добротности основана на вращении поляризованного света за счет электрооптических эффектов и преобладает в кристаллах без центра симметрии. Кристалл KTP представляет собой оптически двуосный кристалл, относится к ромбической сингонии и точечной группе mm2.

Настоящая работа посвящена разработке методики контроля характеристик модулятора на основе кристалла KTP. В ходе работы была собрана схема для измерения контраста уже готового образца электрооптического модулятора, состоящего из двух высокоомных кристаллов KTP размерами 4 × 4 × 10 мм. Использование двух кристаллов, повернутых друг относительно друга на 90° по оси *z*, необходимо для тепловой компенсации.

Первичное измерение проводилось без включения в схему модулятора. Использовались импульсное лазерное излучение длиной волны 1064 нм и длительностью импульсов 200 мкс и клинья из исландского шпата. Исходный пучок лазерного излучения после прохождения первого клина разделялся на слабый (вертикальная поляризация) и сильный (основная генерируемая линейная поляризация) сигналы. В дальнейшем использовался только сильный сигнал. За величину контраста K было принято отношение сильного сигнала к слабому. Измеренный контраст схемы составил 10 000. На втором этапе измерения в схему устанавливался модулятор и регистрировалось два значения контраста: при отсутствии поля и с подачей полуволнового напряжения. Измерения были произведены в нескольких точках в плоскости апертуры модулятора, размер диаметра пучка ~ 1 мм. Замечено, что при внесении температурного дисбаланса (например, нагревая один кристалл) значение параметра контраста значительно падает.

Полученные измерения показали значительное изменение параметра контраста в зависимости от расположения пучка на апертурах модулятора и сильную зависимость от настройки по углу, максимальный контраст при подаче полуволнового напряжения отличается от максимального контраста при отсутствии поля.

Научный руководитель — Д. С. Бордзиловский

УДК 535.42

Аналитическая модель дифракции света на многослойных неоднородных голографических дифракционных структурах в фотополимерных материалах

В. О. Долгирев, Д. С. Растрыгин, В. Г. Иванченко

Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники

В настоящее время различными коллективами исследователей изучаются свойства многослойных неоднородных голографических дифракционных структур (МНГДС). МНГДС представляют собой несколько объемных решеток, разделенных оптически однородными промежуточными слоями [1, 2]. Такие структуры характеризуются особыми свойствами, обусловленными интерференцией волн из каждой решетки.

МНГДС имеют перспективу найти широкое применение в качестве элементов спектральных фильтров, сенсоров, межсоединений, мультиплексоров/демультиплексоров в оптических линиях связи, а также для генерации фемтосекундных лазерных импульсов [1].

Так, в работе [1] исследованы дифракционные характеристики МНГДС на основе фотополимерного материала (ФПМ) и установлено, что селективный отклик может искажаться вследствие неоднородности профиля решеток по глубине голограмм. В работе [2] продемонстрирована возможность динамического управления селективным откликом МНГДС, сформированных в ФПМ с жидкими кристаллами, с помощью воздействия внешнего электрического поля.

Однако данные исследования проводились для одиночных МНГДС. Актуальной задачей является уширение селективного отклика таких структур. Это позволит улучшить функционал с точки зрения увеличения количества спектральных каналов. Формирование наложенных МНГДС может являться одним из решения данной задачи.

В данной работе мы представляем аналитическую модель дифракции света на наложенных многослойных неоднородных голографических дифракционных структурах в фотополимерном материале, которая учитывает неоднородность по глубине слоев.

1. Пен Е. Ф., Родионов М. Ю. Свойства многослойных неоднородных голографических структур // Квантовая электроника. 2010. Т. 40, № 10. С. 919–924.
2. Dolgirev V. O., Sharangovich S. N. Diffraction of Light on Inhomogeneous Multilayer Holographic Diffraction Structures in Photopolymer Liquid Crystal Compositions // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2022. Vol. 86. P. 18–23.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, проф. С. Н. Шарангович

УДК 535.42

Аналитическая модель формирования наложенных многослойных неоднородных голографических дифракционных структур в фотополимерных материалах

В. О. Долгирев, В. Г. Иванченко, Д. С. Растрыгин

Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники

Многослойные неоднородные голографические дифракционные структуры (МНГДС) вызывают интерес у исследователей своими уникальными свойствами, обусловленными интерференцией волн, восстановленной из каждой решетки. Селективный отклик таких структур представляет из себя набор локальных максимумов, где общий контур селективности соответствует одиночной голограмме. И если варьировать размеры толщин дифракционных и буферных слоев, а также их количество, можно добиться различных селективных свойств дифракционного оптического элемента. Такие структуры возможно применить в оптических устройствах связи, например в оптических делителях, межсоединениях, сенсорах, спектральных фильтрах.

МНГДС исследовались рядом ученых. Так, в работе [1] показано, что при формировании МНГДС в фотополимерном материале (ФПМ) фотоиндуцированное поглощение материала существенно влияет на вид формируемого профиля решеток и, соответственно, на дифракционные характеристики. В работе [2] подобные структуры исследовались на основе ФПМ с жидкими кристаллами (ЖК). Наличие ЖК позволяет управлять дифракционными характеристиками МНГДС с помощью приложенного электрического поля.

На сегодняшний день остается актуальной задача расширения селективного отклика таких структур, при котором возрастет число спектральных каналов, если рассматривать данные структуры в качества фильтров. Формирование наложенных МНГДС может быть одним из решений.

В данной работе мы представляем аналитическую модель для голографического формирования наложенных многослойных неоднородных голографических дифракционных структур в фотополимерном материале, которая учитывает влияние фотоиндуцированного оптического поглощения.

1. Dudnik D. I., Sharangovich S. N., Semkin A. O. Diffraction of quasimonochromatic light beams on multilayer inhomogeneous photopolymer holographic diffraction structures // J. Phys: Conf. Ser. 2021. Vol. 1745. P. 012018.

2. Dolgirev V. O., Sharangovich S. N. Diffraction of Light on Inhomogeneous Multilayer Holographic Diffraction Structures in Photopolymer Liquid Crystal Compositions // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys., 2022. Vol. 86. P. 18–23.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, проф. С. Н. Шарангович

УДК 535.217

Исследование фотоиндуцированной генерации оксида азота (NO)

Е. О. Жермоленко

Новосибирский государственный университет

Монооксид азота (NO) является одним из ключевых посредников в организме и играет важную роль во множестве биологических процессов: расширении сосудов, передачи нервных импульсов, свертывании крови, увеличении содержания кислорода в крови, а также препятствует образованию тромбов [1]. Оксид азота в организме вырабатывается под действием синтаз, но, как правило, естественной генерации оказывается недостаточно. В таком случае необходимо использовать вещества, обладающие донорной способностью.

Цель работы — создание системы, способной поддерживать постоянную концентрацию оксида азота (NO), с оптическим контролем. Основная идея заключается в том, что при облучении раствора донора светом с длиной волны 660 нм оксид азота будет диссоциировать. Для организации обратной связи и контроля генерации NO планируется использование электрохимического датчика ISO-NOP.

В предварительных экспериментах мы прибегали к использованию флуоресцентной ловушки, при присоединении к которой оксид азота NO способен существовать продолжительное время. Ловушка была отделена от донора мембраной. Необходимость мембраны обусловлена неспособностью работы детектирующего датчика в EtOH, в то время как сам донор нерастворим в воде.

1. Zhilin E. S. et al. Novel Arylazo-1, 2, 5-oxadiazole Photoswitches: Synthesis, Photoisomerization and Nitric Oxide Releasing Properties // ChemPhotoChem. 2020. Т. 4, № 12. С. 5346–5354.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. Е. Москаленский

УДК 621.373.826

Температурная карта активного элемента мощного лазерного усилителя

А. О. Коновалова

Институт лазерной физики СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В настоящее время значительные усилия в лазерной физике направлены на получение лазерного излучения с высокой пиковой мощностью и высокой частотой повторения импульсов. В ИЛФ СО РАН разрабатывается лазерная система с активными элементами, допированными ионами Yb^{3+}, с частотой повторения импульсов 1 кГц. Для достижения высокой мощности используется криогенно-охлаждаемый мультидисковый многопроходный усилитель с диодной накачкой с общей средней мощностью до 1,6 кВт [1]. Так как тепловой контакт между активными элементами и теплоотводом в общем случае неидеален, необходимо исследовать распределение температуры в активных элементах для оценки качества теплового контакта.

Данная работа посвящена исследованию двумерного распределения температуры в активных элементах мощного криогенно-охлаждаемого лазерного усилителя. Метод основан на зависимости коэффициента пропускания излучения на длине волны 1030 нм в Yb : YAG от температуры [2].

Исследована зависимость коэффициента пропускания от температуры. Получена температурная карта активного элемента лазерного усилителя для диаметров накачки 2 и 4 мм и частоты повторения 500 и 1000 Гц. Проведенное исследование показало, что тепловой контакт между активным элементом и теплоотводом неравномерен. Полученные результаты будут использоваться для оптимизации системы охлаждения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-02-00529-а.

1. Купцов Г. В., Петров В. А., Петров В. В. и др. Лазерное усиление в активном зеркале из Yb : YAG с большим градиентом температур // Квантовая электроника. 2021. Т. 51, № 8. С. 679–682.
2. Петров В. В., Купцов Г. В., Ноздрина А. И. и др. Бесконтактный метод исследования температуры в активном элементе мультидискового криогенного усилителя // Квантовая электроника. 2019. Т. 49, № 4. С. 358–361.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. В. Петров

УДК 550.348:53.05

К вопросу о чувствительности демонстрационной модели маятника Цельнера

И. Д. Кравцов, Д. А. Лузянин

Томский государственный университет

Работа посвящена изучению чувствительности лазерного датчика смещения демонстрационного маятника Цельнера, фиксирующего воздействия Солнца и Луны на земную поверхность. Закрепленный в земной коре маятник Цельнера при движении тектонических плит совершает колебания, для наблюдения которых используется лазер, установленный в горизонтальном стержне маятника. Цель работы — роботизация маятника Цельнера с помощью современных технологий. В горизонтальном стержне расположен полупроводниковый лазер. Луч лазера направлен на черный непрозрачный экран, на котором отображается изображение пятна лазера. Фотокамера OV7670 регистрирует смещения лазерного пятна.

Угловая расходимость пучка лазера может быть вычислена по формуле [1]

$$\theta = 1,22 * \lambda / d, \quad (1)$$

где θ — угловая расходимость, λ — длина волны лазера, d — диаметр апертуры лазера.

Применяя соотношение (1), можно найти угловую расходимость пучка лазера.

Таким образом, проведены расчет угла расходимости пучка и измерения диаметра пятна излучения лазера на расстояниях от 10 до 160 см. Из расчетов следует, что угол расходимости лазера 2,865″. Линейный диаметр светового пятна D [2] можно рассчитать по формуле

$$D = d + \tan\theta * L, \quad (2)$$

где d — диаметр апертуры лазера, L — расстояние от лазера до экрана.

При расстоянии до 90 см от лазера до экрана высшие типы колебаний не проявляются. Угловая расходимость пучка лазера θ, полученная по результатам измерений диаметра пятна лазера на черном экране, составила 15,7″.

В результате проведенных измерений были найдены значения расходимости пучка полупроводникового лазера. Измеренные значения расходимости пучка значительно превышают рассчитанные для идеальной модели, но достаточны для фиксации малых отклонений маятника Цельнера. Определено оптимальное расположение непрозрачного темного экрана от полупроводникового лазера.

1. Райцин А. М., Улановский М. В. Установка для калибровки/поверки и способ калибровки средств измерений угла расходимости лазерного пучка. 2019.
2. Гунько А. А. и др. Лазерный индикатор малого смещения для роботизации маятника Цельнера: дипломная работа (проект) специалиста по направлению подготовки: 11.05.01 Радиоэлектронные системы и комплексы. 2020.

Научный руководитель — д-р техн. наук, проф. Г. Е. Дунаевский

УДК 621.373.826

Оптимизация характеристик когерентного оптического частотного рефлектометра на основе волоконного лазера с самосканированием частоты

Д. А. Кривошеина

Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный технический университет

Когерентная оптическая частотная рефлектометрия (КОЧР) является ключевой технологией как для диагностики оптических схем, так и для решения задач распределенных сенсорных измерений, где необходимо разрешение до субмиллиметровых масштабов. Принцип работы КОЧР основан на анализе сигнала интерференции между исходным сигналом и рассеянным в волоконной линии при частотном сканировании зондирующего излучения перестраиваемого лазера. Полученный при сканировании частоты сигнал содержит информацию о точном положении и величине отражающих событий по длине волоконной сенсорной линии и может быть получен с помощью Фурье-анализа. В работе в качестве перестраиваемого источника используется самосканирующий волоконный лазер. В данном типе лазеров перестройка длины волны генерации происходит без использования активных перестраиваемых элементов, а также достигается строгая дискретность перестройки частоты генерации. Ранее были определены основные параметры КОЧР: максимальная длина волоконной линии (8,7 м), пространственное разрешение (0,2 мм) и чувствительность к коэффициенту отражения (–79 дБ). Полученные значения чувствительности меньше, чем уровень сигнала, формируемый в результате рассеяния Рэлея. Однако возможность измерения отражений от неоднородностей в обычном волокне позволила использовать КОЧР для сенсорных задач. По этой причине была поставлена задача по возможности улучшения чувствительности.

Чувствительность рефлектометра зависит от соотношения мощностей интерферирующих сигналов в интерферометре. По этой причине параметром оптимизации являлся коэффициент ветвления выходного ответвителя интерферометра (50/50 и 98/2 %). В частности, чувствительность системы была увеличена до 95,75 % для случая использования 2 % порта в схеме с ответвителем 98/2 %.

Научный руководитель — А. Ю. Ткаченко

УДК 535.131

Использование взвешенной дискретизации в методе дискретных диполей

А. А. Манина

Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Метод дискретных диполей (МДД) широко применяется для моделирования светорассеяния объектами различных размеров, форм и оптических свойств. Изучаемая частица или группа частиц разделяются на кубики (или прямоугольные параллелепипеды, называемыми диполями), электрическое поле в каждом из которых принимается постоянным. Система из $3N$ линейных уравнений, где N — число диполей, решается численными методами, после чего можно получить рассеянное поле, сечения рассеяния, поглощения и экстинкции.

Существует несколько методов, при помощи которых можно улучшить точность вычислений. Увеличение количества диполей N закономерно приводит к большим затратам времени, поэтому существует потребность в создании и реализации алгоритмов, улучшающих точность МДД без больших дополнительных затрат вычислительных ресурсов. Одним из таких алгоритмов является взвешенная дискретизация, позволяющая уменьшить ошибку дискретизации путем вычисления эффективных параметров граничных диполей (показателя преломления или поляризуемости). На данный момент времени алгоритм не реализован ни в одной из доступных программ на основе МДД, поэтому задача данной работы — реализация алгоритма взвешенной дискретизации в открытом ПО ADDA.

В данной работе проведена адаптация алгоритма, написанного для ранней версии ADDA в новой версии, произведено сравнение результатов вычислений оптических свойств для шаров с различными показателями преломления и разным числом диполей. Использование шаров позволяет сравнивать полученные значения с точными решениями на основе аналитической теории Лоренца — Ми, что, в свою очередь, дает однозначную оценку точности произведенных вычислений. Исследование точности полученного алгоритма и другие результаты будут продемонстрированы на конференции.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин

УДК 535.37

Регенерация лактонной формы Родамина С в протоноакцепторных растворителях

М. Миров

Самаркандский государственный университет, Узбекистан

Родаминовые красители широко применяются в различных областях науки и техники и являются очень удобными модельными системами при изучении ряда фотофизических и фотохимических процессов [1]. Известно, что родаминовые красители с карбоксильными группами в протоноакцепторных растворителях (ПАР) (диметилформамид (ДМФА), диметилсульфоксид, пиридин, хинолин) обесцвечиваются и переходят в форму лактона [2]. Цель работы — выяснение условий, при которых растворы красителя родамина С (РС), находящиеся в форме лактона, регенерируются. Установлено, что при добавлении воды и протонодонорных растворителей (ПДР), спирта или кислоты, к растворам красителя РС, находящимся в форме лактона, происходит их регенерация. В результате этого обесцвеченные растворы красителя РС становятся окрашенными и восстанавливают поглощательную и люминесцентную способность, которая возрастает пропорционально доли добавляемого ПДР или воды.

Полученные результаты могут найти практическое применение, в частности для определения степени чистоты растворителей и красителя. Для выяснения влияния степени чистоты растворителя на процесс перехода в форму лактона красителя необходимо использовать краситель высокой степени чистоты. Примесями могут служить молекулы воды или следы ПДР. Если ПАР чистый, то при растворении РС в ДМФА при концентрации $C = 10^{-4}$ М раствор становится бесцветным. Наличие окраски раствора свидетельствует о присутствии примесей в составе растворителя и красителя.

Использование этих зависимостей позволяет решить ряд практических задач. В частности, построив график зависимости оптической плотности или интенсивности свечения от доли добавляемой воды или любого другого ПДР к обесцвеченным растворам, его можно использовать для обнаружения следов воды или других ПДР.

1. Bansal P., Kar P. Probing the energy transfer process by controlling the morphology of CH3NH3PbBr3 nanocrystals with rhodamine B dye // J. Luminescence. 2019. Vol. 215. 116609.

2. Низомов Н. Люминесценция ассоциированных молекул органических красителей в растворах и пленках. Самарканд: Зарафшон, 1997. 145 с.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. Н. Низомов

УДК 535.8

Бризеры в сильно возмущенном конденсате

И. И. Мулляджанов

Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск

Нелинейное уравнение Шредингера (НУШ) является моделью распространения нелинейных волн в различных областях физики. Например, НУШ описывает в первом приближении распространение гравитационных волн на поверхности глубокой воды и распространение света в оптоволокне с кубической (керровской) нелинейностью. НУШ можно полностью проинтегрировать (решить) с помощью метода обратной задачи рассеяния, который преобразует волновое поле в так называемые данные рассеяния, представляющие собой нелинейный аналог традиционных Фурье гармоник [1]. В данной работе рассматривается задача о модуляционной неустойчивости постоянного фона (конденсата) в рамках модели фокусирующего НУШ с периодическими граничными условиями. Для такой задачи известны точные решения, которые называются бризерами, см. например [2]. Бризеры представляют собой аналог солитонов в присутствии неустойчивого фона. Мы возмущаем фон длинноволновым шумом разной амплитуды и наблюдаем, как изменение параметров шума влияет на появление бризерных структур в волновом поле. Найдено, что бризеры отсутствуют в слабо возмущенном конденсате и появляются, когда амплитуда шума достигнет определенного значения. Для идентификации бризерных структур мы численно определяем спектр собственных чисел задачи Захарова — Шабата, который является одной из составляющих данных рассеяния. Бризеры представляют собой разрешенные зоны малой ширины на спектральном портрете задачи Захарова — Шабата. Известны теоретические формулы, которые позволяют вычислить скорость распространения бризера на основе его спектрального портрета в пределе бесконечно большого размера периода задачи [2]. Мы решаем НУШ численно с помощью метода Рунге — Кутта 4-го порядка сходимости и строим пространственно-временные диаграммы эволюции волнового поля. Изучение полученных пространственно-временных диаграмм позволило установить, что скорость бризеров в сильно возмущенном конденсате хорошо согласуется с теоретической.

1. Теория солитонов: метод обратной задачи / В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский. М.: Наука, 1980. 319 с.
2. Gelash A. A. Formationof Rogue Waves from a Locally Perturbed Condensate // Phys. Rev. E. 2018. Т. 97, № 2. С. 022208.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. А. Гелаш

УДК 535.2

Запись распределенных случайных отражателей в одномодовых волоконных световодах с помощью фемтосекундных лазерных импульсов

Ж. Э. Мункуева

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск

Наличие вмороженных неоднородностей в сердцевине оптического волокна, состоящего из кварцевого стекла, приводит к слабому обратному рассеянию распространяющихся оптических мод, что нередко используется в распределенных сенсорных системах [1] и волоконных лазерах с распределенной обратной связью [2]. В случае распределенного сенсора низкий уровень обратного рассеяния ограничивает пространственное разрешение и отношение сигнал/шум измерительной системы, в случае волоконных лазеров с распределенной обратной связью вынуждает использовать относительно длинные участки волокна (~ 1–100 км). Достижение требуемого уровня обратного рассеяния через увеличение концентрации неоднородностей в сердцевине волокна является перспективной задачей с точки зрения улучшения параметров указанных выше оптических систем.

Среди методов, позволяющих повысить уровень обратного рассеяния в волокне, наиболее перспективным является метод фемтосекундной лазерной записи, который позволяет записывать как точечные (отражение Френеля), так и непрерывные (рассеяние Рэлея и Ми) элементы обратного рассеяния в строго заданной области волокна, что особенно важно для практических применений.

В данной работе, используя различные стратегии облучения одномодового оптического волокна, демонстрируется запись следующих элементов: брэгговских решеток со случайно чирпованным периодом; отражателей Френеля, состоящих из отдельно стоящих точечных отражателей; непрерывных отражателей Рэлея/Ми. С помощью метода рефлектометрии обратного рассеяния изготовленные образцы охарактеризованы во временной и спектральной областях с высоким разрешением. Оптимизация условий записи (энергия лазерных импульсов, количество лазерных импульсов на единицу длины) позволила увеличить уровень обратного рассеяния в сердцевине одномодового волокна на 48 дБ/мм в случае отражателя Рэлея/Ми и на 51 дБ/мм в случае отражателя Френеля.

1. Kreger S. T. et al. High Resolution Distributed Strain or Temperature Measurements in Single- and Multi-Mode Fiber Using Swept-Wavelength Interferometry // Opt. Fiber Sens. 2006. P. ThE42.

2. Turitsyn S. K. et al. Random Distributed Feedback Fiber Laser // Nat. Photonics. 2010. Vol. 4, № 4. P. 231–235.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. А. Вольф

УДК 535.3

Оценка эффективности лазерного возбуждения оксида фосфора

С. Н. Мурашко

Томский государственный университет

Метод лазерно-индуцированной флуоресценции (ЛИФ) известен своей высокой чувствительностью, позволяющей обнаруживать следовые количества веществ и даже их отдельные молекулы. Однако метод оказывается неприменим для обнаружения сложных многоатомных молекул в силу высокой вероятности безызлучательной релаксации, характерной для систем с большим числом степеней свободы. Применение лазерной фрагментации (ЛФ) совместно с ЛИФ-методом позволяет решить эту проблему и свести задачу обнаружения сложных молекулярных соединений к задаче обнаружения более простых молекул, характеризующихся сильными и хорошо разрешаемыми переходами. Суть ЛФ/ЛИФ-метода заключается в разбиении сложной молекулы на фрагменты квантами лазерного излучения с последующим резонансным возбуждением флуоресценции характеристических фрагментов. В случае органофосфатов в качестве таких фрагментов-маркеров присутствия исходного соединения являются PO-фрагменты — молекулы оксида фосфора.

Изучению спектроскопических параметров PO было уделено значительное внимание за последние несколько десятилетий. Однако, несмотря на большое количество публикаций, посвященных разносторонним исследованиям по определению энергетической структуры PO и связанных с ней молекулярных постоянных, не выявлено работ, направленных на определение оптимальных условий для эффективного лазерного возбуждения флуоресценции PO.

Для определения оптимальной схемы возбуждения необходимо иметь аналитический вид функции распределения интенсивности полос электронных переходов в зависимости от частоты (длины волны) возбуждающего излучения. С этой целью была разработана математическая модель, позволяющая осуществить расчет спектров поглощения электронных переходов с необходимой точностью. Хорошее согласие экспериментальных данных и результатов расчета свидетельствует об адекватности применения разработанной модели для исследования процессов возбуждения PO-фрагментов для любых возможных неравновесных состояний, возникающих в процессе фотолиза органофосфатов. В работе приводятся результаты исследования эффективности лазерного возбуждения перехода $B^2\Sigma^+$ ($v' = 0$) — $X^2\Pi$ ($v'' = 0$) молекул PO в зависимости от спектральных параметров излучения для различных значений вращательной температуры. Показано, что максимальная эффективность возбуждения PO-фрагментов органофосфатов узкополосным лазерным излучением с длиной волны, соответствующей спектральному положению канта ветви ($Q_{11} + P_{21}$), достигается при вращательной температуре около 800 K.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Е. В. Горлов

УДК 535.8

Влияние шумовых характеристик волоконного оптического иттербиевого усилителя на эффективность параметрического усиления

А. С. Нетрусова

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск

В настоящее время волоконные системы активно развиваются и заменяют объемные твердотельные аналоги. Усиленное спонтанное излучение (*Amplified Spontaneous Emission* — ASE), или шум, является неотъемлемой частью волоконных усилителей, в которых используются редкоземельные элементы, такие как иттербий и эрбий. Вместе с тем их полосы усиления для многих применений оказывается недостаточно. В этом случае используют параметрическое усиление, возникающее при наличии широкополосного фазового синхронизма в волоконном световоде. Цель данной работы — исследование влияния шумовых характеристик волоконного оптического иттербиевого волоконного усилителя (*Ytterbium-Doped Fiber Amplifier* — YDFA) на эффективность параметрического усиления [1].

Оптический шум, генерируемый усилителем, ухудшает отношение сигнал/шум в линиях связи, тем самым увеличивая количество ошибок. Кроме того, в системах с каскадными усилителями вклад мощности ASE от каждого усилителя усиливается в последующих, ухудшая полную эффективность системы. В результате мощность ASE и коэффициент шума (*Noise Figure* — NF) являются важными показателями качества волоконных усилителей.

Метод измерений для нахождения уровня YDFA NF [2] заключается в определении основных параметров задающего генератора и каскадов усилителей. Для этого необходимо вычислить коэффициент усиления как отношение выходной и входной мощностей усилителя, а также знать следующие характеристики системы: мощности шума на выходе и шума источника, часть генерируемой в YDFA мощности шума на выходе.

В результате данной работы измерены коэффициенты усиления иттербиевого волоконного усилителя и определены оптимальная длина активного волокна и выходные характеристики излучения в используемых каскадах усиления. Также будет доложено о результатах исследования шумовых характеристик и их влияния на процесс параметрического усиления.

1. Антропов А. А., Ефремов В. Д., Евменова Е. А., Харенко Д. С. Моделирование волоконного оптического параметрического генератора для КАРС // 9-й Междунар. семинар по волоконным лазерам 2020. Новосибирск: Ин-т автоматики и электрометрии СО РАН, 2020. С. 193–194.
2. Amonics Ltd., Erbium-Doped Fiber Amplifier // Education Kit Manual, ver. 2.0. 2004. P. 17–20.

Научный руководитель — А. А. Антропов

УДК 535.36

Моделирование светорассеяния частицами вблизи многослойной подложки методом дискретных диполей

Н. Ю. Палактин

Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Метод дискретных диполей (МДД) позволяет численно решить прямую задачу светорассеяния для частиц произвольной формы и структуры. Ряд задач предполагает также присутствие подложки вблизи рассеивающей частицы. В настоящее время возможность моделировать светорассеяние частицей реализована в программном обеспечении (ПО) с открытым исходным кодом ADDA (на основе МДД) только для случая полубесконечной подложки, что соответствует экспериментам, где глубина подложки много больше размеров самой частицы и длины волны. Данный тип моделирования не применим к экспериментам с многослойными подложками, а также к экспериментам с относительно тонкими подложками. Данная работа посвящена разработке алгоритмов моделирования рассеяния вблизи многослойной подложки, а также их внедрению в ПО ADDA.

Учет подложки в задаче обуславливается вычислением полной функции Грина, включающей член, связанный с отражением от подложки. Последний можно вычислить исходя из метода изображений или посредством вычисления интегралов Зоммерфельда. Метод изображений является точным в случае идеально проводящей однослойной подложки или когда размеры частицы и расстояние до подложки много меньше длины волны. В остальных случаях он является аппроксимацией в сравнении с использованием интегралов Зоммерфельда, но позволяет ускорить вычисления. При решении задачи в случае многослойной подложки также возникают сопутствующие задачи, среди которых описание распространения и отражения плоских электромагнитных волн от многослойной поглощающей среды, а также учет возникающих волноводных мод в подложке.

На конференции будут представлены алгоритмы, позволяющие решать прямую задачу рассеяния в присутствии многослойной подложки и, в частности, вычислять «отраженную часть» тензора Грина методом изображений, а также посредством вычисления интегралов Зоммерфельда. Также будет обсуждено тестирование внедренной в ПО ADDA реализации этих алгоритмов.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин

УДК 535-14

Моделирование узкополосного фильтра на основе резонатора Фабри – Перо для применения в импульсной терагерцовой спектроскопии

А. А. Рыбак

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск

Современные импульсные терагерцовые спектрометры охватывают широкий спектральный диапазон от 50 ГГц до 6 ТГц и обладают динамическим диапазоном > 90 дБ в низкочастотной области спектра. Тем не менее для некоторых задач не требуется измерения в широком спектре. Для решения таких задач в данной работе представлен подход к созданию узкополосного квазиоптического фильтра на основе резонатора Фабри — Перо.

Для разработки узкополосного фильтра выбрана частота ν = 806 ГГц (λ = 372 мкм) с целью мониторинга линии поглощения молекулярного газа CO в локальном окне прозрачности атмосферы.

Фильтр основан на эталоне Фабри — Перо и представляет собой полипропиленовую пленку с нанесенными с обеих сторон частотно-избирательными поверхностями в форме квадратных прорезей в напыленном алюминиевом слое.

Предполагается, что данный фильтр сможет обеспечивать узкую полосу пропускания и последовательно совмещаться с более широкополосными пропускающими полосовыми фильтрами, реализованными на саморезонансных сетках и служащими для подавления высших резонансов эталона Фабри — Перо для обеспечения его монохроматичности.

Посредством численного моделирования пропускания в программе Ansys HFSS предложенной структуры определено, что оптимум отношения ширины металлической перемычки a к латеральному периоду микроструктуры g, составляющему менее половины рабочей длины волны, лежит в окрестности a/g = 0,5. При выборе g менее половины рабочей длины волны λ показано, что полная ширина на полувысоте пропускания получаемого квазиоптического фильтра составляет менее 4 %, что достаточно для выделения нужной частоты и подавления остальных в импульсных терагерцовых спектрометрах.

Таким образом, путем фильтрации широкополосного сигнала спектрометра и увеличения шага семплирования терагерцового импульса предполагается возможным сокращение времени сбора данных до 4 раз.

Научный руководитель — канд. техн. наук Н. А. Николаев

УДК 535.36

Исследование оптических свойств частиц на гексагональных атмосферных пластинках и столбиках, а также частицах неправильной формы для задач лазерного зондирования атмосферы

И. В. Ткачев, Н. Кан

Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН, Томск
Томский государственный университет

На сегодняшний день перистые облака представляют особый интерес в сфере исследований атмосферы как дистанционными методами зондирования, так и контактными, по большей степени изучение происходит по средству наземных средств, а также с помощью самолетов и спутников при помощи лидаров. Особый интерес при исследовании перистых облаков вызывают кристаллы льда, так как они существенно влияют на радиационный баланс Земли, что впоследствии влияет на климат и погоду.

Но на данный момент не создана полная оптическая модель для того, чтобы была возможность интерпретировать данные, полученные с помощью лазерного зондирования атмосферных частиц перистых облаков. Чтобы решить данную проблему, была составлена программа, а также описан метод, основанный на использовании физической оптики, разработанный в Институте оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН [1]. Так как данный метод хорошо работает с частицами, размеры которых превышают длину волны падающего на них излучения, он был использован для работы по составлению оптической модели.

В результате составлен банк данных матриц обратного рассеяния света на ледяных кристаллах и получены оптические модели для частицы неправильной формы размерами от 10 до 300 мкм, для гексагональных столбиков и пластинок размерами от 10 до 1000 мкм, а также для дроксталлов размерами от 5 до 200 мкм и показано их деполяризационное отношение.

1. Konoshonkin A., Borovoi A., Kustova N., Reichardt J. Power Laws for Backscattering by Ice Crystals of Cirrus Clouds // Opt. Express. 2017. Vol. 25, № 19. P. 22341–22346.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук А. В. Коношонкин

УДК 535.37

Спектрально-люминесцентные характеристики гомодимеров некоторых стирилцианиновых красителей в растворах

Ш. Турсунов

Самаркандский государственный университет, Узбекистан

Стирилцианиновые красители широко используются в различных областях науки и техники [1]. Обычно на практике красители применяют в виде растворов, особенностью которых является то, что молекулы красителя в них находятся в окружении молекул растворителя и взаимодействуют с ними. Причем эти взаимодействия существенно зависят от ряда факторов, таких как структура молекул растворенного вещества, концентрация и температура раствора, природа растворителя. В данной работе изучены спектрально-люминесцентные характеристики двух новых синтезированных стирилцианиновых красителей в воде и бинарной смеси: вода + этанол, вода + ДМФА, вода + диоксан. Результаты проведенных опытов показывают, что в интервале концентраций 10^{-5}–10^{-6} М спектры поглощения и флуоресценции стирилцианиновых красителей в воде остаются постоянными и относятся к мономерной форме красителей. Для них были определены основные спектрально-люминесцентные характеристики: коэффициент экстинкции (ε), сила осциллятора (f_e), квантовый выход (В), время жизни возбужденного состояния (τ), частота чисто электронного перехода ($\nu_{0\text{-}0}$) и величина стоксового сдвига (SS). Установлено, что при переходе от водных растворов к бинарным смесям вода-этанол, вода-ДМФА и вода-диоксан форма спектров поглощения и флуоресценции существенно не меняются, а происходит их батохромное или гипсохромное смещение. Установлено, что при повышении полярности растворителя увеличивается величина батохромного смещения максимума в спектрах поглощения и флуоресценции, при этом величины смещений в диметилформамидных и спиртовых растворах больше, чем в диоксановых. При этом в спектрах флуоресценции наблюдается увеличение интенсивности флуоресценции в среднем в 3–11 раз. Такое изменение спектров поглощения и флуоресценции объясняется сольватохромией — изменением сольватных оболочек окружающих молекулы красителей, которая обусловлена универсальными и специфическими взаимодействиями молекул красителей с молекулами растворителя [2].

1. Deligeorgiev T., Vasilev A. et al. Styryl Dyes — Synthesis and Applications During the Last 15 years // Coloration Technol. 2010. Vol. 126. P. 55–80.
2. Бахшиев Н. Г. Введение в молекулярную спектроскопию. Л.: ЛГУ, 1987. 216 с.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доц. Э. Н. Курталиев

УДК 621.384.6

Коррекция фазовой ошибки сверхпроводящего ондулятора

Р. Д. Халилов

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Создание источников синхротронного излучения является актуальной научно-технической задачей. Основными устройствами таких источников являются ондуляторы, а главной количественной характеристикой магнитного поля устройств — фазовая ошибка. Среднеквадратичное отклонение фазовой ошибки важно уменьшать, чтобы увеличить спектральную яркость источника.

В настоящее время в Институте ядерной физики им. Г. И. Будкераведется разработка сверхпроводящего ондулятора для национального синхротрона в Великобритании *Diamond Light Source* (DLS). По требованию заказчика среднеквадратичное отклонение локальной фазовой ошибки не должно превышать 3 градуса. Для этого разработан прототип ондулятора и с 2017 г. велась работа по достижению требуемого значения фазовой ошибки. Во-первых, улучшена технология намотки катушек с помощью дополнительной накладки на сердечник, повышающей порядок слоев намотки. Во-вторых, с помощью микрометра произведена сортировка катушек: те, у которых поверхность оказывалась наиболее ровной, помещались в центр, а плохие отсеивались. В-третьих, разработана корректирующая система магнитного поля из 12 источников тока, которая может дополнительно запитывать катушки как индивидуально, так и группами.

Цель данной работы — анализ проведенной работы по улучшению ондулятора. С 2017 г. проводились эксперименты по измерению магнитного поля до и после каждого изменения. По данным магнитного поля рассчитаны локальные и суммарные фазовые ошибки, построены спектры излучения. В результате достигнута локальная фазовая ошибка в 2 градуса, выросла общая спектральная яркость. На 15-й гармонике отличие спектральной яркости от идеальной составило 4 раза, что является хорошим результатом. Таким образом, результаты работы удовлетворяют требуемым условиям от DLS.

Научный руководитель — П. В. Каноник

УДК 621.396

Характеристики фотоустойчивости планарно-волоконных люминофорных антенн для атмосферных ультрафиолетовых телекоммуникаций

Н. В. Шахов, Н. С. Никитенко, Л. В. Шастин

Новосибирский государственный технический университет
Институт лазерной физики СО РАН, Новосибирск

В последнее 5 лет получили развитие люминофорные антенны для лазерных телекоммуникаций. При подаче на них лазерного сигнала излучение поглощается люминофором и переизлучается на другой длине волны. Излучение захватывается волноводным эффектом и доставляется на фотодетектор. Преимуществом данных антенн является широкий угол поля зрения, малый вес и высокие радиопрозрачность и устойчивость к радиопомехам. Такие антенны хорошо подходят для случая, когда местонахождение излучателя неизвестно. Важным фактором применения таких антенн является время фотостарения люминофоров, определяемое фотоустойчивостью планарно-волоконных люминофорных структур [1].

С марта 2021 г. на стенде ИЛФ СО РАН проводятся непрерывные испытания двух антенн на основе акрилата и ПММА с люминофором из ряда Кумаринов. На размещенные в герметичные корпуса пленки подавалось излучение в диапазоне 370–385 нм. Излучение люминесценции с торца пленок передавалось с помощью оптических кабелей с полимерными волокнами на вход фотоусилителя, а с него на осциллограф.

При измерениях в течение 12 месяцев не обнаружена тенденция по уменьшению отношения сигнал/шум из-за влияния солнечной облученности и импульсной УФ-облученности на планарно-волоконные антенны. Исходя из полученных данных, можно прогнозировать устойчивую работу люминесцентных антенн длительное время.

1. Бритвин А. В., Никитенко Н. С., Плюснин В. Ф. и др. О фотостабильности акрилатных и полиметилметакрилатных планарно-волоконных структур с люминофорами CUMARIN 7, 47, 120; POPOP; NOL8 для ультрафиолетовых информационных систем // Оптика и спектроскопия. 2022. № 2. С. 311–315.

Научный руководитель — д-р техн. наук Б. В. Поллер

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

Председатель секции — канд. физ.-мат. наук *А. А. Шошин*

Ответственный секретарь секции — канд. физ.-мат. наук *В. В. Анненков*

Экспертный совет секции
д-р физ.-мат. наук *А. В. Бурдаков*
канд. физ.-мат. наук *Д. И. Сковородин*
канд. физ.-мат. наук *А. В. Судников*

PLASMA PHYSICS

Section head — Cand. Phys.-Math. Sci. *A. A. Shoshin*

Section responsible secretary — Cand. Phys.-Math. Sci. *V. V. Annenkov*

Section scientific committee
Dr Phys.-Math. Sci. *A. V. Burdakov*
Cand. Phys.-Math. Sci. *D. I. Skovorodin*
Cand. Phys.-Math. Sci. *A. V. Sudnikov*

УДК 621.32

Калибровка относительной чувствительности каналов полихроматора в области линии H_α

В. В. Бочкарев

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Одной из основных задач исследований, проводимых на открытой многопробочной ловушке ГОЛ-NB, является изучение процесса накопления быстрых протонов при инжекции высокоэнергетических нейтральных атомов водорода (25–30 кэВ). Для изучения данного процесса необходимо сконструировать полихроматор, с помощью которого можно получать спектры излучения нейтральных атомов водорода из плазмы в течение эксперимента. Устройство полихроматора представляет собой спектрометр МДР-23, к выходу которого подключена линейка световодов; каждый световод, соединенный с ФЭУ с регулируемым коэффициентом усиления, формирует спектральный канал полихроматора. Для работы полихроматора необходимо измерить чувствительность каждого его канала относительно мощности излучения, попадающего на щель спектрометра. Сделать это можно при помощи импульсного калибровочного источника излучения в диапазоне длин волн вблизи линии H_α (656,28 нм), причем источник должен иметь равномерную спектральную плотность излучения и заданную временную диаграмму светимости.

В итоге было решено, что для измерения чувствительности каналов полихроматора необходимо создать равномерную освещенность поверхности каналов световодной линейки от источника света, установленного внутри спектрометра. Светимость калибровочного источника за время его работы (~ 3 мс) должна изменяться на несколько порядков, а спектральная мощность должна быть сконцентрирована в области линии H_α. Эти требования накладывают жесткие ограничения на инерционность источника излучения, поэтому калибровочная схема была сконструирована на основе красного светодиода с линией излучения в области 660 нм.

В результате работы был спроектирован и создан калибровочный источник излучения для измерения относительной чувствительности каналов полихроматора, используемый в каждом эксперименте ГОЛ-NB. Были численно рассчитаны и экспериментально измерены его временная и пространственная диаграммы светимости.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук И. А. Иванов

УДК 533.9.082.76

Разработка высокочастотного плазменного эмиттера с охлаждаемым фарадеевским экраном

В. А. Воинцев

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера в лаборатории 9-0 разрабатываются атомарные инжекторы для нагрева и диагностики плазмы в крупных термоядерных установках [1, 2]. В данных инжекторах источником плазмы является высокочастотный (ВЧ) плазменный эмиттер [3], внутри которого в целях защиты керамики установлен цилиндрический металлический экран, имеющий, как правило, водяное охлаждение.

В данной работе были исследованы несколько экранов: молибденовые с z-образными щелями, со щелями без перекрытия из пластин, прикрученных к охлаждаемым кольцам.

По ходу проведения экспериментов на эмиттере с данными экранами была проведена оптимизация параметров источника плазмы и исследован нагрев элементов камеры эмиттера, генерируемой плазмой и ВЧ-полями антенны.

Оценка мощности нагрева осуществлялась путем измерения потока охлаждаемой воды и температуры до и после прохождения через элементы, а также с использованием компьютерного моделирования.

В докладе представлены результаты экспериментов на эмиттере и результаты моделирования.

1. Ivanov A. A., Davydenko V. I., Deichuli P. P. et al. Radio frequency ion source for plasma diagnostics in magnetic fusion experiments // Rev. Sci. Instruments. 2000. Vol. 71. P. 3728–3735.
2. Sorokin A., Belov V., Davydenko V. et al. Characterization of 1 MW, 40 keV, 1 s neutral beam for plasma heating // Rev. Sci. Instrum. 2010. Vol. 81. 02B108.
3. Shikhovtsev I. V., Abdrashitov G. F., Belchenko Yu. I. et al. Inductive RF drivers for neutral beam injectors at BINP // AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 2052.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук И. В. Шиховцев

УДК 533.9.03

Разработка высокочастотного плазменного эмиттера с увеличенным содержанием протонов

Д. Ю. Гаврисенко

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Для нагрева и диагностики плазмы используются атомарные инжекторы нейтральных частиц. В Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера, в лаборатории 9-0, разработаны серии таких установок. В качестве ионного источника используется высокочастотный (ВЧ) драйвер. Характеристики драйвера прямо влияют на качество пучка: массовый состав, ток, расходимость и т. д. Ток и расходимость пучка — это параметры, которые закладываются на этапе проектирования инжектора. Массовый состав может быть разный, но его стараются улучшить, повысить содержание протонов.

Таким образом, целью данной работы является разработка ВЧ-драйвера с повышенным содержанием протонов. Для достижения этой цели выбрано несколько способов. Во-первых, применены ферриты. Это позволит сконцентрировать поле от катушки ВЧ-драйвера внутри камеры, увеличить эффективность ионизации и плотность плазмы. Во-вторых, проведен анализ тепловых потерь, так как электромагнитные волны, созданные катушкой, могут нагревать элементы установки и тратить мощность, подводимую к ВЧ-драйвер.

Для анализа тепловых потерь был проведен ряд экспериментов, в которых были измерены мощности, отводимые водяным охлаждением от элементов ВЧ-драйвера. Также были измерены характеристики колебательного контура в разных конфигурациях с целью определения потерь в различных элементах ВЧ-драйвера.

В докладе представлены результаты экспериментов.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук И. В. Шиховцев

УДК 533.9.082.74

Разработка электростатических анализаторов на установках ГДЛ и КОТ: первые экспериментальные результаты

И. А. Горенков

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск

Важным направлением исследований для решения проблемы управляемого термоядерного синтеза является изучение и совершенствование методов удержания плазмы: помимо значительных успехов в достижении высоких параметров плазмы на установке «газодинамическая ловушка» (ГДЛ) [1], ведутся эксперименты по изучению обращения магнитного поля на новой установке «компактный осесимметричный тороид» (КОТ) [2].

Установка ГДЛ — линейная магнитная ловушка с высоким пробочным отношением. Ионы плазмы в ней делятся на холодную компоненту с температурой ~ 100 эВ и горячую (~ 20 кэВ) анизотропную компоненту, которую генерируют 8 атомарных инжекторов (625 кВт, 5 мс), расположенных под углом 45° к продольной оси.

Установка КОТ — осесимметричная магнитная ловушка, обращение магнитного поля которой будет достигнуто за счет накопления азимутального тока горячих ионов (~15 кэВ): два сфокусированных атомарных инжектора (2 МВт, 5 мс) направлены перпендикулярно магнитной оси с прицельным параметром 10 см [3].

В данной работе представлены разработанные диагностические приборы на основе анализа нейтралов перезарядки для определения параметров горячей компоненты на перечисленных установках: 45-градусный электростатический анализатор с угловым разрешением для определения радиального распределения плотности плазмы на установке ГДЛ и 45-градусный электростатический анализатор с энергетическим разрешением для установки КОТ. Представлены первые результаты, полученные в ходе эксперимента на установке ГДЛ.

1. Bagryansky P. A., Gospodchikov E. D., Lizunov A. A. et al. Achievement of a record electron temperature for a magnetic mirror device // Phys. Rev. Lett. 2014. Vol. 114.
2. Bagryansky P. A., Akhmetov T. D., Chernoshtanov I. S. et al. Status of the experiment on magnetic field reversal at BINP // AIP Conference Proceedings. 2016. Vol. 1771, № 1. P. 030015.
3. Davydenko V. I., Deichuli P. P., Ivanov A. A., Murakhtin S. V. Neutral beam injection system for the CAT experiment // Plasma Fusion Res. 2019. Vol. 14.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. В. Приходько

УДК 536.4

Исследование термической деформации пластин при импульсном нагреве

Н. В. Давыдов

Новосибирский государственный университет
Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск

Тепловое воздействие является одним из самых характерных эффектов при взаимодействии плазмы с поверхностью. В различных плазменных установках с длительным удержанием, а в перспективе и в термоядерных реакторах, одна из основных проблем — термическая эрозия стенок и дивертора из-за импульсного теплового воздействия со стороны плазмы во время срывов. Исследование данного вопроса в том числе актуально для разработки дивертора проекта ITER.

В рамках настоящей работы было выполнено построение модели упругих деформаций круглой пластины при импульсном воздействии на ее поверхность на основе теории пластин Кирхгофа — Лява [1, 2]:

$$\Delta^2 W\left(t,r,\theta\right)+\frac{\rho h}{D}\frac{\partial^2}{\partial t^2}W\left(t,r,\theta\right)=-\frac{1}{\left(1-\sigma\right)D}\Delta M\left(t,r,\theta\right),$$

где W — прогиб средней плоскости; ρ — плотность материала пластины; h — толщина пластины; E — модуль Юнга; σ — коэффициент Пуассона; M — момент сил, возникающий из-за термического расширения материала; $D = Eh^3/(12(1 - \sigma))$. Данная модель необходима для интерпретации результатов, полученных диагностикой изгиба в эксперименте по нагреву электронным пучком вольфрамовых пластин на установке BETA.

Результаты моделирования показывают, что колебательный характер движения пластины, наблюдаемый в эксперименте, лишь частично описывается приведенной моделью, рассчитывающей собственные колебания пластины. В эксперименте наблюдаются также колебания, не связанные с собственными степенями свободы пластины, которые, вероятно, определяются колебанием держателя образца.

1. Krauthammer T., Ventsel E. Thin Plates and Shells: Theory: Analysis, and Applications. Switzerland: Taylor & Francis, 2001. P. 666.
2. Eslami M. R., Sumi N., Noda N. et al. Theory of Elasticity and Thermal Stresses: Explanations, Problems and Solutions. Netherlands: Springer Netherlands, 2013. P. 789.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. С. Аракчеев

УДК 533.951.8

К неустойчивости трехмерных состояний динамического равновесия плазмы Власова – Максвелла

Я. А. Журенков

Новосибирский государственный университет

Данная работа посвящена рассмотрению прямым методом Ляпунова устойчивости точных стационарных решений уравнений, описывающих пространственные движения безграничной бесстолкновительной электронейтральной полностью ионизованной плазмы Власова — Максвелла, по отношению к малым трехмерным возмущениям. Цель работы — доказать абсолютную линейную неустойчивость пространственных состояний динамического равновесия плазмы Власова — Максвелла относительно изучаемых возмущений.

Итогом проведенных исследований стали следующие результаты: 1) получено достаточное условие устойчивости точных стационарных решений пространственных уравнений Власова — Максвелла по отношению к малым трехмерным возмущениям, соответствующее ранее известному условию Ньюкомба — Гарднера — Розенблюта; 2) с применением эйлерово-лагранжевой замены независимых переменных (так называемой гидродинамической подстановки) пространственные уравнения Власова — Максвелла преобразованы к бесконечной системе трехмерных уравнений, похожих на уравнения пространственных изоэнтропических течений идеальной сжимаемой жидкой среды в приближениях «вихревой мелкой воды» и Буссинеска; 3) найдены достаточные условия линейной практической неустойчивости точных стационарных решений несчетной системы трехмерных уравнений газодинамического типа и доказано, что для малых пространственных возмущений в форме нормальных мод эти условия служат и необходимыми тоже; 4) в случае, когда достаточные условия линейной практической неустойчивости точных стационарных решений бесконечной системы трехмерных уравнений газодинамического типа справедливы, построена априорная экспоненциальная оценка снизу роста рассматриваемых пространственных возмущений, которая свидетельствует об абсолютной неустойчивости данных стационарных решений; 5) известное раньше достаточное условие Ньюкомба — Гарднера — Розенблюта линейной устойчивости точных стационарных решений трехмерных уравнений Власова — Максвелла относительно изучаемых пространственных возмущений обращено и к тому же обнаружен его условный характер; 6) действие классической для электростатики теоремы Ирншоу не только распространено на безграничную бесстолкновительную электронейтральную полностью ионизованную плазму Власова — Максвелла, но и обобщено с теоретической механики на статистическую.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. Ю. Г. Губарев

УДК 533.9

Магнитные измерения на установке КОТ

Р. С. Иванов

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В Институте ядерной физики в настоящее время введена в эксплуатацию установка КОТ (компактный осесимметричный тороид) — открытая магнитная ловушка, на базе которой проводятся поддерживающие эксперименты для установки ГДМЛ. Целью создания установки КОТ является отработка принципов диамагнитного удержания плазмы при помощи обращения ведущего магнитного поля азимутальным током — FRC (*Field Reversed Configuration*). Для его получения в двухкомпонентную мишенную плазму температурой 50 эВ инжектируются мощные атомарные пучки, при взаимодействии которых с мишенной плазмой накапливается необходимая популяция быстрых ионов. Цель экспериментов на установке — развитие методов создания и стабилизации компактного плазменного образования. Важным элементом диагностики плазмы являются магнитные зондовые и диамагнитные измерения. Измерение диамагнетизма плазмы позволяет контролировать ее энергосодержание для оптимального захвата ионов на ларморовскую орбиту и накопления азимутального тока. Магнитные зондовые измерения предназначены для определения положения и мод колебаний FRC в эксперименте на установке КОТ.

Целью данной работы является построение теоретической модели, необходимой для процедуры восстановления энергосодержания мишенной плазмы из показаний диамагнитных петель. Также в работе представлена разработка математического аппарата для обработки и расшифровки сигналов с набора азимутальных магнитных зондов. Для этого в среде Python были смоделированы различные моды колебаний азимутального тока и реализованы математические методы для считывания и интерпретации сигналов с 12 магнитных зондов, установленных по азимутальной координате. Эти математические методы в дальнейшем также планируется применять для реальных сигналов, полученных на установке КОТ.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук С. В. Мурахтин

УДК 533.922+519.688

Создание инструмента численного моделирования плазменного кильватерного ускорения LCODE 3D

И. Ю. Каргаполов

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Плазменное кильватерное ускорение с пучковым драйвером является активно развивающимся методом ускорения заряженных частиц на коротких расстояниях. Использование плазмы в данном методе позволяет получать ускоряющие поля, на порядки превышающие максимально возможные в традиционных ускорителях.

Опыт многочисленных исследований показал, что качественное проектирование новых экспериментальных установок с использованием плазменного кильватерного ускорения требует численного моделирования. Существующие инструменты моделирования предоставляют широкие возможности для изучения динамики плазмы в условиях, близких к экспериментальным. Однако, хотя многие такие инструменты могут моделировать эксперименты, требующие короткого вычислительного окна, существует нехватка надежных инструментов, позволяющих моделировать долговременную эволюцию кильватерной волны. Создаваемые для этого программы моделирования должны обеспечивать низкий числовой шум при разумном потреблении компьютерных ресурсов, что создает значительные сложности при их разработке.

В данной работе представляется код для трехмерного моделирования плазменного кильватерного ускорения LCODE 3D, являющийся модифицированной версией двумерного кода LCODE. В основе вычислительных алгоритмов данных кодов лежит метод частиц в ячейках (PIC) и квазистатическое приближение, где последнее позволяет значительно сократить время моделирования. Новый инструмент моделирования LCODE 3D позволяет исследовать в схемах кильватерного ускорения долговременную эволюцию как плазмы, так и пучков заряженных частиц в декартовой прямоугольной системе координат в пространстве. Перестроение численных алгоритмов для работы на видеокартах (GPU) обеспечило заметный прирост в скорости моделирования. Корректность работы кода LCODE 3D проверялась при помощи сравнения результатов моделирования тестовых задач нового и других кодов.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. К. В. Лотов

УДК 533.9.072

Оптимизация параметров мишенной плазмы в эксперименте на установке КОТ

К. С. Колесниченко

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН введена в строй новая установка КОТ, которая представляет собой аксиально-симметричный пробкотрон с мощной атомарной инжекцией. Цель планируемого эксперимента на этой установке состоит в создании и исследовании удержания популяции горячих ионов с предельно высоким относительным давлением $\beta \to 1$. Рассматривается также возможность перехода к конфигурации с обращенным магнитным полем. Предполагается, что атомарные пучки водорода или дейтерия с энергией частиц 15 кэВ и суммарной мощностью более 2 МВт будут инжектироваться в предварительно созданную в пробкотроне мишенную плазму. Согласно результатам ранее проведенных расчетов [1], для эффективного накопления горячих ионов, образующихся в результате захвата атомарных пучков, необходимо, чтобы электронная температура мишенной плазмы находилась в диапазоне нескольких десятков электрон-вольт, а линейная плотность была достаточной для эффективного захвата пучков. Для генерации мишенной плазмы с требуемыми параметрами используется методика, разработанная ранее для инжекции плазмы в амбиполярную ловушку [2]. Суть методики заключается в использовании источника плазмы дугового типа, который имеет разрядный канал с кольцевой конфигурацией и работает в магнитном поле. Возникающее за счет $E \cdot B$-дрейфа дифференциальное вращение плазмы приводит к развитию неустойчивости Кельвина — Гельмгольца, что, в свою очередь, вызывает нагрев ионов генерируемой плазменной струи до 200–300 эВ. За счет кулоновских столкновений ионы передают энергию электронам плазмы. Для подавления электронной теплопроводности между пробкотроном и генератором плазмы с помощью специальной магнитной катушки формируется термобарьер.

В докладе будут представлены результаты детальных исследований параметров генерируемой таким способом мишенной плазмы и описаны результаты поиска оптимального для захвата и удержания горячих ионов соотношения между ее линейной плотностью и электронной температурой.

1. Tsidulko Yu. A., Chernoshtanov I. S. Particle-in-cell simulation of field reversal in mirror trap with neutral beam injection // AIP Conf. Proc. 2016. Vol. 1771. 040005.
2. Кабанцев А. А. Неустойчивости струи мишенной плазмы: дис. … канд. физ.-мат. наук. Новосибирск, 1991.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук П. А. Багрянский

УДК 533.95

Численное 2D-моделирование формирования конфигурации с обращенным магнитным полем в плазме при атомарной инжекции

В. А. Куршаков

Новосибирский государственный университет

Одним из направлений развития современного управляемого термоядерного синтеза является создание реактора с высоким давлением плазмы. Это может быть достигнуто за счет создания конфигурации с обращенным магнитным полем. Способом ее создания может стать внеосевая инжекция нейтральных атомов, приводящая к формированию азимутального тока. Сейчас в Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН начинаются эксперименты на новой установке КОТ (компактный осесимметричный тороид), которые позволят исследовать процесс обращения поля с помощью внеосевой атомарной инжекции.

Для детального изучения процессов в конфигурации с обратным полем необходимо развитие численного моделирования. Одним из лучших подходов к численному моделированию плазмы является полностью кинетическая модель частиц в ячейках (*particle-in-cell*, PIC). Однако стандартные явные PIC-схемы требуют использования очень малого пространственного и временного шага и становятся неустойчивыми при длительном моделировании, в связи с чем они плохо подходят для исследования динамики плазмы на миллисекундных временах инжекции атомарных пучков в плазму. В данной работе рассмотрена возможность использования неявной схемы, позволившей увеличить шаг моделирования, сохраняя устойчивость численной схемы и в то же время описывая необходимые физические процессы.

Целью данной работы является исследование формирования конфигурации с обращенным полем в рамках полностью кинетического моделирования с использованием неявной вычислительной схемы. Рассмотрены поперечное и осевое сечение конфигурации на масштабах и при параметрах реального эксперимента на установке КОТ.

Работа поддержана грантом РНФ № 21-72-10071.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. В. Анненков

УДК 537.63+537.525.5

Движение дугового разряда в магнитном поле между узкими электродами

В. А. Лаптев

Новосибирский государственный университет

Среди устройств управления потоком, использующих плазменные эффекты [1], особое место занимают магнитоплазменные актуаторы (МПА), действие которых основано на движении электропроводной области, например электрических разрядов, в электрическом и магнитном поле. Для разработки и создания МПА необходимо исследовать вольтамперные характеристики и динамику электрических разрядов в предполагаемых условиях применения.

Работа посвящена исследованию движения дугового разряда во внешнем магнитном поле между узкими электродами. Дуговой разряд возникал в результате подачи на электроды импульса высокого напряжения, сформированного длинной линией конденсаторов. Дальнейшее движение разряда в магнитном поле 112 мТл, создаваемом редкоземельным магнитом, происходило под действием силы Ампера.

Экспериментальные исследования проводились в прозрачной камере при давлении воздуха 50–600 Торр между параллельными электродами и электродами, расходящимися под углом 30°. Выбор геометрии модели и параметров эксперимента осуществлялся на основании теоретической модели, описывающей скорость движения разряда в магнитном поле и учитывающей сопротивление воздушной среды. Для регистрации скорости и характера движения дуги, время жизни которой составляет около 1 мс, а скорость движения — до 110 м/с, была использована высокоскоростная камера. Измерение величины электрического тока и напряжения в разрядном промежутке осуществлялось с использованием трансформаторов тока и высокочастотных цифровых осциллографов.

В результате анализа данных высокоскоростной съемки было установлено, что скорость дугового разряда в магнитном поле меняется с изменением давления воздуха и электрических параметров, но слабо зависит от конфигурации электродов. Значение средней скорости разряда в эксперименте удовлетворительно согласуется с аналитической оценкой. В экспериментах выявлена неравномерность движения дуги, что обуславливается процессами шунтирования разряда. Однако движение разряда между расходящихся электродов является более равномерным, чем при параллельных электродах.

Полученные результаты предполагается использовать для разработки МПА, применяемых для управления газовыми течениями.

1. Знаменская И. А., Сысоев Н. Н. Плазменные актуаторы и ударные волны // Газ. «Совет. физик». 2014. № 6 (109).

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. А. Ядренкин

УДК 533.9.082.76

Оптимизация положения плазменного шнура в транспортной секции установки СМОЛА

М. В. Ларичкин

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Для уменьшения продольного потока вращающейся плазмы из открытой ловушки был предложен способ динамического многопробочного удержания винтовым магнитным полем [1]. Для экспериментальной проверки концепции винтового удержания плазмы в конце 2017 г. в ИЯФ СО РАН была запущена установка СМОЛА.

Целью работы являлась оптимизация положения плазменного шнура в транспортной секции винтовой магнитной ловушки с помощью катушек коррекции для достижения максимальной гофрировки винтового магнитного поля [2]. Температура электронов плазмы в проведенных экспериментах ~ 30 эВ, температура ионов ~ 4 эВ. Максимальная плотность плазмы в центре сечения транспортной секции, достигаемая в экспериментах, измеренная зондовым методом, составила 10^{18}–$5 \cdot 10^{18}$ м$^{-3}$ [3].

Измерение распределения плотности плазмы в поперечном сечении транспортной секции осуществлялось при помощи четырех радиально подвижных двойных электростатических зондов. Зонды представляет собой пару молибденовых электродов диаметром 0,2 мм, помещенных в керамическую трубку диаметром 1,55 мм с двумя каналами так, чтобы длина помещенных в плазму участков электродов была 5 мм. Для повышения точности измерений в качестве «образцового» был выбран один зонд, остальные были откалиброваны по нему. Задачей работы являлись приближение профиля плотности плазмы модельной функцией, определение смещения центра профиля плотности плазмы относительно оси транспортной секции и определение параметров токов в катушках коррекции, необходимых для обеспечения центрального положения плазменного шнура в сечении транспортной секции установки. Эксперименты проводились в режимах работы, соответствующих удержанию и ускорению, с прямым и винтовым полями.

1. Beklemishev A. D. Helicoidal system for axial plasma pumping in linear traps // Fusion Sci. Technol. 2013. Vol. 63 (1T). P. 355–357.
2. Sudnikov A. V. et al. Plasma flow suppression by the linear helical mirror system // J. Plasma Phys. 2022. Vol. 88.
3. Давыденко В. И., Иванов А. А., Вайсен Г. Экспериментальные методы диагностики плазмы. Новосибирск, 1999.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. В. Судников

УДК 533.9

Измерение аппаратной функции щелевого электростатического анализатора

Н. О. Матрошилов

Новосибирский государственный университет

В настоящее время в ИЯФ СО РАН осуществлен физический пуск новой экспериментальной установки для магнитного удержания плазмы — компактный осесимметричный тороид (КОТ). Особенностью эксперимента является наличие плазмы с высоким относительным давлением $\beta \sim 1$ и возможным обращением ведущего магнитного поля — FRC (*Field-Reverse Configuration*). Для успешной работы установки в данном режиме требуется стартовая плазма с температурой электронной компоненты 40–50 эВ и плотностью 10^{13} см$^{-3}$. Установка относится к открытому типу магнитных систем, в которых плазма свободно вытекает вдоль силовых линий магнитного поля через магнитные пробки. Необходимым условием получения высокой электронной температуры мишенной плазмы является развитие неустойчивости Кельвина — Гельмгольца при работе плазменного генератора. При этом температура ионной компоненты может достигать 200 эВ. С целью изучения функции распределения энергетического спектра ионной компоненты планируется использовать сеточный анализатор нового типа, разработанный в ИЯФ СО РАН. В анализаторе применяется щелевая пластина на месте одной из задерживающих ионы сеток, геометрия пластины подобрана специально так, чтобы она пропускала только ионы в узком диапазоне энергий. Таким образом, анализатор позволяет получать энергетический спектр ионов без необходимости процедуры дифференцирования сигнала по энергии, что значительно упрощает обработку регистрируемого сигнала. В данной работе была проведена калибровка анализатора с помощью ионного источника с малым угловым разбросом частиц в пучке. Ионный источник был изготовлен на базе ионизационной лампы ПМИ-27. Источник отличается простотой конструкции, он позволил получить пучок ионов с достаточно узким энергетическим спектром.

Научный руководитель — О. А. Коробейникова

УДК 533.9.08

Первые результаты измерения профилей температуры и плотности электронов в плазме ГДЛ томсоновским рассеянием

А. В. Сандомирский

Новосибирский государственный университет

Томсоновское рассеяние является одной из важнейших диагностик в современных экспериментах по магнитному удержанию плазмы. Спектр некогерентного рассеяния совпадает с электронной функцией распределения по скорости. Поэтому этот метод позволяет определить локальную температуру и плотность электронов. Эти измерения необходимы во всех экспериментах в газодинамической ловушке (ГДЛ), а также в других магнитных системах.

Диагностика томсоновского рассеяния была установлена на ГДЛ. Произведена абсолютная калибровка системы регистрации, которая включала в себя измерение длины волны и выходной мощности. Были проведены первые измерения при помощи лазера Nd:Glass с длиной волны 1054,5 нм. Установлен новый лазер Nd:YAG с длиной волны 1064 нм, с использованием которого проводились дальнейшие измерения. Для регистрации излучения применялись спектрометры-полихроматоры производства ИЯФ на основе интерференционных фильтров и лавинных фотодиодов. Обработка данных производилась на основе численной модели релятивистского спектра рассеяния с учетом данных калибровки.

Получены поперечные профили температуры и плотности электронов в плазме ГДЛ по 4 спектральным каналам. Плазма создавалась при помощи газоразрядного источника, без СВЧ-нагрева, в режиме с температурой электронов 100–150 эВ. В серии выстрелов проведены измерения радиального профиля температуры по 6 точкам, расположенным от оси до радиуса лимитера 140 мм. Точность измерения температуры составила 5–10 % в одном выстреле. Профиль плотности электронов был получен с использованием калибровки измеренного спектра при помощи рамановского рассеяния.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. А. Лизунов

УДК 533.9.082.5

Развитие интерферометрической методики измерения плотности плазмы на установке ГОЛ-NB

С. А. Черепанова

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Для экспериментальной физики плазмы важной задачей является измерение плотности. Один из самых развитых и распространенных способов — интерферометрия. Конструкции интерферометров различны в зависимости от параметров и устройства установок, на которых они работают, поэтому интерферометрическая диагностика разрабатывается для каждой новой установки.

На установке ГОЛ-NB важной задачей является исследование продольной динамики плазмы, поэтому необходимы простые схемы, которые можно легко воспроизвести. В рамках реализации интерферометрического метода измерения плотности плазмы на установке ГОЛ-NB была использована схема интерферометра Майкельсона с инфракрасным CO_2-лазером. В такой схеме луч проходит через плазму два раза, вследствие чего чувствительность методики к показателю преломления плазмы повышается, что является важным преимуществом данной схемы. Интерферометр предназначен для измерения линейной плотности плазмы в секции сильного поля. Оптическая схема диагностики включает красный юстировочный лазер, луч которого совмещен с лучом CO_2-лазера. На данный момент диагностика полностью смонтирована и ведется ее юстировка.

Для оперативного получения информации о плотности плазмы при помощи данной диагностики была написана программа на языке Python, обрабатывающая сигналы, записанные в базу данных эксперимента. Методом скользящего среднего программа сглаживает сигнал, а затем считает интеграл от средней плотности.

Таким образом, была подготовлена диагностика для измерения плотности плазмы на установке ГОЛ-NB при помощи интерферометра Майкельсона с инфракрасным CO_2-лазером.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. В. Поступаев

УДК 533.9

Неустойчивости быстрых ионов дейтерия в водородной мишенной плазме на установке ГДЛ

Е. А. Шмигельский

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Плазма в открытой магнитной ловушке ГДЛ (ИЯФ СО РАН) состоит из двух компонент: в мишенную изотропную плазму инжектируются атомарные пучки дейтерия и в результате резонансной перезарядки формируется популяция быстрых анизотропных ионов. Анизотропия функции распределения частиц плазмы служит причиной возбуждения кинетических неустойчивостей различных типов, которые могут приводить к потерям быстрых ионов. Известно, что наличие в плазме теплых изотропных ионов того же вида, что и быстрые, стабилизирует дрейфово-конусную неустойчивость (ДКН) [1]. Кроме того, из теории следует, что присутствие теплых ионов, чьи циклотронные гармоники совпадают по частоте с некоторыми гармониками быстрых ионов, также может подавлять ДКН на этих гармониках [2].

Работа посвящена изучению модовой структуры и определению характерных видов неустойчивостей быстрых ионов, возбуждающихся в водородной мишенной плазме с примесью ионов дейтерия. Сигналы, полученные с помощью высокочастотных магнитных зондов и быстрого АЦП (500 МГц), были обработаны кросс-спектральным методом, в результате чего были определены азимутальное и продольное волновые числа для неустойчивостей в диапазоне частот от 1 до 10 МГц. Величины частот и номера азимутальных мод позволяют предполагать, что наблюдается дрейфово-конусная неустойчивость. Неустойчивость сопровождается скачкообразным изменением диамагнитных сигналов, что свидетельствует о рассеянии быстрых ионов. Серия экспериментов позволила проследить за изменением характеристик неустойчивостей и их последствий в виде рассеяния быстрых ионов при добавлении дейтерия в водородную мишенную плазму.

1. Kanaev B. I. Stabilization of drift loss-cone instability (DCI) by addition of cold ions // Nucl. Fusion. 1979. Vol. 19. P. 347.
2. Kotelnikov I. A., Chernoshtanov I. S. Isotopic effect in microstability of electrostatic oscillations in magnetic mirror traps // Phys. Plasmas. 2018. Vol. 25. 082501.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. В. Яковлев

УДК 533.922

Оптимизация протонного кильватерного ускорителя с двойной плазменной секцией

В. М. Ярыгова

Институт ядерной физики им Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Стремление повысить напряженность ускоряющего поля требует строительства линейных ускорителей все больших размеров. Однако существует альтернативный метод ускорения — кильватерное ускорение, позволяющее получать более высокие поля в компактных установках. Это метод ускорения сгустка электронов в плазме, возмущенной прохождением первичного пучка (драйвера).

В CERN проводится программа AWAKE, направленная на реализацию данного метода с использованием протонного драйвера. Ранее проводилось численное моделирование для протонного драйвера, пролетающего через одну плазменную секцию длиной 20 м [1]. Результат этого исследования показал стабильную амплитуду ускоряющего поля уже через 10 м. Для эффективной инжекции ускоряемого пучка плазменная секция будет разделена на две, с вакуумным промежутком между ними. В первой секции происходит самомодуляция длинного протонного пучка, т. е. он разделяется на микросгустки, во второй же — ускорение электронного пучка.

Предыдущие моделирования также показали, что можно получить более высокое ускоряющее поле, если в начале плазменной секции создать градиент плотности плазмы [2]. В связи с этим возникает задача поиска оптимальных параметров, при которых ускоряющий потенциал во второй секции имеет наибольшую амплитуду. При моделировании использовалось приближение линейного градиента, положение, длина и высота которого являлись варьируемыми параметрами.

Ускоряющее поле также зависит от длины вакуумного промежутка. Это значит, что необходимо решать задачу оптимизации для каждой длины отдельно. Чтобы сократить время моделирования, была выведена численная зависимость для амплитуды до и после вакуумного промежутка и длины промежутка. Эта зависимость позволяет решить задачу оптимизации единожды, находя в дальнейшем наилучший вариант с помощью полученной формулы.

1. Lotov K. V., Minakov V. A. Proton beam self-modulation seeded by electron bunch in plasma with density ramp // Plasma Phys. Controlled Fusion. 2020. Vol. 62 (11). P. 115025.
2. Lotov K. V. Controlled self-modulation of high energy beams in a plasma // Phys. Plasmas. 2011. Vol. 18 (2). P. 024501.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. К. В. Лотов

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Председатель секции — канд. физ.-мат. наук, доц. *Д. Р. Исламов*

Ответственный секретарь секции — *Т. М. Залялов*

Экспертный совет секции
канд. физ.-мат. наук, доц. *Д. Р. Исламов*
д-р физ.-мат. наук, проф. *В. Л. Альперович*
канд. физ.-мат. наук *Т. В. Перевалов*

SOLID STATE PHYSICS

Section head — Cand. Phys.-Math. Sci., Assoc. Prof. *D. R. Islamov*

Responsible secretary — *T. M. Zalyalov*

Section scientific committee
Cand. Phys.-Math. Sci., Assoc. Prof. *D. R. Islamov*
Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *V. L. Alperovich*
Cand. Phys.-Math. Sci. *T. V. Perevalov*

УДК 53.096; 53.098

Структурные и транспортные свойства пленок топологического изолятора на основе халькогенидов висмута и сурьмы

А. О. Баженов

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Работа посвящена изучению структурных и транспортных свойств топологических изоляторов (ТИ) на основе халькогенидов висмута и сурьмы, выращенных на различных подложках (слюда, кремний <111>, графен). В качестве образцов использовались пленки Bi_2Se_3, Bi_2Te_3 и четырехкомпонентного раствора $Bi_ySb_{2-y}Te_{3-x}Se_x$, полученные с использованием методов осаждения из газовой фазы (CVD) и молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Подбор параметров роста происходил с помощью контроля качества пленок методами атомно-силовой микроскопии (АСМ), рамановской спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии. По данным АСМ, поверхность оптимизированных пленок представляет собой сросшиеся многослойные островки с огранкой треугольной формы и расстоянием между слоями, соответствующим толщине квинтислоя. Для изучения транспортных свойств были проведены измерения магнетосопротивления (МС) и температурной зависимости проводимости исследуемых образцов. Показано, что в пленках Bi_2Se_3, выращенных на графене, проводимость пропорциональна толщине, что говорит о преимущественном вкладе в транспорт объемных состояний. Поверхностные состояния проявляются в наличии положительного пика МС в области низких магнитных полей, характерного для эффекта слабой антилокализации (САЛ). Данные измерения были проанализированы с помощью двух функций Хиками для вкладов в МС слабой локализации (СЛ) и САЛ. При уменьшении толщины пленки от 50 до 20 нм наблюдается переход от САЛ к СЛ, что было объяснено различием вклада от разных поверхностей в САЛ за счет изменения изгиба зон в зависимости от толщины пленки ТИ.

С целью уменьшения вклада объемных состояний в проводимость системы отработан рост четырехкомпонентного соединения. В процессе роста методом МЛЭ варьировались температуры подложки и источников ($BiSbTeSe_2$, Bi, Te), а для метода CVD — температура подложки, время осаждения и поток газа-носителя. Во всех образцах наблюдается положительное МС, которое проанализировано в рамках модели САЛ и модели неоднородного распределения разных групп носителей зарядов по образцу.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Н. П. Степина

УДК 538.9

Морфологические изменения на поверхности Si(111) при формировании примесно-индуцированной реконструкции (√3×√3)-Sn

А.И. Вергулес

Институт физики полупроводников
им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Для изменения кинетики гомо- и гетероэпитаксиального роста на поверхности Si(111) применяют предварительное осаждение сурфактантного покрытия Sn величиной в 1/3 МС (1 МС = 7,8 × 10^{14} атомов/см$^{-2}$). При этом на поверхности формируется примесная реконструкция (√3 × √3)-Sn (далее √3-Sn). В зависимости от температуры подложки образуются металлическая α-фаза или полупроводниковая γ-фаза реконструкции √3-Sn, отличающиеся содержанием Sn. Кроме того, при формировании реконструкции γ-√3-Sn может происходить сдвиг атомных ступеней, что указывает на повышенный массоперенос Si в присутствии Sn [1]. Поэтому актуальной задачей является исследование атомных процессов, определяющих морфологию ростовой поверхности Si(111)-(√3×√3)-Sn.

В данной работе методом *in situ* сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии изучены сверхструктурные переходы (7 × 7) ⇒ √3-Sn и “1 × 1”-Sn ⇒ ⇒ √3-Sn, индуцированные адсорбцией и десорбцией Sn при T = 600–825 °C. Сверхструктурный переход (7 × 7) ⇒ √3-Sn при T < 650 °C приводит к появлению на террасах покрытия 0,08 МС Si, образующего ростовые 2D-островки. Адсорбция до 1/3 МС Sn при T > 650 °C сопровождается выходом из ступеней атомов Si, которые впоследствии участвуют в формировании реконструкции γ-√3-Sn, и смещением ступеней в сторону вышележащих террас. С ростом температуры величина сдвига ступеней увеличивается. Однако при T > 775 °C ступени смещаются на меньшие расстояния и даже в сторону нижележащих террас за счет обратного встраивания атомов Si, так как их длина диффузии становится сравнимой с шириной террас. На основе измеренной зависимости скорости сверхструктурного перехода “1 × 1”-Sn ⇒ √3-Sn от температуры отжига получена оценка энергии активации десорбции Sn — 2,4 ± 0,2 эВ. Показано, что десорбция Sn в пределах одной террасы протекает неравномерно.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 19-72-30023) с использованием оборудования ЦКП «Наноструктуры».

1. Rogilo D.I. et al. In Situ Reflection Electron Microscopy for the Analysis of Silicon Surface Processes: Sublimation, Electromigration, and Adsorption of Impurity Atoms // Crystallogr. Rep. 2021. Vol. 66. P. 570–580.

Научный руководитель — А.С. Петров

УДК 538.911

Влияние отжига на температурные зависимости параметров контакта металл/InAlAs

И. Ю. Гензе

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Разработка технологии изготовления фотодетекторов микроволнового диапазона, а также высокочастотных транзисторов на основе InAlAs/InGaAs/InP гетероструктур является перспективным направлением микроэлектроники. Барьер Шоттки (БШ) на основе InAlAs — это важный функциональный элемент, определяющий как характеристики работы, так и долговременную стабильность и надежность данных приборов [1].

В этой связи важной технологической задачей является формирование БШ с заданными, однородно распределенными по площади параметрами. Латеральная неоднородность БШ, вызванная различными загрязнениями, кристаллическими дефектами, неравномерным легированием, слоем естественного оксида или наличием металлических зерен, может приводить к существенным отклонениям от идеальной теории термоэлектронной эмиссии [1]. Данные отклонения выражаются в возникновении существенных температурных зависимостей параметров БШ, которые могут быть описаны в рамках модели Танга [2], предполагающей наличие локальных областей с отличными от основной площади границы раздела характеристиками.

В данной работе на основе температурных (80–325 K) зависимостей высоты барьера $\varphi_b(T)$ и коэффициента идеальности $n(T)$ было изучено влияние отжига в формовочном газе при температурах 300–400 °C на однородность Au/Pt/Ti/*n*-InAlAs(001) БШ. Параметры БШ определялись путем анализа прямых ветвей вольт-амперных характеристик. Этапы формирования используемых БШ, методы расчета параметров БШ и степени неоднородности в рамках модели Танга подробно представлены в работе [3].

Показано, что отжиг при температурах 300–400 °C существенно не влияет на неоднородность границы раздела, приводя лишь к численному изменению параметров основного БШ.

1. Родерик Э. Х. Контакты металл-полупроводник / пер. с англ.; под ред. Г. В. Степанова. М., 1982. 208 с.
2. Tung R. T. Electron Transport at Metal-Semiconductor Interfaces: General Theory // Phys. Rev. 1992. Vol. 45. P. 13509.
3. Chistokhin I. B. et al. Barrier characteristics and interface properties of Au/Ti/n-InAlAs Schottky contacts // Mater. Sci. Semicond. Process. 2018. Vol. 74. P. 193.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. С. Аксенов

УДК 536.42

Закономерности избирательной коррозии в биметаллических наночастицах Ni-Al

Р. Е. Григорьев, С. С. Богданов,
К. Г. Савина, Н. И. Непша, С. А. Вересов

Тверской государственный университет

Известно, что биметаллические нанокластеры демонстрируют ряд специфических явлений по сравнению с их монометаллическими аналогами того же размера, например сегрегацию одного из компонентов частиц или избирательную коррозию [1]. Контролируя размер, состав, структуру и степень химического упорядочения, можно управлять физико-химическими свойствами некоторых новых наноматериалов [2], перспективных для промышленного применения. Целью данной работы является описание моделей процесса избирательной коррозии биметаллических наночастиц (НЧ) на примере системы Ni-Al с использованием двух альтернативных методов компьютерного моделирования (метод Монте-Карло и метод молекулярной динамики). Для моделирования межатомного взаимодействия использовался потенциал сильной связи [3]. Показано, что избирательная коррозия не должна заметным образом менять состав центральной части частицы, а ее ядро отчасти сохраняет структуру бинарного наносплава. Вместе с тем по мере удаления атомов одного из металлов возрастает степень дефектности частицы, которая в целом приобретает поверхностную структуру, отличную от структуры НЧ того же размера, не подвергавшихся избирательной коррозии. По-видимому, именно этот фактор приводит к пористости более крупных частиц при избирательной коррозии в условиях лабораторного эксперимента.

Исследования выполнены при поддержке РФФИ (проект № 20-33-90192).

1. Мясниченко В. С., Самсонов В. М., Сдобняков Н. Ю. и др. Компьютерные модели процесса избирательной коррозии бинарных металлических наночастиц // Физ.-хим. аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 487–499.
2. Сдобняков Н. Ю., Соколов Д. Н. Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование: монография. Тверь: ТвГУ, 2018. 175 с.
3. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48, iss. 1. P. 22–33.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. Н. Ю. Сдобняков

УДК 538.9

Получение высокоэнтропийного карбида Hf Ta Ti Nb Zr C_5

А. А. Гумовская

Томский политехнический университет

Высокоэнтропийные карбиды (*High entropy carbide* — HEC), класс материалов, в состав которых входит углерод и несколько переходных металлов IV–V групп [1], являются представителями относительного нового класса ультратугоплавких материалов с высокими механическими характеристиками [2]. Наиболее распространенным методом синтеза HEC является искровое плазменное спекание, однако для его осуществления необходимы высокие температуры свыше 2000 °C, а также высокое давление свыше 50 МПа. В этой связи актуален вопрос разработки новых методов синтеза, в частности плазменных, ввиду широкого диапазона достигаемых температур для осуществления синтеза [3].

В данной работе был получен высокоэнтропийный карбид Hf Ta Ti Nb Zr C_5 с кубической структурой на плазменном атмосферном электродуговом лабораторном стенде. В качестве прекурсоров использовались коммерческие порошки оксидов металлов HfO_2, Ta_2O_5, TiO_2, Nb_2O_5, ZrO_2 чистотой не хуже 99,9 % (Rare Metals Corp., Russia) со средним размером частиц до 10 мкм и рентгеноаморфный углерод чистотой не хуже 99 % (Hi-Tech Carbon Corp., China). Был оценен фазовый состав полученного порошка с помощью рентгеновского дифрактометра Shimadzu XRD 7000s. Также была изучена морфология субмикронных и наноразмерных частиц экспериментальных образцов с помощью просвечивающего электронного микроскопа JEOL JEM 2100F. В ходе проведения исследований была доказана возможность получения высокоэнтропийного карбида Hf Ta Ti Nb Zr C_5 при воздействии электродуговой плазмы постоянного тока.

В работе применялось оборудование ЦКП НМНТ ТПУ, поддержанного проектом Минобрнауки России № 075-15-2021-710.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-10030.

1. Opeka M. M. Ultra High Temperature Ceramic Composites // J. Eur. Ceram. Soc. 1999. Vol. 19. P. 2405.
2. Wuchina E. UHTCs: Ultra-High Temperature Ceramic Materials for Extreme Environment Applications // Soc. Interface. 2007. Vol. 16. P. 30.
3. Pak A. Ya., Grinchuk P. S., Gumovskaya A. A., Vassilyeva Yu. Z. Synthesis of transition metal carbides and high-entropy carbide TiZrNbHfTaC5 in self-shielding DC arc discharge plasma // Ceram. Int. 2022. Vol. 48. P. 3818–3825.

Научный руководитель — канд. техн. наук А. Я. Пак

УДК 538.9

Фотонные кристаллы на основе соединений GeSiSn

К. Д. Данилин

Новосибирский государственный университет

Фотонные кристаллы представляют собой структуры, характеризующиеся периодическим изменением диэлектрической проницаемости в пространстве. Распространение излучения внутри фотонного кристалла, благодаря периодичности среды, становится похожим на движение электрона внутри обычного кристалла под действием периодического потенциала. В результате электромагнитные волны в фотонных кристаллах имеют зонный спектр и координатную зависимость, аналогичную блоховским волнам электронов в обычных кристаллах. Благодаря своим свойствам фотонные кристаллы имеют большой потенциал в разработке оптических фильтров и волноводов.

Целью данной работы является установление влияния параметров фотонного кристалла на оптические свойства структур на основе материалов GeSiSn. Для выполнения поставленной цели были выделены основные задачи: 1) произвести численное моделирование оптических свойств фотонных структур, рассчитать спектры пропускания и отражения; 2) с помощью метода молекулярно-лучевой эпитаксии и технологии изготовления ФК получить фотонные структуры на основе материалов GeSiSn; 3) изучить оптические и электрофизические свойства полученных структур методами фотолюминесценции и ИК-фурье-спектроскопии.

Результатом исследовательской работы является определение оптимальных параметров фотонного кристалла для достижения максимального увеличения его оптических характеристик. Благодаря применению технологии фотонных кристаллов было достигнуто усиление фотолюминесценции в 2,7 раза относительно исходных структур.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. А. Тимофеев

УДК 537.9

Изучение времени разрушения сверхизоляторного состояния

Д. Е. Дураков

Новосибирский государственный университет
Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

Изучение эволюции сверхпроводимости тонких пленок при увеличении беспорядка привело к обнаружению перехода «сверхпроводник — изолятор». Особенностями данного перехода является сверхизоляторное состояние, малоизученное на сегодняшний день. В частности, вопрос о механизмах разрушения/возникновения сверхизоляторного состояния и релаксационных процессов в нем при рассматриваемых фазовых переходах остается открытым. Изучение отклика сверхизоляторных пленок после подачи на них прямоугольного импульса и исследование стационарных свойств сверхизолятора поможет лучше узнать особенности разрушения/возникновения сверхизоляторного состояния под действием напряжения.

В настоящей работе были взяты две пленки $Nb_{0,67}Ti_{0,33}N$ толщиной 8 нм, минимальной шириной 50 мкм (первый образец) и с локальным сужением до 5 мкм (второй образец), выращенные методом атомарно-слоевого осаждения при температуре 350 °C в виде холловского мостика в Аргонской национальной лаборатории. Все измерения проводились в криостате растворения ^{3}He/^{4}He. На пленки с помощью генератора сигналов подавалось напряжение прямоугольной формы. Ток, протекающий через образец, проходил через усилитель тока и измерялся с помощью осциллографа по двухточечной схеме. Вольт-амперные характеристики (ВАХ) при разной температуре измерялись аналогичным образом с заменой генератора сигналов на источник напряжения, осциллографа — на вольтметр.

Измеренные ВАХ и зависимости сопротивления на квадрат от температуры позволили определить критическое напряжение и температуру перехода Березинского — Костерлица — Таулесса, которые необходимы для определения параметров подаваемого сигнала. В ходе проведенных исследований отклика сверхизоляторных систем на прямоугольные импульсы напряжения выяснено, что для разрушения сверхизоляторного состояния необходимо несколько микросекунд. При этом данное время слабо зависит от температуры, однако быстро уменьшается при увеличении амплитуды напряжения. При длительности сигнала больше времени задержки переднего фронта сигнала почти в два раза сверхизолятор не реагирует на сигнал. Обнаружено, что локальные сужения пленки оказывают существенное влияние на данное время и вид временной зависимости тока.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. Ю. Миронов

УДК 539.211

Ван-дер-ваальсовый эпитаксиальный рост $SnSe_2$ на поверхности подложки $Bi_2Se_3(0001)$

К. Е. Захожев

Новосибирский государственный университет
Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

Халькогениды металлов образуют класс слоистых материалов, обладающих различными электронными и оптическими свойствами, зависящими от структуры слоев и последовательности их укладки. Слоистый $SnSe_2$ имеет высокую подвижность носителей заряда, что делает его многообещающим в создании высокочастотных транзисторов и высокоэффективных фотоприемников. В настоящий момент механизмы сублимации Bi_2Se_3 в процессе отжига, являющегося одним из этапов подготовки поверхности к гетероэпитаксиальному росту, и роста слоистого $SnSe_2$ на поверхности $Bi_2Se_3(0001)$ изучены слабо. Данная работа посвящена изучению закономерностей сублимации $Bi_2Se_3(0001)$ и ван-дер-ваальсового гетероэпитаксиального роста $SnSe_2$.

Методом *in situ* отражательной электронной микроскопии визуализированы и изучены процессы сублимации с поверхности Bi_2Se_3 в потоке Se. Также разработана и реализована методика роста слоистого $SnSe_2$ на поверхности $Bi_2Se_3(0001)$. Картины дифракции быстрых электронов на отражение соответствовали послойному росту $SnSe_2$, проходившему по двумерно-островковому механизму.

Методом *ex situ* атомно-силовой микроскопии получено изображение морфологии поверхности пленки, показано наличие шестиугольных ориентированных плоских островков размерами 0,2–1,5 мкм и высотой 5–20 нм. Образование островков происходило вблизи выходов на поверхность дислокаций с винтовой компонентой. Высота атомных ступеней на поверхности выращенной пленки составляла 0,6 нм, что согласуется с данными, опубликованными в литературе. Спектр комбинационного рассеяния света выявил набор колебательных мод, соответствующий $SnSe_2$.

Таким образом, в данной работе на основе изученной литературы разработана и реализована методика ван-дер-ваальсового роста $SnSe_2$ на поверхности $Bi_2Se_3(0001)$, визуализированы и изучены процессы сублимации с поверхности Bi_2Se_3 в потоке Se, а также исследована морфология поверхности полученной пленки.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 19-72-30023) с использованием оборудования ЦКП «Наноструктуры».

Научный руководитель — С. А. Пономарев

УДК 53.096+539.232+538.911

Фазовый переход «полупроводник – металл» в нанокристаллах VO_2

К. Е. Капогузов

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Диоксид ванадия (VO_2) — материал, испытывающий сверхбыстрый (до 26 фс), резкий обратимый фазовый переход полупроводник — металл при температуре около 68 °C. При таком переходе изменяются постоянная решетки на 1 %, проводимость до 5 порядков и пр. [1] В последние годы активно изучаются одиночные нанокристаллы (НК) VO_2, имеющие более резкий скачок проводимости при фазовом переходе по сравнению с поликристаллическими пленками и выдерживающие многократные переключения. Такие НК VO_2 рассматриваются как одни из самых многообещающих активных элементов для нейроморфных систем. Основными нерешенными задачами для практического применения структур на основе НК VO_2 является формирование одиночных кристаллов VO_2 и контактов к ним, а также исследование процесса фазового перехода в таких структурах.

В данной работе были исследованы поликристаллические пленки VO_2, кластеры кристаллов VO_2 и одиночные НК VO_2. Установлены отличия в свойствах фазового перехода для таких структур. Все исследуемые структуры были синтезированы методами газофазного и атомно-слоевого осаждения. Определена морфология поверхности полученных структур и их электрические свойства. Установлено, что наименьшие значения критического напряжения и тока перехода соответствуют случаю одиночных НК. Методами численного моделирования получены значения напряжения перехода и мощности, затрачиваемой на один переход в одиночном НК VO_2. Эти значения согласуются с экспериментальными результатами. Для кластеров кристаллов VO_2 также получена зависимость критического напряжения от внешней температуры, согласующаяся с теоретической моделью критической температуры. Полученные результаты перспективны для сверхбыстрых оптических и электрических устройств с низким энергопотреблением, как, например, сенсоры и нейроморфные системы [2].

1. Yujie Ke et al. Vanadium Dioxide: The Multistimuli Responsive Material and Its Applications // Small. 2018. Iss. 39. P. 1802025.
2. Prinz V. Y. et al. A new approach to the fabrication of VO_2 nanoswitches with ultra-low energy consumption // Nanoscale. 2020. Iss. 5. P. 3443–3454.

Научные руководители — С. В. Мутилин, канд. физ.-мат. наук А. Е. Гайдук

УДК 538.915

Первопринципное исследование электронной структуры оксида гафния, легированного лантаном

В. М. Ковзик

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Легирование La является одним из экспериментально подтвержденных способов улучшения характеристик элементов резистивной и сегнетоэлектрической памяти на основе HfO_2, а именно увеличения надежности и окна памяти. Для понимания влияния роли La на свойства HfO_2 необходимо изучение его атомной и электронной структуры. Существующие теоретические работы по данной тематике ограничены рассмотрением простейших модельных структур легированного оксида, без поиска оптимального положения атомов La. Таким образом, исследование электронной структуры HfO_2:La является актуальной и нерешенной задачей.

Работа посвящена изучению электронной структуры различных фаз HfO_2:La с помощью первопринципного моделирования, которое осуществляется в рамках теории функционала плотности с гибридным обменно-корреляционным функционалом в пакете Quantum ESPRESSO. Решается задача нахождения оптимальной атомной структуры HfO_2:La, а именно оптимального расположения в кристалле пары атомов La в позиции замещения атомов Hf и вакансии кислорода. Моделируется электронная структура найденных кристаллов HfO_2:La путем расчета спектров полной и парциальной плотности электронных состояний. Решается вопрос влияния La и внешнего давления на стабилизацию различных кристаллических фаз оксида: моноклинной, орторомбических полярных и неполярных, тетрагональной.

Установлено, что в оптимальных структурах HfO_2 с содержанием La в концентрации 2 и 4 % атомы La расположены не близко друг к другу, как это предполагалось ранее [1], а на расстоянии около 5 Å, при этом один из атомов La находится вблизи вакансии кислорода. Показано, что легирование La и гидростатическое давление не стабилизирует орторомбическую полярную фазу HfO_2 в виде объемного кристалла. Установлено, что для оптимальных структур HfO_2:La ширина запрещенной зоны практически такая же, как у идеальных кристаллов, а дефектные уровни в запрещенной зоне отсутствуют.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-22-00634.

1. Batra R. et al. Dopants Promoting Ferroelectricity in Hafnia: Insights From a Comprehensive Chemical Space Exploration // Chem. Mater. 2017. Vol. 29, № 21. P. 9102–9109.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Т. В. Перевалов

УДК 539.23

Определение потока фосфора, десорбирующего с подложки InP(001) в процессе отжига

Д. А. Колосовский [1], С. А. Пономарев [1,2], Д. В. Дмитриев [1]

[1] Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
[2] Новосибирский государственный университет

Подложки InP(001) используют для создания гетероэпитаксиальных структур (ГЭС), на основе которых изготавливают транзисторы с высокой подвижностью электронов, лазеры, электрооптические модуляторы и фотодиоды. Рост гетероструктуры начинается с удаления аморфного окисного слоя подложки. Обычно окисный слой на подложке InP удаляют высокотемпературным отжигом в потоке мышьяка. Однако в процессе отжига происходит десорбция фосфора и замещение фосфора мышьяком, что приводит к трансформации поверхности подложки с образованием твердого раствора InPAs с островками InAs. Решеточное рассогласование между InP, InPAs и InAs приводит к возникновению напряжений и центров зарождения дефектов в ГЭС. Определение скорости десорбции фосфора важно для построения модели образования дефектов в ГЭС. В данной работе предлагается методика определения потока десорбирующего фосфора из данных о морфологии и элементном составе поверхности InP(001), отожженной в потоке мышьяка.

В работе использовались *epi-ready* подложки InP(001) фирмы AXT. Отжиг проводился в ростовой камере установки молекулярно-лучевой эпитаксии Riber Compact 21T. Температура отжига (T) варьировалась от 500 до 540 °C, а поток мышьяка изменялся от $1{,}1 \times 10^{-5}$ до $2{,}5 \times 10^{-5}$ Торр. Экспериментальные образцы были поделены на две серии. Отжиг образцов первой серии завершался при формировании сверхструктуры (4 × 2), образцы второй серии дополнительно выдерживались 2 мин в потоке мышьяка после формирования сверхструктуры (4 × 2). Морфологию поверхности образцов исследовали методом атомно-силовой микроскопии на микроскопе Bruker Multimode 8.

Поток десорбирующего фосфора ($F_р$) был определен из зависимости количества атомов мышьяка на поверхности подложки от T и времени выдержки в потоке мышьяка. $F_р$ повышается от $6{,}03 \times 10^{10}$ $с^{-1} \cdot см^{-2}$ при T = 500 °C до $4{,}38 \times 10^{11}$ $с^{-1} \cdot см^{-2}$ при T = 540 °C. Из аппроксимации зависимости $F_р$ от T была определена энергия активации десорбции фосфора, которая составила 2,7 ± 0,2 эВ, что близко к литературному значению 2,96 эВ.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук К. С. Журавлев

УДК 620.3

Влияние функционализации поверхности магнитных ядер $MnFe_2O_4$ на закономерности формирования магнитоэлектрических наночастиц «ядро – оболочка», полученных гидротермальным методом

Д. А. Копцев, Р. В. Чернозем, М. А. Сурменева, А. Л. Холкин

Томский политехнический университет

Одним из самых перспективных методов контролируемой и эффективной адресной доставки лекарств является применение магнитоэлектрических (МЭ) наночастиц (НЧ), которые состоят из магнитострикционного ядра и сегнетоэлектрической оболочки, что позволяет выполнять адресную доставку и контролируемое высвобождение лекарств *in vivo* при воздействии внешнего магнитного поля [1]. Смачиваемость ядер и их агломерация напрямую влияют на формирование оболочки МЭ НЧ. Цель работы заключается в изучении влияния функционализации поверхности ядер $MnFe_2O_4$ (MFO) различными стабилизаторами на формирование оболочки $Ba_{0.9}Ca_{0.1}Ti_{0.9}Zr_{0.1}O_3$ (BCZT) с помощью гидротермального метода. Перед формированием оболочки BCZT функционализация поверхности ядер $MnFe_2O_4$ была выполнена с помощью гидрофильного поливинилпирролидона (ПВП) и гидрофобной олеиновой кислоты (ОК) [2]. Морфология и намагниченность полученных НЧ изучена с помощью растровой электронной микроскопии, рентгенофазового анализа, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и магнитометра. Установлено, что функционализация поверхности ядер ОК не оказывает значительного влияния на их намагниченность, однако приводит к увеличению содержания фазы Fe_2O_3, росту толщины оболочки BCZT на поверхности НЧ MFO и, как следствие, значительному снижению намагниченности МЭ НЧ в сравнении с исходными ядрами. В случае нанесения ПВП на поверхность $MnFe_2O_4$ анализ ПЭМ-изображений позволил выявить формирование отдельных НЧ BCZT на поверхности МЭ НЧ по сравнению с ядрами, покрытыми ОК. Установлено влияние функционализации ядер $MnFe_2O_4$ на закономерности формирования оболочки BCZT, что позволяет контролировать размер, структуру и другие ключевые свойства МЭ НЧ.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-588 от 1.06.2021).

1. Margarida M. et al. Bioinspired Three-Dimensional Magnetoactive Scaffolds for Bone Tissue Engineering // ACS Appl. Bio Mater. 2021. Vol. 4. P. 559–570.
2. Kun Yang et al. Re-Examination of Characteristic FTIR Spectrum of Secondary Layer in Bilayer Oleic Acid Coated Fe3O4 Nanoparticles // Appl. Surf. Sci. 2010. Vol. 256. P. 3093–3097.

Научный руководитель — д-р техн. наук, проф. Р. А. Сурменев

УДК 621.315.592

Исследование влияния собственного окисла CdHgTe после травления на электрофизические свойства границы раздела CdHgTe–Al_2O_3

И. А. Краснова

Новосибирский государственный университет
Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

При изготовлении фотоприемных матриц инфракрасного диапазона необходимо произвести травление мезаструктур для уменьшения фотоэлектрической связи между фотоприемными элементами. В настоящее время для этой цели используют раствор Br в HBr. Однако при таком травлении на боковых поверхностях мезаструктуры появляется избыточный теллур, окисел теллура и другие дефекты. Таким образом, целью работы является исследование влияния собственного окисла КРТ ($Cd_xHg_{1-x}Te$) после жидкостного травления Br + HBr на электрофизические свойства границы раздела КРТ-Al_2O_3.

Исследования проводились на образцах p-$Cd_{0,22}Hg_{0,78}Te$. Все образцы подверглись жидкостному травлению водным раствором Br + HBr. Для изучения влияния наличия собственного окисла образцы № 1 и 2 в течение суток хранились на воздухе и в парах H_2O_2 соответственно. Для исследования влияния отсутствия собственного окисла был произведен образец, на который после травления наносился триметилалюминия (ТМА) без окисления (№ 3), и образец, на котором проводилось удаление собственного окисла с помощью HCl и ИПС (№ 4). Также был сделан образец, на котором после травления не проводилось дополнительных обработок (№ 5). Далее на образцы наносился Al_2O_3 и изготавливались МДП-структуры. На этих структурах измерялся импеданс в зависимости от напряжения и частоты при температуре жидкого азота 77 К. Из полученных данных были найдены значения емкости диэлектрика, положения напряжения плоских зон и карты нормированной параллельной проводимости, из которых оценивались плотности поверхностных состояний (ПС).

Получено, что на всех образцах наблюдается одинаковый разброс емкости диэлектрика. Установлено, что наибольшее смещение положения плоских зон достигается в образце № 2. Было оценено, что наибольшее значение плотности ПС достигается в образцах № 2 и 4. А в образце № 3 наблюдается наименьшее значение плотности ПС.

Установлено, что удаление собственного окисла КРТ с помощью ТМА является перспективным способом обработки КРТ, испытавшего жидкостное травление водным раствором Br + HBr, для улучшения границы раздела КРТ-Al_2O_3.

Научные руководители — канд. физ.-мат. наук Г. Ю. Сидоров, Д. В. Горшков

УДК 538.9

СВЧ-фотокондактанс квантового точечного контакта в гетеропереходе GaAs/AlGaAs

Н. С. Кузьмин

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова, СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Основой наиболее изучаемых затворно-управляемых наноструктур является высокоподвижный двумерный электронный газ (ДЭГ) в одиночном гетеропереходе GaAs/AlGaAs. Недавно началось сравнительное исследование поведения однотипных наноструктур с ДЭГ, формируемым в различных типах гетероструктур. Лучше всего для этого подходит короткий (100 нм) квантовый точечный контакт (КТК) в силу его принципиальной простоты и высокой чувствительности к полевому управлению [1]. Например, изучался СВЧ-фотокондактанс КТК [2] с ДЭГ, сформированным в гетероструктуре с одиночной квантовой ямой GaAs толщиной 16 нм, окруженной двумя короткопериодными сверхрешетками GaAs/AlAs, легированными слоями δ-Si.

Целью данной работы были измерения СВЧ-фотокондактанса таких же КТК с расщепленным либо сплошным затвором, но при стандартном варианте создания ДЭГ в структурах с гетеропереходом и δ-легированием слоя AlGaAs. Эти измерения показали примерно такую же чувствительность КТК к сильному облучению, как и измерения в гетероструктуре с квантовой ямой [2]. Однако чувствительность к слабому облучению получилась более высокой, чем было в той структуре. Так, в случае стандартного гетероперехода затворные характеристики кондактанса заметно различались при ослабленной мощности подводимого облучения на 100 либо 50 дБ, а в структуре с квантовой ямой и необычным легированием эти кривые практически совпадали [2]. Предположительно, обнаруженное различие в поведении кондактанса КТК связано с различием зонных диаграмм стандартного гетероперехода и почти симметричной квантовой ямы, а также с тем, что ДЭГ гетероперехода формируется глубокими донорными центрами в AlGaAs, а в случае квантовой ямы [2] ДЭГ формировался мелкими донорами в ультратонком GaAs.

1. Ткаченко В. А., Квон З. Д., Ткаченко О. А. и др. Фотонно-стимулированный транспорт в квантовом точечном контакте // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 113, № 5. С. 328.
2. Ткаченко В. А., Ярошевич А. С., Квон З. Д. и др. СВЧ-отклик квантового точечного контакта // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 114. С. 108.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. С. Ярошевич

УДК 539.23

Исследование формирования GaN квантовых точек на g-AlN и g-SiN

Я. Е. Майдэбура

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

Квантовые точки (КТ) на основе GaN/Al(Ga)N могут служить источниками одиночных фотонов при комнатной температуре, что делает их перспективными для применения в квантовой криптографии. Помимо этого, структуры с КТ GaN/Al(Ga)N используются для создания светоизлучающих и лазерных диодов УФ и видимого диапазонов, а также быстродействующих ИК-фотоприемников. Формирование графеноподобных слоев g-AlN и g-SiN и рост КТ на этих слоях открывают возможности создания новых излучающих приборов с малым излучательным временем жизни.

При эпитаксиальном росте КТ на графеноподобных слоях взаимодействие ростового материала с подложкой носит ван-дер-ваальсовый характер, поэтому формирование КТ на g-AlN и g-SiN существенно отличается от роста на вюрцитных подложках. Отсутствие прочных химических связей ослабит требование согласования постоянных решеток и позволит выращивать бездефектные структуры, тем самым улучшив качество GaN/g-AlN(g-SiN)-структур.

Эксперименты по формированию КТ на g-SiN и g-AlN проводились на установке молекулярно-лучевой эпитаксии Riber CBE-32P. Эксперименты по росту КТ на g-SiN выполнялись в температурном диапазоне 600–850 °C, при потоке аммиака 275 sccm. Формирование КТ на g-AlN было исследовано в температурном диапазоне 550–850 °C, при потоке аммиака 275 sccm. Наблюдение за изменением морфологии поверхности проводилось методом дифракции быстрых электронов на отражение *in situ*.

В результате экспериментов по формированию GaN КТ на g-SiN во всем температурном диапазоне 600–850 °C образуются слабо ориентированные GaN 3D-островки высокой плотности и высокой однородности, как и предполагалось выше. Однако при формировании КТ GaN на g-AlN наблюдался рост одинаково ориентированных 3D-островков. В обоих случаях происходила конденсация КТ в островки. Интересное явление заключается в следующем: КТ GaN, сформированные на g-SiN и g-AlN, обладают практически одинаковым размером и даже при конденсации сохраняют свой размер и структуру. Иными словами, КТ GaN можно рассматривать как целую строительную единицу, как большую молекулу. Поэтому процесс конденсации можно рассматривать как взаимодействие между этими КТ с потенциалом притяжения, т. е. такой процесс конденсации можно описывать в рамках моделей решеточного газа.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук К. С. Журавлев

УДК 538.958

Случайная лазерная генерация в монокристалле $CH_3NH_3PbI_3$

М. П. Мамаева

Санкт-Петербургский государственный университет

Галогенидные перовскиты являются перспективной средой для создания лазеров. В отличие от работы, где в резонатор помещалась усиливающая среда, которая представляет собой тонкую перовскитную пленку, в данной работе демонстрируется случайная генерация в монокристалле $MAPbI_3$. Микротрещины в кристалле приводят к образованию резонатора и позволяют наблюдать генерацию при T = 30 К и импульсном возбуждении с частотой повторения 80 МГц.

Случайная генерация проявляется в виде импульсного узкополосного излучения с Q-фактором ~ 1200 и пороговым поведением: резким появлением лазерных полос высокой интенсивности при достижении определенной мощности накачки, т. е. порога. Наблюдаемая генерация также демонстрирует высокую степень линейной поляризации.

В данной работе было экспериментально показано, что излучение монокристалла MAPbI3, возбуждаемое импульсами лазера накачки, настроенными выше ширины запрещенной зоны материала при T = 30 К, может вызывать появление узких полос в спектре. Подтверждена лазерная природа полос. Описанные узкие полосы характеризуются особенностями, такими как высокая степень линейной поляризации, нелинейная зависимость от интенсивности накачки и пороговое поведение, присущие лазерной генерации. Низкотемпературные измерения позволили наблюдать структуру излучения в мельчайших деталях, т. е. со значительно меньшим температурным уширением.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 19-72-10034 на базе оборудования РЦ «Нанофотоника» СПбГУ.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Ю. В. Капитонов

УДК 538.9

Структура, колебания и вращение двумерного вигнеровского кластера

М. М. Махмудиан

Новосибирский государственный университет

При низкой температуре заряженные частицы в потенциальной яме за счет отталкивания образуют квазипериодическую структуру — вигнеровский кристалл (ВК) [1]. Трехмерный ВК является теоретической моделью твердого тела, в то время как двумерный ВК потенциально возможен из-за того, что положительные и отрицательные заряды пространственно разнесены. Двумерные ВК характерны для электронов на поверхности жидкого гелия или в очень чистых полупроводниковых каналах [2–4].

Нашей целью является изучение двумерного вигнеровского кластера (ДВК) — системы с конечным числом электронов. Предполагается, что электроны помещены при нулевой температуре во внешний потенциал $V = k(x^2 + \beta^2 y^2)/2$, который ограничивает их движение в плоскости (x, y).

Рассмотрены системы с числом электронов до 200. Показано, что в зависимости от асимметрии потенциала β форма кластера меняется с круговой до линейной. Изучена структура кластера, функции распределения координационных чисел внутренних и внешних электронов и найдено поверхностное натяжение края ДВК. Найдены критерии перехода «струна — зигзаг» в одномерном удерживающем потенциале.

Рассмотрено вращение ДВК за счет приложения адиабатически-переменного магнитного поля, изменяющегося от нуля до некоторого стационарного значения. Показано, что без трения под действием слабого вихревого электрического поля кластер начинает вращаться как твердое тело с угловой скоростью, в два раза меньшей циклотронной частоты. Показано, что увеличение магнитного поля приводит к фокусировке кластера.

Найдены собственные векторы и частоты малых колебаний различных ДВК. Эти данные были использованы для определения низкотемпературной теплоемкости.

1. Wigner E. P. On the Interaction of Electrons in Metals // Phys. Rev. 1934. Vol. 46. P. 1002.
2. Чаплик А. В. Возможная кристаллизация носителей заряда в инверсионных слоях низкой плотности // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. С. 746.
3. Platzman P. M., Fukuyama H. Phase Diagram of the Two-Dimensional Electron Liquid // Phys. Rev. B. 1974. Vol. 10. P. 3150.
4. Чаплик А. В. Неустойчивость квазиодномерной электронной цепочки и структурный переход «струна — зигзаг» // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. С. 275.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук М. В. Энтин

УДК 538.9

Изучение магнитосопротивления структур на основе PbSnTe с ферромагнитными контактами

А. С. Микаева

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В твердых растворах $Pb_{1-x}Sn_xTe$ ширина запрещенной зоны зависит от их состава x. Она уменьшается до 0 эВ при $x \sim 0{,}3$, и при $x > 0{,}3$ вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия происходит инверсия порядка зон и образуется фаза топологического кристаллического изолятора с появлением невырожденных по спину дираковских поверхностных состояний. Такие системы могут быть интересны для реализации спинтронных устройств, однако спиновый транспорт в них ранее не исследовался. Целью данной работы является изучение транспортных свойств спин-вентильных структур на основе $Pb_{1-x}Sn_xTe$ с составами вблизи точки инверсии зон, а также исследование электронной структуры $Pb_{1-x}Sn_xTe$ данных составов.

Изучаемые спин-вентильные структуры с $x \sim 0{,}2$–$0{,}4$ были изготовлены на основе пленок $Pb_{1-x}Sn_xTe$ (111), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках BaF_2 и легированных индием в процессе роста, с концентрацией дырок $p = 2 \cdot 10^{18}$ см$^{-3}$ и подвижностью ~ 6000 см^2/(В·с) при $T = 4{,}2$ К. Пары ферромагнитных контактов Co и FeCoB осаждались на поверхность пленок методом лазерного напыления через специальную композитную маску на расстоянии 30 мкм друг от друга.

Обнаружено, что для структур с $x \sim 0{,}34$ в магнитосопротивлении наблюдается локальный и нелокальный спин-вентильный эффект. Величина спин-вентильного эффекта $\Delta R/R$ составила $2 \cdot 10^{-3}$.

Отработана методика химической очистки поверхностей от оксидов и получена атомарно чистая и структурно упорядоченная поверхность пленок $Pb_{1-x}Sn_xTe$ для проведения исследования электронной структуры с помощью фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Обнаружено, что обработка поверхности изопропанолом, насыщенным парами соляной кислоты (HCl-iPA), хорошо подходит для удаления оксидов с пленок с содержанием $x \leqslant 30$ %. Исследована электронная структура поверхности (111) пленок $Pb_{1-x}Sn_xTe$ с составами вблизи точки инверсии зон ($x \sim 0{,}2$–$0{,}4$) в зависимости от температуры.

Научные руководители — В. А. Голяшов, д-р физ.-мат. наук О. Е. Терещенко

УДК 538.9

Расчет электронного спектра гетероструктуры MoS_2/WS_2

Н.Я. Муксунов

Северо-Восточный федеральный университет
им. М.К. Аммосова, Якутск

В последнее время исследования электронных и оптоэлектронных устройств на основе монослоя MoS_2 получили дальнейшее развитие по следующим причинам. Во-первых, обнаружено, что монослои MoS_2 имеют прямую запрещенную зону 1,8 эВ с сильной фотолюминесценцией. Во-вторых, на основе монослоя MoS_2 были изготовлены полевые транзисторы с высокой подвижностью заряда. В-третьих, монослой MoS_2 имеет запрещенную зону с двумя впадинами и сильной спин-долинной связью. Все это открывает новые возможности в области долинотроники. Другой перспективный материал — монослой WS_2, который впервые получен в работе и обладает свойствами, близкими к свойствам монослоя MoS_2. Вышесказанное побуждает исследовать электронные свойства многослойных дихалькогенидов переходных металлов.

Появление многослойных дихалькогенидов переходных металлов в качестве новых двумерных полупроводниковых материалов открывает новые возможности для теоретических и экспериментальных исследований [1, 2]. Вертикально уложенные ван-дер-ваальсовы гетероструктуры дихалькогенидов переходных металлов являются основой для создания новых гетероструктур.

В данной работе на основе метода функционала плотности произведен расчет электронного спектра простейшего случая, бислоя MoS_2 и WS_2. В качестве инструмента *ab initio* расчетов использовался пакет Quantum Espresso. *Ab initio* моделирование проводилось с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA). Для ускорения сходимости в расчетах выбрана величина энергии «обрезания» E_{cut} = 40 Ry. Во избежание взаимодействия между слоями расстояние между ними устанавливалось равным 20 Å. Расчеты показали, что максимум валентной зоны бислоя MoS_2/WS_2 в точке Г сильно зависит от межслоевого взаимодействия в гетероструктуре. При увеличении расстояния между слоями MoS_2 и WS_2 гетероструктура MoS_2/WS_2 постепенно переходит из полупроводника с непрямой запрещенной зоной в полупроводник с прямой запрещенной зоной.

1. Shih C.K. Coherently strained in-plane atomic layer heterojunctions // NPG Asia Mater. 2015. Т. 7, № 12. С. e231–e231.
2. Huang C. et al. Lateral heterojunctions within monolayer MoSe2–WSe2 semiconductors // Nature Mater. 2014. Т. 13, № 12. С. 1096–1101.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. Е.П. Шарин

УДК 538.9

Излучательные свойства пространственно упорядоченных GeSi квантовых точек, встроенных в фотонные кристаллы

А. Р. Насартдинова

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный технический университет

В последние годы значительно вырос интерес к исследованию взаимодействия излучения квантовых точек (КТ) с модами фотонного кристалла (ФК). Для обеспечения эффективного взаимодействия КТ с такими модами важно задать определенное пространственное расположение КТ внутри ФК. В данной работе проведено численное моделирование зонной структуры и излучательной способности ФК со встроенными GeSi КТ, созданными на подложках «кремний-на-изоляторе».

Моделирование выполнялось полуаналитическим Фурье-модальным методом в приближении матрицы рассеяния. Фотонный кристалл представлял собой квадратную решетку из вертикальных цилиндрических отверстий, вытравленных в слое кремния, который располагался на подложке $Si/SiO_2/Si$. Фотолюминесценция (ФЛ) GeSi КТ аппроксимировалась излучением точечных электрических диполей. В результате были рассчитаны зависимости интенсивности излучения КТ, расположенных внутри ФК, от энергии фотонов и волнового вектора вблизи Г-точки. На основе полученных данных определены наиболее интенсивные радиационные моды ФК и найдены наиболее «яркие» точки структуры, оптимальные для расположения в них КТ. Так, для ФК с периодом расположения отверстий 0,5 мкм и их диметром 0,2 мкм такой «яркой» точкой является пересечение диагоналей квадратной решетки ФК слоя. Полученные параметры ФК (диаметр отверстия, период расположения отверстий) были использованы при создании экспериментальных структур с пространственно упорядоченными GeSi КТ, встроенными в ФК. Излучательные свойства полученных структур исследованы методом микрофотолюминесценции. Обнаружено, что встраивание упорядоченных КТ в ФК приводит к значительному увеличению интенсивности их сигнала ФЛ по сравнению с аналогичными структурами без ФК.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Ж. В. Смагина

УДК 538.935

Транспортный отклик квантовой ямы на основе CdHgTe сверхкритической ширины

М. С. Рыжков

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН
Новосибирский государственный университет

Несмотря на прогресс, достигнутый в изучении и понимании двумерных топологических изоляторов (2Д ТИ), на сегодняшний день существует ряд нерешенных теоретических вопросов и проблем с реализацией некоторых экспериментов. В частности, до сих пор не только не удалось реализовать баллистические краевые каналы в 2Д ТИ длиной более чем несколько микрометров, но и не получилось прийти к однозначному ответу относительно основного механизма рассеяния электронов в них. Таким образом, несмотря на теоретические предсказания [1], в реальных образцах мы имеем дело с нарушением баллистичности краевых каналов. На данный момент наиболее реалистичной идеей является взаимодействие двумерных объемных неоднородностей и краевых электронов с соответствующим переворотом спина [2], однако эта проблема недостаточно подробно изучена экспериментально [3].

Работа посвящена экспериментальному изучению транспортного отклика квантовой ямы (КЯ) CdHgTe толщиной 11,5 нм. Получены зависимости локального и нелокального сопротивления в диапазоне температур от 0,1 до 20 К. Показано, что исследуемая система является 2Д ТИ и изучаемая КЯ характеризуется одновременно значительно меньшей величиной энергетической щели и большей подвижностью по сравнению с традиционными 8 нм HgTe-ямами. Выявлено, что вероятность рассеяния назад топологических электронов внутри края практически не зависит от температуры. Напротив, вероятность рассеяния из края в объем экспоненциально зависит от температуры, а подгонка этой зависимости стандартной активационной формулой является наиболее точным способом определения щели подвижности исследуемой системы.

1. Qi X.-L., Zhang S.-C. Topological Insulators and Superconductors // Rev. Mod. Phys. 2011. Vol. 83 (4). P. 1057.
2. Vayrynen J. I., Goldstein M., Glazman L. I. Helical Edge Resistance Introduced by Charge Puddles // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 110 (21). P. 216402.
3. Rahim A., Levin A. D., Gusev G. M. et al. Scaling of Local and Nonlocal Resistances in a 2D Topological Insulator Based on Hgte Quantum Well // 2D Mater. 2015. Vol. 2 (4). P. 044015.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. А. Козлов

УДК 538.9

Электронный транспорт в многоканальном квантовом точечном контакте

Д. И. Сарыпов

Новосибирский государственный университет
Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

На сегодняшний день технология молекулярно-лучевой эпитаксии позволяет выращивать полупроводниковые гетероструктуры с двумерным электронным газом (ДЭГ), ставшие модельными для изготовления мезоскопических структур и изучения электронного транспорта в них. Одним из интересных явлений, связанных с электронным транспортом, является явление квантования кондактанса, которое, хотя и исследуется много лет, содержит некоторые эффекты (например, широко известная «0,7-аномалия»), до сих пор не имеющие общепринятого объяснения. Данная работа сфокусирована на другом недавно обнаруженном эффекте многоканальности, состоящем в наличии внутри квантового точечного контакта (КТК) нескольких параллельных проводящих каналов, дающих разный вклад в кондактанс [1]. Выяснение физической природы этого эффекта является актуальной научной задачей и требует всестороннего экспериментального и теоретического изучения.

Для экспериментального наблюдения эффекта многоканальности был измерен кондактанс подвешенного КТК на основе GaAs с двумя управляющими затворами, литографически отделенными траншеями. Экспериментально измеренная зависимость кондактанса указывает на наличие в КТК двух проводящих каналов с независимым квантованием кондактанса. Возможное объяснение эффекта мультиканальности состоит в спонтанном перераспределении Г-электронов ДЭГ под воздействием присутствующих в системе дополнительных зарядов: положительно-заряженных доноров кремния в δ-слоях и X-электронов в сверхрешеточных слоях GaAs/AlAs. Проведен самосогласованный численный расчет профиля ограничивающего потенциала и плотности электронов в КТК, учитывающий наличие упомянутых зарядов. Результаты расчета качественно согласуются с результатами эксперимента.

1. Pokhabov D. A. et al. Crossing and anticrossing of 1D subbands in a quantum point contact with in-plane side gates // Appl. Phys. Lett. 2021. Т. 118, № 1. С. 012104.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. А. Похабов

УДК 538.975

Изменение структурных и оптических свойств множественных квантовых ям GeSiSn/Si и наноструктур GeSn, полученных на фасетированной поверхности

И. В. Скворцов

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Добавление Sn в матрицу Ge(Si) позволяет осуществлять зонную инженерию исходного материала. Увеличение содержания Sn приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны вплоть до ее инверсии в Г-точке при содержании Sn более 40 %. Экспериментально подтверждено, что материал GeSiSn имеет перспективы применения в устройствах ближнего и среднего инфракрасного диапазона. Несмотря на то что в настоящее время демонстрируются макеты фотонных устройств с использованием соединений GeSiSn, чаще всего они содержат толстые релаксированные слои, нанесенные на виртуальную подложку Ge. В данной работе приводятся результаты исследований структурных и оптических свойств множественных квантовых ям (МКЯ) GeSiSn/Si, полученных на поверхности кремния, с упругонапряженными бездислокационными слоями GeSiSn.

С использованием метода молекулярно-лучевой эпитаксии были получены МКЯ GeSiSn/Si как на поверхности Si(100), так и на фасетированной поверхности. Показано, что отжиг МКЯ, сформированных на Si(100), в диапазоне температур 600–700 °C приводит к изменению механизма фотолюминесценции (ФЛ). В отсутствие отжига образцы демонстрируют сигнал ФЛ в диапазоне 1,3–4 мкм. Данный сигнал ФЛ обусловлен наличием в структуре вакансионных комплексов, поскольку максимум излучения не смещается при изменении температуры и мощности накачки. После отжига образцов наблюдается межзонная ФЛ, связанная с переходами между подзоной тяжелых дырок в слое GeSiSn и X-долиной в кремнии. Усиление интегрального сигнала ФЛ в несколько раз обнаружено в структуре с МКЯ, полученной на фасетированной поверхности. Анализ карты обратного пространства такой структуры продемонстрировал искривление плоского фронта роста (001) в пределах грани (113) при осаждении слоев МКЯ. Установлены закономерности формирования наноструктур GeSn на поверхности МКЯ GeSiSn/Si при различных температурах и скоростях осаждения с применением фасетированной поверхности.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. А. Тимофеев

УДК 538.9

Моделирование процессов рекомбинации зарядов в перовскитных пленках

А. В. Снегирев

Новосибирский государственный университет
Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск

Металгалогенидные перовскиты — относительно новый и быстро развивающийся класс полупроводниковых материалов. Они легко получаемы и проявляют необычные фотоэлектрические свойства, в связи с чем перспективным выглядит их применение в фотоэлектрических приборах, например в солнечных батареях [1].

В связи с этим становится важным понимание процессов, происходящих в перовскитах при облучении светом, в частности динамика носителей зарядов (электронов и дырок). Эти знания позволят предсказать эффективность полупроводника при его использовании в той или иной ситуации.

В данной работе для описания процессов рекомбинации зарядов применена расширенная модель Шокли — Рида — Холла, включающая процессы третьего порядка, Оже-процессы [2]. Обработаны результаты измерения квантового выхода фотолюминесценции для серии нестехиометрических образцов иодида метиламмоний свинца с различным содержанием иода ($CH_3NH_3PbI_{2,98-3,06}$), подобраны параметры модели, наилучшим образом описывающие экспериментальные данные.

1. Jena A., Kulkarni A., Miyasaka T. Halide Perovskite Photovoltaics: Background, Status, and Future Prospects // Chem. Rev. 2019. Vol. 119. P. 3036–3103.
2. Kiligaridis A., Frantsuzov P., Yangui A. et al. Are Shockley-Read-Hall and ABC models valid for lead halide perovskites? // Nature Commun. 2021. Vol. 12. P. 3329.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук П. А. Французов

УДК 538.9

Спиновая аккумуляция в структуре ферромагнетик/диэлектрик/полупроводник

Н. А. Соколов

Новосибирский государственный университет

Сегодня в физике конденсированного состояния особый интерес представляет изучение спин-зависимых явлений в различных полупроводниковых структурах [1, 2]. Такие объекты потенциально могут быть использованы для регистрации спиновой поляризации электронов, и можно найти им применение в спинтронных устройствах.

В данной работе исследовались фотодиодные МДП-структуры, в которых в качестве металла использовались ферромагнитные слои [Co(0.5nm)/Pt(1nm)]×n с перпендикулярной анизотропией намагниченности, в качестве диэлектрика — естественный оксид GaAs и слои ALD Al_2O_3, а в качестве полупроводника — МЛЭ гетероструктура 100нм i-GaAs/p^+-GaAs(100). Ожидалось, что в таких структурах при возбуждении поляризованных по спину электронов посредством оптической ориентации возможно наблюдение спиновой аккумуляции и спин-зависимого фототока [1].

Изучались спектры фототока и поляризованной фотолюминесценции при возбуждении циркулярно-поляризованными фотонами в зависимости от направления намагниченности ферромагнитной пленки при комнатной и азотной температурах. Основной задачей являлось разделения эффектов, связанных со спиновой аккумуляцией (СА) и магнитооптическим дихроизмом (МОД) в измеренных величинах.

Величина МОД определена из измерений спектральных коэффициентов прохождения и отражения света, а СА — из измерений фототока и фотолюминесценции с учетом полученных ранее значений МОД. Обнаружено, что в исследуемых структурах величина МОД составляет ~ 1 % и эффект МОД вносит основной вклад в наблюдаемые изменения величины фототока. Кроме того, как и ожидалось, с ростом числа слоев ферромагнетика наблюдался рост величины МОД по 0,5 % за слой.

1. Steinmuller S. J. et al. Separation of Electron Spin Filtering and Magnetic Circular Dichroism Effects in Photoexcitation Studies of Hybrid Ferromagnet/Gaas Schottky Barrier Structures // Phys. Rev. B. 2005. Т. 72, № 4. С. 045301.
2. Kurebayashi H. et al. Initial/Final State Selection of the Spin Polarization in Electron Tunneling Across an Epitaxial Fe/Ga As (001) Interface // Appl. Phys. Lett. 2007. Т. 91, № 10. С. 102114.

Научные руководители — В. А. Голяшов, д-р физ.-мат. наук О. Е. Терещенко

УДК 531-2

Электросопротивление графена при взаимодействии с водой

Д. В. Сорокин [1,2], Е. В. Бойко [3]

[1] Новосибирский государственный университет
[2] Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
[3] Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Графен характеризуется широким спектром уникальных электрических, механических и химических свойств, что делает его очень перспективным материалом во многих отраслях. Одной из областей применения графена может стать его использование в качестве гидродинамических датчиков, для исследования потоков в микроканальных системах. Например, в статье [1] обсуждается применение графена в качестве датчика расхода. Результаты показывают линейную зависимость между напряжением, индуцированным на графеновом слое, и скоростью потока воды. Однако авторами работы не рассматривается изменение свойств графена при погружении в воду и движении воды вдоль его поверхности.

Настоящая работа посвящена изучению сопротивления графена, полученного методом химического осаждения из газовой фазы, при погружении в воду. Условия синтеза графена и подготовка образцов ПЭТ/ЭВА-графен описаны в [2]. Показано, что при погружении графенового листа в воду происходит резкое увеличение электрического сопротивления с последующим плавным достижением стационарного значения. Из температурной зависимости удельного электрического сопротивления показано, что при контакте с водой графен ведет себя как полупроводник. Полученные температурные зависимости использованы для оценки ширины запрещенной зоны. В результате моделирования методом молекулярной динамики показано, что вблизи поверхности графена происходит структурирование молекул воды, что приводит к возникновению тангенциальных электрических полей, изменяющих ширину запрещенной зоны в графене. Увеличение ширины запрещенной зоны в графене приводит к росту его сопротивления.

1. Kowalski A. et al. Development of Graphene Based Flow Sensor // J. Autom. Mobile Rob. Intell. Syst. 2015. Т. 9, № 4. С. 55–57.
2. Kostogrud I. A., Boyko E. V., Smovzh D. V. The Main Sources of Graphene Damage at Transfer from Copper to PET/EVA Polymer // Mater. Chem. Phys. 2018. Т. 219. С. 67–73.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. В. Смовж

УДК 53.096

Сегнетоэлектрический гистерезис в тонкопленочных структурах $HfZrO_2$ с металлическими и полупроводниковыми электродами

К. А. Толмачев

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Сегнетоэлектрические тонкопленочные материалы используются в энергонезависимой памяти и других приложениях, основанных на способности сегнетоэлектриков переключать свою электрическую поляризацию в ответ на приложенные электрические поля. При исследовании термостабильности сегнетоэлектрических свойств нанослоев оксидов гафния-циркония с алюминием, полученных методом атомно-слоевого осаждения, подтверждено предположение об увеличении термостабильности структур с металлическими электродами TiN за счет легирования оксидом алюминия. Однако величина полученных значений поляризации в образцах оказалась значительно меньше литературных результатов: ~ 1 мкКл/см^2 против 10 мкКл/см^2. Целью данной работы является установление причины малости полученных значений и создание структур с большими значениями поляризации.

Способ измерения величины поляризации отличался от способов, описанных в литературе, фактически измерялась структура «металл — сегнетоэлектрик — полупроводник» (MFS) с областью пространственного заряда (ОПЗ) в последнем, а не «металл — сегнетоэлектрик — металл» (MFM). Для проверки предположения о влиянии способа измерения на полученные результаты и разделения вкладов от поверхностных состояний, фиксированного, поляризационного и заряда в ОПЗ были проведены экспериментальные исследования вольт-фарадных характеристик структур с металлическими электродами. Вольт-фарадные характеристики измерены при различных температурах и частотах переменной составляющей напряжения, подаваемого на затвор образцов. В качестве сегнетоэлектрических слоев выступали $HZAO_2$ 5:5:1 и HAO_2 10:1, а в качестве металлического электрода — InGa.

Из проведенных измерений выявлено изменение направления гистерезиса с увеличением температуры. Для объяснения полученных зависимостей сформирована модель эквивалентной измеряемой схемы с учетом вклада емкости ОПЗ, емкости поверхностных состояний, а также влияния паразитных сопротивлений. Проведены обработка и анализ полученных результатов в соответствии с предложенной моделью.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук В. П. Попов

УДК 538.9

Осцилляции Шубникова – де Гааза в квантовой яме CdHgTe сверхкритической ширины

Д. В. Тульский

Новосибирский государственный университет

Квантовые ямы на основе CdHgTe находятся в центре внимания физики конденсированного состояния благодаря их уникальному электронному спектру. В зависимости от толщины ямы этот спектр может соответствовать двумерному или трехмерному топологическому изолятору, двумерному полуметаллу или системе однодолинных дираковских фермионов с линейным законом дисперсии. Объектом исследования в работе выступает квантовая яма $Cd_{0,06}Hg_{0,94}Te$ толщиной 11,5 нм. Образцы представляли собой десятиконтактные холловские мостики, оснащенные затвором. В недавней работе [1] было показано, что указанная яма относится к классу высококачественных двумерных топологических изоляторов, но при этом характеризуется малой величиной энергетической щели (несколько мегаэлектронвольт). Поэтому ее поведение в электронной области должно быть близко к поведению системы двумерных дираковских фермионов, а спектр — к линейному. Целью работы является экспериментальное восстановление электронного спектра квантовой ямы $Cd_{0,06}Hg_{0,94}Te$. Для этого были проведены эксперименты по изучению температурной зависимости осцилляций Шубникова — де Гааза (ШдГ) в магнитных полях от 0,5 до 5 Тл со средним шагом в 0,5 Тл в широком температурном диапазоне от 80 мК до 30 К и с плавным изменением затворного напряжения в электронной области. Для проведения экспериментов была разработана 4-точечная схема измерений магнетотранспортного отклика образца на основе технологии синхронного детектирования. К образцу в криостате растворения $^3He/^4He$ прикладывалось напряжение постоянной амплитуды и измерялось падение напряжения на интересующем участке образца и протекающий через образец полный ток. В ходе анализа и обработки экспериментальных данных найдены зависимости коэффициента температурного затухания рассматриваемых ШдГ [2], соответствующая им эффективная электронная масса, g-фактор зеемановского расщепления, а также восстановлен электронный спектр исследуемой системы.

1. Рыжков М. С. Транспортные свойства дираковских фермионов в квантовых ямах на основе CdHgTe критической толщины // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т. 4 (115).
2. Thomas Ihn. Semiconductor Nanostructures: Quantum States and Electronic Transport. Oxford University Press, 2010.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. А. Козлов

УДК 537.312.6

Электронный транспорт в композитах на основе полибензимидазола с одностенными углеродными нанотрубками

А. А. Федоров

Новосибирский государственный технический университет
Институт неорганической химии
им. А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск

В последние десятилетия огромный интерес для исследователей представляют полимерные композиционные материалы (ПКМ), поскольку они обладают совокупностью функциональных свойств, отличных от свойств классических материалов. Спектр применения ПКМ очень широк. В частности, настоящая работа выполнена в рамках исследований таких материалов для высокотемпературной электроники, где одним из основных направлений фундаментальных исследований является изучение механизмов электронного транспорта, зарекомендовавшим методом определения которых является анализ температурных зависимостей электросопротивления.

Одной из перспективных полимерных матриц композитов для высокотемпературных применений является полибензимидазол благодаря его выдающимся термомеханическим свойствам. Для использования полибензимидазола в электронике в его матрицу необходимо внедрить электропроводящую фазу. В качестве электропроводящей фазы в рамках настоящей работы были использованы одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ).

В качестве экспериментальных образцов использованы полимерные композиты на основе полибензимидазола с концентрацией ОУНТ 1, 2 и 3 % (масс.). Измерены и проанализированы температурные зависимости электросопротивления при температурах от 4,2 до 573 К. Низкотемпературные измерения осуществлялись в транспортном сосуде Дьюара с жидким гелием, высокотемпературные — в печи в условиях высокого вакуума.

В работе проведен анализ изменения характера кривых $R(T)$ в зависимости от концентрации электропроводящей фазы — увеличение массовой концентрации нанотрубок в композитах приводит к уменьшению наклона зависимостей $R(T)$, что может свидетельствовать об увеличении вклада в электропроводность металлических ОУНТ.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 21-79-00224, https://rscf.ru/project/21-79-00224/.

Научный руководитель — канд. техн. наук В. А. Кузнецов

УДК 538.935

Двумерный андерсоновский топологический изолятор

Д. А. Худайбердиев

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Двумерный топологический изолятор (2Д ТИ) — это состояние с непроводящим двумерным объемом и проводящими геликоидальными краевыми каналами. Обычно для наблюдения такого состояния необходима положительная щель в спектре объемных электронных состояний, которая позволяет наблюдать краевые состояния 2Д ТИ вследствие отсутствия шунтирующего объема при нахождении уровня Ферми непосредственно в щели.

В данной работе представлена реализация двумерного топологического изолятора в изначально полуметаллической системе с отрицательной щелью. В работе [1] показано, что для сильно разупорядоченной квантовой ямы на основе HgTe (013) толщиной 14 нм при высоких температурах реализуется полуметаллическое состояние, при котором одновременно сосуществуют электроны и дырки, а при понижении температуры, вследствие большой величины беспорядка, локализуются сначала дырки, а затем и электроны по механизму Андерсона. Также известно, что для квантовых ям HgTe с толщиной больше критической (6,3 нм) должны присутствовать краевые состояния 2Д ТИ, существование которых даже при перекрытии зон подтверждается данной работой.

Измерены затворные зависимости локального и нелокального сопротивлений при различных температурах (от 80 мК до 10 К) и магнитных полях (до 5 Тл). При температурах ниже 0,5 К система демонстрирует типичное поведение для 2Д ТИ с большим нелокальным откликом. В небольших магнитных полях (до 20 мТл) происходит ослабление топологической защиты, как в работе [2], а в магнитном поле около 0,5 Тл наблюдается фазовый переход «изолятор — квантово-холловская жидкость».

1. Квон З. Д. и др. Андерсоновская локализация в двумерной электронно-дырочной системе // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 114, № 6. С. 377–382.
2. Piatrusha S. U. et al. Topological Protection Brought to Light by the Time-Reversal Symmetry Breaking // Phys. Rev. Lett. 2019. Vol. 123. P. 056801.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. Л. Савченко

УДК 538.958

Формирование нанокристаллов и аморфных нанокластеров германия в пленках $GeSiO_x$ с использованием электронно-пучкового отжига

Чжан Фань

Новосибирский государственный университет

Диэлектрические пленки, содержащие аморфные нанокластеры и нанокристаллы германия (NC-Ge), интересны с фундаментальной точки зрения, а также перспективны для нано- и оптоэлектроники. В представленной работе для формирования аморфных и кристаллических кластеров германия в пленках GeO[SiO] и GeO[SiO_2], осажденных на подложках из кварца и c-Si (100), были впервые использованы электронно-пучковые отжиги.

Наличие и фазовый состав нанокластеров германия в пленках исследован с применением метода спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Из анализа спектров КРС показано, что аморфные нанокластеры германия присутствуют в исходной пленке GeO[SiO], а в исходной пленке GeO[SiO_2] они не наблюдаются. Впервые обнаружено, что использование электронно-пучкового отжига приводит к формированию аморфных и кристаллических нанокластеров германия в пленках $GeSiO_x$. Обнаружено, что при одинаковых параметрах отжига доля кристаллической фазы германия в пленках GeO[SiO] меньше, чем в пленках GeO[SiO_2]. Также обнаружено, что доля кристаллической фазы при одинаковых параметрах отжига больше для пленок на подложках кварца, чем на подложках кремния. Из анализа спектров КРС были определены размеры нанокристаллов германия, сформированных электронно-пучковыми отжигами. Предложенный способ получения аморфных нанокластеров и нанокристаллов германия в пленках нестехиометрических германосиликатных стекол с использованием электронно-пучкового отжига может быть использован для создания их упорядоченных массивов.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. А. Володин

УДК 538.9

Исследование органических полевых транзисторов на основе фуран-фениленов

Н. А. Шумилов

Новосибирский государственный университет
Новосибирский институт органической химии
им. Н. Н. Ворожцова СО РАН

Одной из актуальных проблем в органической электронике является исследование влияния структуры материала на его функциональные свойства. Один из наиболее эффективных подходов для настройки кристаллической решетки и оптоэлектронных характеристик органических полупроводников на основе линейных сопряженных малых молекул — введение заместителей в различные положения молекул. Фуран-фениленовые соолигомеры являются одними из наиболее перспективных в электронике органических светоизлучающих полупроводников, которые сочетают высокую подвижность зарядов, люминесценцию и растворимость.

В данной работе проведено экспериментальное исследование транспорта зарядов в кристаллах 1,4-бис(5-фенилфуран-2-ил)бензол (FP5) и его аналогов с фторными заместителями в центральном кольце в FP_F5; в терминальных кольцах с 5 фторами в F5-FP5; с фторными заместителями в центральном кольце и с 1 фтором в F1-FP_F5, с 2 фторами в F2-FP_F5 и с 5 фторами в F5-FP_F5 в терминальных кольцах. Для этого был использован метод органических полевых транзисторов (ОПТ). Выращены кристаллы данных соединений, а на их основе изготовлены и исследованы ОПТ с верхним затвором и верхними электродами. В результате средние значения подвижности дырок и порогового напряжения для соединений FP5, FP_F5, F1-FP_F5 и F2-FP_F5 составляют 0,08; 0,064; 0,033 и 0,001 $см^2$/Вс и −12; −35; −54 и −70,5 В соответственно. Для соединения F2-FP_F5 обнаружен электронный транспорт зарядов, где среднее значение подвижности электронов составляет 0,011 $см^2$/Вс, а пороговое напряжение — 68,2 В. ОПТ на основе F5-FP5 и F5-FP_F5 не проявляли полевого эффекта. Таким образом, с увеличением числа фторных заместителей уменьшается дырочная подвижность и увеличивается пороговое напряжение. Это связано с ухудшением инжекции дырок из-за снижения уровней энергий ВЗМО и НВМО и с наличием поверхностно-дипольного эффекта сильных электроноакцепторных заместителей (атомов фтора). Селективное введение фторных заместителей является эффективной стратегией сохранения эффективного переноса дырок и индуцирования переноса электронов в фуран-фениленовых монокристаллах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 20-73-10090).

Научный руководитель — канд. хим. наук М. С. Казанцев

УДК 538.9

Изучение циркулярно-поляризованной фото- и катодолюминесценции в мультищелочном фотокатоде

Т. А. Щудро

Новосибирский государственный университет

В настоящее время одной из актуальных задач в физике полупроводников является создание детекторов и источников спин-поляризованных электронов, которые находят применение в ускорителях частиц. В последнее время широко используются и изучаются источники спин-поляризованных электронов, изготовленные из материалов A^3B^5. Такие источники позволяют получить высокую поляризацию пучка, однако более сложны в изготовлении по сравнению с фотокатодами на основе антимонидов щелочных металлов. Несмотря на наличие исследований электронной и зонной структуры таких фотокатодов [1], работ по изучению фотоэмиссии спин-поляризованных электронов из таких фотокатодов не найдено.

В данной работе изучается циркулярно-поляризованная фото- и катодолюминесценция (ФЛ и КЛ соответственно) в мультищелочном фотокатоде на основе Na_2KSb. Для изучения циркулярно-поляризованной ФЛ и КЛ разработана оптическая схема, а также изготовлены плоскопараллельные вакуумные фотодиоды с фотокатодами на основе Na_2KSb и GaAs и с анодом из AlGaAs. Ранее на примере фотодиодов с гетероструктурами A^3B^5 было показано, что такая конструкция удобна для изучения эмиссионных и инжекционных свойств материалов [2].

В ходе исследования данных фотокатодов измерена степень поляризации ФЛ, которая составила 15 % для GaAs и 21 % для Na_2KSb при энергии возбуждающего излучения, равной 1,5 эВ при комнатной температуре. Обнаружение поляризованной ФЛ в мультищелочном фотокатоде, связанной с эффектом оптической ориентации, позволило предположить возможность эмиссии спин-поляризованных электронов в вакуум. Измерена степень поляризации катодолюминесценции в гетероструктуре AlGaAs при инжекции спин-поляризованных электронов из мультищелочного фотокатода. Получена зависимость степени поляризации КЛ от ускоряющего напряжения (0–3 В).

1. Amador R., Saßnick H. D., Cocchi C. Electronic Structure and Optical Properties of Na2KSb and Nak2sb from First-Principles Many-Body Theory // J. Phys.: Condens. Matter. 2021. Т. 33, № 36. С. 365502.
2. Golyashov V. A. et al. Spectral Detection of Spin-Polarized Ultra Low-Energy Electrons in Semiconductor Heterostructures // Ultramicroscopy. 2020. Т. 218. С. 113076.

Научный руководитель — В. С. Русецкий

УДК 519.6, 537.3

Многопараметрическая оптимизация алгоритма обработки экспериментальных данных транспортных измерений

М. У. Эшкулов

Новосибирский государственный университет

В современных приборах полупроводниковой электроники активно используются тонкие диэлектрические слои. Несмотря на основную роль диэлектриков в электрической изоляции элементов друг от друга, реальные материалы проводят ток. В диэлектриках транспорт осуществляется через ловушки — дефекты в атомной структуре с локализованными состояниями в запрещенной зоне. Недавно было показано, что механизмами транспорта заряда в диэлектрических являются многофононные процессы ионизации нейтральных ловушек [1] и фонон-облегченного туннелирования между ловушками [2]. Эти модели опираются на большое количество параметров ловушек, а моделирование вольт-амперных характеристик с привлечением этих моделей является многопараметрической задачей оптимизации. На текущий момент сравнение расчетных зависимостей с экспериментальными данными происходит путем ручного подбора значений всех параметров, что усложняет процедуру определения значений параметров ловушек в диэлектриках.

Целью работы является разработка программного комплекса для определения параметров используемых моделей транспорта в диэлектриках путем подгонки расчетных зависимостей к экспериментальным данным.

Входными данными являются массивы (F, T, J), где F — электрическое поле в диэлектрике, T — температура, J — плотность тока, определяемые из экспериментальных измерений. Параметрами модели фонон-облегченного туннелирования между ловушками являются: a — среднее расстояние между ловушками, m^* — эффективная масса носителя заряда, W_t — термическая энергия ловушки, W_{opt} — оптическая энергия ловушки. Приближение расчетных зависимостей к экспериментальным осуществляется путем минимизации среднеквадратичного отклонения по всему набору входных данных. Процедура поиска минимума основана на методе градиентного спуска, поэтому за один шаг приближения происходит оптимизация значений всех параметров модели.

1. Makram-Ebeid S., Lannoo M. Quantum Model for Phonon-Assisted Tunnel Ionization of Deep Levels in a Semiconductor // Phys. Rev. B. 1982. Vol. 25, iss. 10. P. 6406–6424.

2. Насыров К. А., Гриценко В. А. Перенос заряда в диэлектриках туннелированием между ловушками // ЖЭТФ. 2011. Т. 139, вып. 6. С. 1172–1181.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. Р. Исламов

УДК 538.9

Светочувствительные мемристоры на основе пленок $GeSi_xO_y$ с нанокластерами германия

И. Д. Юшков

Новосибирский государственный университет

Для хранения и обработки больших массивов информации нужны новые элементы памяти. Мемристоры — перспективные кандидаты для создания памяти будущего. Недавно показаны возможности использования мемристоров в оптоэлектронике. Мемристорный эффект — это обратимые переключения между состояниями с высоким (HRS) и низким (LRS) сопротивлениями.

Преимущество германосиликатных стекол ($Si_xGe_yO_z$) состоит в том, что способ их осаждения прост, недорог и совместим с кремниевой технологией. Их особенностями являются возможности наноразмерных флуктуаций потенциала. Различие в щели состояний SiO_2 (8–9 эВ) и GeO_2 (4–5 эВ) позволяет модулировать параметры ловушек следующего типа — включение оксидов германия в оксид кремния. Другая возможность — формирование областей с избытком атомов Ge, а также их аморфных нанокластеров и нанокристаллов.

Исследуемые пленки $Si_xGe_yO_z$ (50 ÷ 80 нм) были получены путем испарения порошков GeO_2 и SiO_2 (или SiO) в вакууме (10^{-8} Торр) и осаждения на нагретый до 100 °C Si(001) *n*-типа и *p*-типа. Осаждены пленки различной стехиометрии: GeO[SiO_2] и GeO[SiO], а также GeO[SiO_2](30 нм)/a-Ge(3 нм). В качестве верхнего электрода использовался ITO. Структура образцов определена с помощью электронной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света. Темновые и световые вольт-амперные характеристики (ВАХ) были измерены при комнатной температуре в воздушной атмосфере.

Исходные пленки GeO[SiO] содержали аморфные нанокластеры Ge. Отжиг при температуре 500 °C привел к дальнейшему формированию кластеров a-Ge в GeO[SiO_2] и GeO[SiO]. Отжиг при температуре 600 °C в течение 30 мин вызвал частичное испарение пленок. Отжиг структур GeO[SiO_2]/a-Ge/Si при 600 °C 30 мин привел к образованию нанокристаллов германия.

Мемристорный эффект наблюдался для *p*-Si (или *n*-Si) / GeO[SiO_2] (или GeO[SiO])/ ITO. В отожженной МДП структуре с нанокластерами Ge наблюдалась как отрицательная, так и положительная фотопроводимость. Возможно, это связано с освобождением дырок из Ge-нанокластеров при освещении. Получен эффект влияния освещения на ВАХ МДП-структур и на резистивное переключение этих структур. Наблюдалось уменьшение напряжения переключения при освещении галогеновой лампой.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. А. Володин

ТЕПЛОФИЗИКА

Председатель секции — д-р физ.-мат. наук *Р. И. Мулляджанов*

Ответственный секретарь секции — *М. А. Клыкова*

Экспертный совет секции
канд. физ.-мат. наук *М. В. Шестаков*
канд. физ.-мат. наук *И. С. Вожаков*
канд. физ.-мат. наук *Д. Ф. Сиковский*

THERMOPHYSICS

Section head — Dr Phys.-Math. Sci. *R. I. Mullyadzhanov*

Section Responsible Secretary — *M. A. Klykova*

Section scientific committee
Cand. Phys.-Math. Sci. *M. V. Shestakov*
Cand. Phys.-Math. Sci. *I. S. Vozhakov*
Cand. Phys.-Math. Sci. *D. F. Sikovsky*

УДК 662.612.325+662.659

Горение фенола в водокислородном флюиде

С. А. Алехин

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный технический университет

Фенол является высокотоксичным веществом 2-го класса опасности. Он содержится в больших количествах в сточных водах и шламах предприятий, использующих фенол, например, в полимерной, лакокрасочной, нефтехимической промышленности [1]. Вследствие обводненности отходов, содержащих фенол, сжигание фенола в водокислородных флюидах (ВКФ) становится одним из наиболее экологически чистых и ресурсосберегающих методов [2].

Результаты исследования [2] показывают, что полное окисление фенола происходит только при избыточном количестве вводимого кислорода. Это определяет необходимость проведения окисления в присутствии окислителей и добавок, увеличивающих количество свободных радикалов. Цель данной работы — подбор оптимальных параметров окисления фенола в ВКФ.

Эксперименты проводились в горизонтально расположенном трубчатом реакторе. Реактор нагревался омическими нагревателями со скоростью 1 К/мин до 823 К. Регулирование температуры осуществлялось с помощью термопрограмматора и термопары на внешней стенке реактора. Температуру реакционной смеси измеряли Pt-Rh/Pt термопарой, а давление контролировали мембранным тензодатчиком. Состав и количество продуктов окисления определяли с помощью масс-спектрометра. В опытах изменяли содержание O_2 в реакционной смеси (от стехиометрического количества до 25 % избытка), проводили замещение 40 % фенола изопропанолом и 10 % стехиометрического O_2 закисью азота.

Анализ теплового эффекта, фиксируемого Pt-Rh/Pt термопарой, показывает, что окисление фенола в ВКФ происходит в основном гетерогенно в две стадии в интервале температур 200–450 °С. Увеличение количества кислорода и добавление изопропанола или N_2O приводит к росту скорости окисления. Анализ количества образовавшегося CO_2 показывает, что добавки O_2 и N_2O повышают полноту сжигания фенола.

1. Вигдорович В. И., Пудовкина А. Ю. Экологическая характеристика фенола, его миграция и очистка сточных вод, содержащих оксибензол // Вопр. соврем. науки и практики. Ун-т им. В. И. Вернадского. 2011. № 2. С. 45–51.
2. Gopalan S., Savage P. E. A reaction network model for phenol oxidation in supercritical water // AIChe J. 1995. Vol. 41, iss. 8. P. 1864–1873.

Научный руководитель — канд. хим. наук, доц. А. В. Шишкин

УДК 533.6

Численное исследование турбулентного потока над волнистой поверхностью

Ю. С. Апостол

Новосибирский государственный университет

Турбулентное течение над волнистыми поверхностями распространено как в природе, так и в различных отраслях промышленности. Таким течением, например, является поток воздуха над поверхностями рельефа, и он интересен в контексте моделирования распространения загрязняющих атмосферу веществ. Важными в течении над волнистой стенкой являются амплитуда и длина волны стенки, число Рейнольдса. При определенном соотношении амплитуды к длине волны течение переходит грань существования линейного отклика на возмущение.

Данные потоки исследовались с помощью экспериментов и численного моделирования. В ранних работах [1], хотя числа Рейнольдса предполагались большими, амплитудное отношение было малым, что позволяло рассматривать линейное приближение. В работах Зилкера [2] при $\frac{2a}{\lambda} > 0,033$ обнаруживаются обратные потоки, а при $\frac{a \cdot u^*}{v} \geq 27$ — нелинейное поведение. В работе Юна [3] при $\frac{2a}{\lambda} > 0,04$ обнаружен мгновенный рециркуляционный поток, при $\frac{2a}{\lambda} > 0,06$ он появляется в среднем поле скорости.

Цель настоящей работы — определение амплитудных пределов и выяснение роли числа Рейнольдса в применении линейной теории для описания течений над волнистой стенкой. Проведено численное исследование турбулентного течения над волнистой твердой стенкой с помощью открытого пакета OpenFOAM. Моделирование проводилось путем решения уравнений Навье — Стокса совместно с RANS-моделью турбулентности.

В результате расчетов получены профили скорости и значения касательных напряжений на волнистой поверхности в зависимости от числа Рейнольдса, амплитуды и длины возмущения. Показано, что при малых значениях амплитуды возмущения поверхности возмущения касательного напряжения линейны. При дальнейшем увеличении амплитуды наблюдаются сильные отклонения от синусоидальной формы, что в конечном итоге приводит к отрывным потокам.

1. Davis R. E. On prediction of the turbulent flow over a wavy boundary // J. Fluid Mech. 1972. Т. 52, № 2. С. 287–306.
2. Zilker D. P., Hanratty T. J. Influenceof the amplitude of a solid wavy wall on a turbulent flow. Part 2. Separated flows // J. Fluid Mech. 1979. Т. 90, № 2. С. 257–271.
3. Yoon H. S. et al. Effect of wave amplitude on turbulent flow in a wavy channel by direct numerical simulation // Ocean Eng. 2009. Т. 36, № 9–10. С. 697–707.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук И. С. Вожаков

УДК 536.246

Моделирование процесса конденсации вблизи слоя Кнудсена кинетическими методами

М. А. Батуева

Институт теплофизики им. С. С. КутателадзеСО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Для оптимизации размеров высокоэффективных охлаждающих устройств с микронными характерными размерами требуются новые фундаментальные знания о процессах с фазовыми переходами на микромасштабе. Ранее нами рассматривалась задача об испарении вблизи слоя Кнудсена [1]. Установлено хорошее согласие с результатами, полученными методами молекулярной динамики [2] для аргона.

Настоящая работа посвящена прямому численному моделированию процесса конденсации одноатомного газа на основе уравнений Больцмана. Сравниваются три разных подхода: моделирование по S-модели кинетических уравнений Больцмана, моделирование методами молекулярной динамики, а также рассматривается моментный метод. В частности, сравниваются данные, полученные в работе [2], и наши расчеты с помощью моментного метода и S-модели. Показано отличие между моделированием процесса испарения и конденсации. Построена модель на основе моментного метода для вычисления безразмерных параметров. Установлено хорошее согласие между результатами, полученными моментным методом, численным решением кинетического уравнения S-модели и данными, полученными методами молекулярной динамики.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-19-00722).

1. Graur I. A., Gatapova E. Ya., Wolf M., Batueva M. A. Non-equilibrium evaporation: 1D benchmark problem for single gas // Int. J. Heat Mass Transfer. 2021. Vol. 181. P. 121997.
2. Liang Z., Biben T., Keblinski P. Molecular simulation of steady-state evaporation and condensation: Validity of the schrage relationships // Int. J. Heat Mass Transfer. 2017. Vol. 114. P. 105–114.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Е. Я. Гатапова

УДК 539.232

Влияние термического отжига фторполимерных покрытий на их свойства и строение

А. Л. Богословцева

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Фторполимерные покрытия обладают привлекательными свойствами, такими как высокая гидрофобность, низкие коэффициенты трения, высокая химическая инертность, высокая биосовместимость. Благодаря этому фторполимерные покрытия позволяют значительно изменять свойства поверхности при нанесении на нее. Таким образом, покрытые материалы могут иметь более широкую область применения. Например, с помощью гидрофобных покрытий можно интенсифицировать теплообмен при фазовом переходе. Однако фторполимерные покрытия обладают относительно невысокой адгезией к поверхности. С помощью термического отжига покрытия можно улучшить его адгезию к поверхности, сохранив при этом гидрофобные свойства.

В данной работе гидрофобные фторполимерные покрытия были получены методом химического осаждения из газовой фазы, активированной горячей нитью (HW CVD). Этот метод позволяет получать покрытия с требуемыми свойствами путем изменения параметров осаждения. Далее часть образцов была отожжена при атмосферном давлении. После этого полученные покрытия были исследованы методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и инфракрасной спектроскопии. Для изучения гидрофобности были измерены краевые углы смачивания, а устойчивость покрытия исследована путем обработки в ультразвуковом очистителе. Показано, что после отжига меняется строение покрытия и свойства смачивания, но вместе с тем покрытие демонстрирует большую стабильность и устойчивость к внешнему воздействию.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-79-10119-П).

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. И. Сафонов

УДК 534.222.2+536.46+661.215.1

Возбуждение цилиндрической детонации за ослабевающими ударными волнами

А. А. Борискин

Новосибирский государственный университет

Для надежного возбуждения в горючей смеси волны низкоскоростного горения внешний инициатор должен «передать» смеси такое количество своей энергии, которого должно хватить не только на воспламенение смеси вблизи точки инициирования, но и для обеспечения дальнейшего распространения фронта пламени на весь объем смеси за счет энергии химического превращения исходных веществ в продукты горения. Традиционно эта энергия называется критической энергией воспламенения, и для большинства типичных углеводородных топлив она составляет величины на уровне миллиджоулей. Аналогично критической энергией инициирования детонации считается энергия внешнего инициатора, обеспечивающая сверхзвуковое распространение детонационной волны на весь объем смеси. Критическая энергия инициирования детонации на несколько порядков превышает критическую энергию воспламенения смеси. Эти критические энергии обеспечивают режимы самоподдерживающегося распространения волн горения или детонации с присущими этим процессам постоянными величинами скоростей. Значительный интерес представляет промежуточный случай, когда при относительно слабом инициаторе вначале смесь только воспламеняется, а затем за счет естественного или искусственного ускорения процесс разгоняется от низкоскоростного горения до околозвуковых значений, переводится на сверхзвук и затем может перейти на детонационный режим (переход горения в детонацию — ПГД). Проблема ПГД — одна из важнейших в современной науке о горении и детонации. Экспериментально ПГД наблюдался и исследовался в прямолинейных трубах. В расширяющихся волнах вопрос о возможности ПГД является дискуссионным до сих пор.

Цель данной работы — исследование возможности инициирования детонационного процесса именно в расходящихся волнах, скорость которых уменьшается по мере распространения. Искусственным инициатором при этом выступает препятствие, при натекании расходящейся волны на которое возникает за счет отражения область повышенного давления и температуры. Такая область представляет собой «горячую точку», способную резко ускорить скорость химической реакции и выступить как «дополнительный инициатор». Меняя положение препятствия, можно определить критические параметры, при которых наблюдается ПГД.

Научный руководитель — д-р мат. наук, проф. А. А. Васильев

УДК 544.032.6

Эволюция свойств смачивания текстурированных медных поверхностей при наносекундной лазерной обработке

М. М. Васильев

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Экстремальные свойства смачиваемости, в особенности супергидрофобные состояния, играют важную роль в различных приложениях, связанных с улучшением антикоррозийных и самоочищающихся свойств, теплообмена и т. д. [1] Известно, что смачивающие свойства определяются химическим составом и топологией поверхности. Одним из подходов, способных тонко контролировать оба этих параметра, является импульсная лазерная абляция (ИЛА). К преимуществам ИЛА относятся вариативность выбора обрабатываемого материала и гибкость в подборе параметров обработки [2].

Цель данной работы — экспериментальное исследование контролируемого изменения свойств смачивания меди методом наносекундной лазерной обработки в атмосфере. На медных поверхностях были изготовлены микро- и наноструктуры методом ИЛА, которые впоследствии выдерживались в воздухе. В дальнейшем исследовался процесс изменения свойств смачиваемости со временем. Замечено, что облученные медные образцы сразу после лазерного воздействия демонстрируют супергидрофильные состояния, а затем гидрофобизируются в течение месяца вплоть до супергидрофобных состояний, краевой угол которых составлял вплоть до 150°. Проведен анализ влияния параметров обработки на свойства смачивания. Найдено, что область перекрытия между пятнами лазерного воздействия играет важную роль в достижении супергидрофобных состояний.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-79-10119).

1. Chun D. M. et al. Fabrication of transparent superhydrophobic surface on thermoplastic polymer using laser beam machining and compression molding for mass production // CIRP Ann. 2014. Т. 63, № 1. С. 525–528.
2. Starinskiy S. V., Shukhov Y. G., Bulgakov A. V. Laser-induced damage thresholds of gold, silver and their alloys in air and water // Appl. Surf. Sci. 2017. Т. 396. С. 1765–1774.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук С. В. Старинский

УДК 532.5:517.984

Прямое преобразование в уравнениях Кортевега – де Фриза: аномальные ошибки

А. С. Гудько

Новосибирский государственный университет
Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Уравнение Кортевега — де Фриза является интегрируемым уравнением, которое описывает волны на поверхности неглубокого слоя жидкости. Метод прямого преобразования рассеяния представляет собой одно из наиболее ярких достижений математической физики прошлого века, позволяющее по известному волновому профилю интегрируемого уравнения в некоторый момент времени определить данные рассеяния, которые далее изменяются во времени достаточно тривиальным образом [1].

В этой работе рассматриваются N — солитонные волновые поля, показывая, что во многих случаях положения солитонов не могут быть верно определены с использованием стандартной арифметики машинной точности. Теоретический анализ метода одевания позволил выявить природу аномальных численных ошибок, растущих экспоненциально с увеличением вычислительной области L при наличии небольшой неопределенности в собственных значениях солитонов. Совместно с ошибкой дискретизации определение полного спектра данных рассеяния становится невозможным стандартными численными алгоритмами. Мы показываем, что процедура прямого преобразования с использованием численного метода 6-го порядка точности, основанная на разложении Магнуса [2,3], совместно с применением высокоточной арифметики устойчива даже при наличии шума, открывая широкие перспективы для анализа полей произвольной сложности, а также экспериментальных данных по распространению поверхностных волн на мелководье.

1. Захаров В. Е., Манаков С. В., Новиков С. П., Питаевский Л. П. Теория солитонов: метод обратной задачи. М.: Наука, 1980.
2. Mullyadzhanov R., Gelash A. Direct scattering transform of large wave packets // Opt. Lett. 2019. Т. 44, № 21. P. 5298–5301.
3. Gudko A., Gelash A., Mullyadzhanov R. High-order numerical method for scattering data of the Korteweg — De Vries equation // J. Phys.: Conf. Ser. IOP Publishing, 2020. Т. 1677, № 1. С. 012011.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Р. И. Муллядженов

УДК 532.5.032, 537.31

Сопоставление реологии наножидкостей с одностенными и многостенными углеродными нанотрубками

Г. Р. Дашапилов

Новосибирский государственный университет

Углеродные нанотрубки (УНТ), ввиду их уникальных механических, оптических и теплофизических свойств, активно используются для модификации материалов. Для внедрения их в матрицу материала удобнее применять их в виде наножидкостей. Естественно, сами наножидкости могут найти широкое применение в различных теплофизических, биомедицинских и других приложениях. По этой причине актуально систематическое изучение наножидкостей с УНТ. Одной из главных задач в этой связи является изучение реологии и микрореологии наножидкостей с УНТ. Такое изучение должно сопровождаться систематической характеризацией наножидкостей, в частности определением размеров УНТ.

В данной работе систематически изучены реология и вязкость наножидкостей на основе этиленгликоля и воды с одностенными (ОУНТ) и многостенными (МУНТ) углеродными нанотрубками. Массовая концентрация УНТ варьировалась от 0,05 до 0,2 %. Измерение вязкости проводилось на ротационных вискозиметрах Brookfield DV-2T и DV-3T. Установлено, что при всех концентрациях наножидкости с ОУНТ являются неньютоновскими, тогда как часть наножидкостей с МУНТ остаются ньютоновскими. Вязкость во всех случаях растет с ростом концентрации УНТ. Реология наножидкостей описывалась моделями степенной жидкости и Хершеля — Балкли для псевдо- и вязкопластичных жидкостей, были построены соответствующие аппроксимации. Показано, что наножидкости с МУНТ имеют существенно меньшую вязкость, чем с ОУНТ, и объясняется причина этого. Изучено влияние на реологию наножидкостей температуры.

Параллельно во всех случаях методом динамического рассеяния света (ДРС) на приборе Zetasizer ZSP Nano изучены распределения УНТ по размерам и определены соответствующие коэффициенты диффузии.

В последней части работы представлены данные изучения микрореологии наножидкостей (использовался прибор Rheolaser Master). Показано, что наножидкости проявляют вязкоупругие свойства, это связано с тем, что УНТ формируют сетчатую структуру внутри объема жидкости, обусловленную их перколяцией.

Работа выполнена при частичном финансировании Российского научного фонда (проект № 20-19-00043)

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. Я. Рудяк

УДК 532.5

Моделирование процесса распыла струи из центробежной форсунки методом жидких объемов

М. О. Жерибор

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Распыл и атомизация топлива являются необходимыми фазами в работе камер сгорания, от которых существенно зависит эффективность данных устройств. При конструировании камер сгорания необходимо добиться максимального увеличения площади межфазной границы в процессе распыла для обеспечения наиболее интенсивного испарения. Для исследования процессов образования и распада капель хорошо подходит трехмерное численное моделирование, позволяющее получать детальную информацию о структуре потока и его динамике в процессе распыла.

В данной работе проведено моделирование процесса распада струи жидкости, истекающей из центробежной форсунки, методом жидких объемов (*Volume Of Fluid*, VOF [1]) в трехмерной постановке. Метод жидких объемов основан на введении эволюционного уравнения для переменной f, равной доле объема вычислительной ячейки, занятой жидкостью. При этом изоповерхность данной переменной ($f = 0{,}5$) принимается за межфазную границу. Для вычисления силы поверхностного натяжения используется вычисление градиента f на границе. Для расчетов использовался пакет с открытым исходным кодом Basilisk (www.basilisk.fr). В данном пакете применяется динамическое сгущение сетки путем иерархического разбиения ячеек в два раза, что позволяет существенно сэкономить вычислительные ресурсы.

Для учета геометрии форсунки использовался метод вмороженных границ (*Immersed Boundary*), для работы которого была написана функция расчета расстояния до 3D-модели форсунки на основе разбиения поверхности на треугольники.

В результате было рассчитано истечение струи жидкости из центробежной форсунки (соотношение окружной и продольной скоростей 0,5, число Рейнольдса 12 000, число Вебера 14 000). Из-за закрутки струя превращалась в пленку жидкости в виде конуса, которая затем распадалась на отдельные капли. Получена статистика распределения капель по размерам, а также средние поля скорости и объемной доли жидкости в течении.

1. Pairetti C. I. et al. Mesh resolution effects on primary atomization simulations // Atomization Sprays. 2020. Т. 30, № 12.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. М. Ю. Хребтов

УДК 532.59

Развитие газожидкостных течений в горизонтальных трубах

С. А. Здорников

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Газожидкостные течения в горизонтальных трубах находят свое применение в теплообменниках, системах охлаждения, нефтегазовой промышленности. В зависимости от расходов жидкости и газа реализуются различные режимы течения, отличающиеся волновой структурой. При переходе от стратифицированного режима течения к кольцевому происходит подъем жидкости по стенкам канала. Существует три группы гипотез, которые описывают механизм такого поднятия: внутренние течения в газе, перенос капель и волновые процессы.

В данной работе методом визуального наблюдения выявлены и изучены режимы течения в области перехода «стратифицированный — кольцевой водо-воздушные потоки» со скоростями газа 10–35 м/с и числами Рейнольдса жидкости 60–400 в горизонтальной трубке внутренним диаметром 20 мм [1]. В исследуемой области наблюдается три режима: стратифицированный, переходный, кольцевой. Установлено, что на расстоянии 30 диаметров от входа в канал течение стабилизируется. При достаточных расходах жидкости и газа стратифицированное течение преобразуется в кольцевое. Область переходного режима содержит в себе два подрежима: полукольцевой поток, характеризующийся подъемом жидкости за счет вторичных течений в газовой фазе, и волновой поток, поднятие жидкости в котором связано с забрасыванием волн на стенки трубки. Определено, что замыкание жидкости в кольцо обуславливается в основном вторичными течениями в газе: так как стекание жидкости под действием гравитации приводит к разрыву жидкой пленки и наблюдается только временное смачивание вершины канала, то распространения волн вдоль стенок трубки недостаточно для образования замкнутой пленки. Построена режимная карта и проведено ее сравнение с теоретической моделью, предложенной Тейтелем и Даклером [2]. Обработаны полученные в эксперименте изображения, по фоновым линиям вычислена локальная мгновенная высота поднятия жидкости с учетом оптических искажений на стеклянной трубке. По этим данным получены среднее значение высоты и ее среднеквадратичное отклонение. Предложен способ распознавать режимы на основании средней высоты и ее вариации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 19-79-30075).

1. Cherdantsev A. V. et al. Stratified-to-Annular Gas-Liquid Flow Patterns Transition in a Horizontal Pipe // Exp. Thermal Fluid Sci. 2022. Vol. 132. P. 110552.
2. Taitel Y., Dukler A. E. A Model for Predicting Flow Regime Transitions in Horizontal and Near Horizontal Gas-Liquid Flow // AIChE J. 1976. Vol. 22. P. 47–55.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук А. В. Черданцев

УДК 532.5.073

Разработка схемы и ультразвукового генератора для борьбы с обледенением

К. С. Зубанов [1], М. Р. Гордиенко [2], С. В. Какаулин [2]

[1] Новосибирский государственный университет
[2] Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Работа направлена на поиск новых методов борьбы с обледенением. Обледенение частей летательных аппаратов, ветрогенераторов и элементов строительных конструкций является огромной проблемой в технике. Основной способ борьбы с обледенением — нагрев поверхности, на которой образуется обледенение. Однако этот метод крайне энергозатратен и не может применяться в ряде случаев.

В работе предлагается использовать ультразвуковой метод в совокупности с применением супергидрофобных покрытий. Ультразвуковой метод создает интенсивные касательные напряжения в области ультразвукового генератора, которые интенсивно разрушают наледь. Кроме того, ультразвуковой генератор нагревает поверхность, что тоже вносит вклад в борьбу с обледенением. В [1] описан обзор работ по обледенению и различных методик, которые используются в данной работе. Важные формулы, с помощью которых измеряются разные параметры обледенения, были взяты из [2].

В ходе эксперимента было выявлено, что ультразвуковой генератор является эффективным средством для борьбы с обледенением. Сдвиговые напряжения от ультразвукового генератора сбрасывают основную массу льда. Оставшаяся часть оттаивает под действием разогрева ультразвукового излучателя. Применение супергидрофобных покрытий позволяет более эффективно удалять лед и остаточную влагу с поверхности генератора.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-19-00205).

1. Kabardin I., Dvoynishnikov S., Gordienko M. et al. Optical Methods for Measuring Icing of Wind Turbine Blades // Energies. 2021. Vol. 14, № 20. P. 6485.
2. Zhenjun Wang Recent progress on ultrasonic de-icing technique used for wind power generation, high-voltage transmission line and aircraft // Energ. Buildings. 2017. Vol. 140. P. 42–49.

Научный руководитель — канд. техн. наук И. К. Кабардин

УДК 532.5.073

Разработка микроволнового датчика для диагностики обледенения

Д. В. Касьянов [1], М. Р. Гордиенко [2], С. В. Какаулин [2]

[1] Новосибирский государственный университет
[2] Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Развитие ветроэнергетики в Арктике привело к увеличению количества ветряных турбин в холодных климатических зонах. Проблемой эксплуатации ветряных турбин в холодных условиях является обледенение лопастей. Методы обнаружения обледенения необходимы для предотвращения критических режимов работы ветрогенератора.

В настоящей работе будет рассматриваться метод обнаружения льда, основанный на передаче микроволнового электромагнитного сигнала в диэлектрический слой, функционирующего как волновод, и отслеживания сигналов, передаваемых в волновод и отраженных от него.

За прототип взято устройство, описанное в [1], которое разработано и запатентовано в США в 1977 г. в качестве микроволнового детектора льда для воздушных судов.

Проведена экспериментальная проверка работоспособности датчика на климатическом стенде. Измерены значения напряжения на выходе рефрактометра до начала образования ледяного слоя на конце коаксиального кабеля и после обледенения для определения сдвига по фазе и изменения отношения амплитуд. Показано, что образование льда сопровождается значительным изменением фазы сигнала, в то время как амплитуда меняется незначительно. Описанный метод обладает рядом достоинств, таких как простота, дешевизна, возможность установления датчика внутрь объекта, на котором диагностируется обледенения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-19-00205).

1. United States Patent № 4,054,25. Oct. 18, 1977. Microwave ice detector / Attorney, Agent, or Firm-Fulwider, Patton, Rieber, Lee & Utecht.

Научный руководитель — канд. техн. наук И. К. Кабардин

УДК 532.5.032

Численное моделирование закрученного течения жидкости в цилиндрическом контейнере методом решеточных уравнений Больцмана

К. С. Кинзин

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Закрученные потоки жидкости и газа представляют большой интерес как для фундаментальных исследований, так и для практического применения. Цилиндрический контейнер с вращающимся торцом является простейшей моделью, которая актуальна, например, для изучения и создания так называемых вихревых биореакторов. Торцом является твердая, неподвижная вдоль оси верхняя крышка цилиндра. Основным достоинством данной модели является то, что режимы течения в такой постановке зависят только от числа Рейнольдса и отношения высоты цилиндра к его радиусу. Обычно в закрученном таким образом течении жидкости образуется центральный восходящий поток вдоль оси цилиндра [1]. Однако при некоторых режимных параметрах в восходящем вихре возникает рециркуляционная зона возвратного течения [2]. Цель работы — нахождение параметров для возникновения данного феномена.

Перспективным методом описания данной задачи является метод решеточных уравнений Больцмана. Он представляет собой численное решение кинетического уравнения для некоторого набора псевдочастиц. Для этого используются решеточные уравнения, которые описывают эволюцию дискретной функции распределения частиц, движущихся в заданном направлении. Эволюция распределения на каждом временном шаге ведется посредством двух последовательных шагов: распространения и соударения. Преимуществом метода является простота распараллеливания расчетов.

В работе описаны особенности реализации метода решеточных уравнений Больцмана для осесимметричных геометрий и проведено моделирование закрученного течения в цилиндрическом контейнере. Найдены режимные параметры появления устойчивой рециркуляционной зоны возвратного течения и проведено обширное сравнение произведенных численных исследований с экспериментальными данными.

1. Наумов И. В. и др. Структура ограниченного закрученного течения при различных фазовых граничных условиях на неподвижном торце цилиндра // Теплофизика и аэромеханика. 2020. Т. 27, № 1. С. 93–98.
2. Escudier M. P. Observationsof the Flow Produced in a Cylindrical Container by a Rotating Endwall // Exp. Fluids. 1984. Vol. 2, № 4. P. 189–196.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Р. И. Мулляджанов

УДК 532.5.073

Измерение профилей скорости капель аэрозоля, налетающих на лопатку ветрогенератора с помощью метода ЛДА

К. С. Кузьмина [1], М. Р. Гордиенко [2], С. В. Какаулин [2]

[1] Новосибирский государственный университет
[2] Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Обледенение частей летательных аппаратов, ветрогенераторов и элементов строительных конструкций является огромной проблемой в технике. Обледенение в данной работе создается на объекте за счет налетающих капель, выпущенных из аэрографа.

Чтобы изучать различные методы борьбы с обледенением, необходимо знать параметры набегающего потока, а именно скорость и размер налетающих капель, с помощью которых образуется обледенение на объекте. Для измерения профилей скорости используется метод лазерно-допплеровской анемометрии. Он позволяет с высокой точностью измерять среднюю скорость в каждой точке потока и обладает большим пространственным разрешением. В данной работе обледенение создается при помощи аэрографа, так как он хорошо подходит по скорости наращивания льда на объекте и размеру капель. В работе [1] описан обзор работ по обледенению и различных методик, которые используются в данной работе.

В ходе эксперимента были получены профили скорости капель аэрозоля, выпущенных из аэрографа на расстояниях в 1, 5, 9, 13, 17, 21, 25 см от сопла. Также в ходе эксперимента получены размеры капель аэрозоля, налетающих на объект.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-19-00205).

1. Kabardin I., Dvoynishnikov S., Gordienko M. et al. Optical Methods for Measuring Icing of Wind Turbine Blades // Energies. 2021. Vol. 14, № 20. P. 6485.

Научный руководитель — канд. техн. наук И. К. Кабардин

УДК 532.5

Численное моделирование процессов газового турбулентного горения

А. Д. Кундашкин

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В ближайшем обозримом будущем горение различных видов топлива все еще останется основным ресурсом добычи энергии для человечества. В связи с этим встают вопросы оптимизации расходов топлива при горении в различных двигателях. Также большую важность представляет оптимизация геометрии двигателей для более экономичного сгорания топлива с меньшим вредом для экологии.

В качестве примера попытки решения этих проблем можно выделить предварительно смешанное газовое топливо, которое обеспечивает низкие выбросы оксидов азота и высокую топливную экономичность для многих устройств сгорания. Однако стратифицированные смеси с неоднородной концентрацией топлива дают лучшую стабильность пламени и воспламеняемость по сравнению с предварительно смешанным пламенем в условиях очень скудного топлива [1, 2] и часто намеренно используются в практических системах сгорания, например в двигателях со стратифицированным зарядом.

В данной работе исследуется изотермическая аэродинамика в цилиндрической камере с двумя входными потоками, направленными по оси цилиндра. Построена расчетная сетка, содержащая 16 млн ячеек. Поля скоростей и распределение давлений были смоделированы с помощью программы OpenFOAM, которая также позволяет найти и распределение температур.

Также были получены первоначальные результаты расчета с подожженной смесью. Однако данные изотермического расчета, смоделированные таким способом, лучше согласуются с экспериментальными результатами, полученными в работе [3].

1. Poinsot T., Veynante D. Theoretical and Numerical Combustion. Edwards, 2005. 540 p.
2. Pope S. B., Pope S. B. Turbulentflows. Cambridge: Cambridge university press, 2000.
3. Zhou R. et al. Flow field measurements of a series of turbulent premixed and stratified methane/air flames // Combust. Flame. 2013. Т. 160, № 10. С. 2017–2028.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Р. И. Мулляджанов

УДК 532.5.073

Создание аэродинамического стенда по борьбе с обледенением на лопастях ветрогенераторов

В. Е. Ледовский [1, 2], М. Р. Гордиенко [2], С. В. Какаулин [2]

[1] Новосибирский государственный технический университет
[2] Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Развитие ветроэнергетики в Арктике привело к увеличению количества ветряных турбин в холодных климатических зонах. Проблемой эксплуатации ветряных турбин в холодных условиях является обледенение лопастей. Обледенение лопаток приводит к изменению аэродинамики ротора, снижению выработки энергии, повышению веса лопаток и нагрузке на ротор, что увеличивает износ и сокращает срок службы турбин. Различные методы по распознаванию и измерению льда описаны в [1]. Новый разрабатывающийся нашей группой метод по измерению размеров ледяных наростов показан в [2].

В данной работе создавался экспериментальный стенд для наращивания льда. Нужно было создать климатическую трубу, в которой впоследствии можно было бы замораживать модели лопастей ветрогенераторов. В климатической трубе нужно было достичь отрицательных регулируемых температур до −15 °C. Решено создавать поток с помощью 4 небольших труб Ранка, направленных входом в климатическую трубу, чтобы достичь таких температур. А для более скорого нанесение льда были опробованы ультразвуковой увлажнитель и аэрограф для нанесения краски.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-19-00205).

1. Kabardin I., Dvoynishnikov S., Gordienko M. et al. Optical Methods for Measuring Icing of Wind Turbine Blades // Energies. 2021. Vol. 14, № 20. P. 6485.
2. Gordienko M. R., Kabardin I. K., Meledin V. G. et al. Development of the multiparameter triangulation method for the wind turbines blades ice formation diagnostic // IOP J. Phys.: Conf. Ser. 2021. Vol. 2119. P. 012110.

Научный руководитель — канд. техн. наук И. К. Кабардин

УДК 532.1

Экспериментальное исследование явления обратного пристенного течения в дозвуковом конфузоре при малом числе Рейнольдса

А. А. Лукьянов

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В последнее время появился ряд работ, посвященных так называемому явлению обратного пристенного течения (ОПТ), т. е. мгновенному локальному отрыву потока, возникающему в безградиентном турбулентном пограничном слое (ТПС). Экспериментально это явление было обнаружено лишь недавно в 2015 г. [1], а механизм его возникновения был выявлен в 2021 г. [2] Данная работа посвящена исследованию этого явления в конфузорных каналах, возможность существования ОПТ в которых до сих пор неизвестна.

Рассматривалось дозвуковое турбулентное течение воздуха в конфузоре при числе Рейнольдса Re = 3100, рассчитанном по полувысоте канала и среднерасходной скорости. Рабочий участок состоял из двух частей: предвключенной (3600 мм) с постоянным поперечным сечением (100 × 100 мм^2) и конфузорной (1200 мм) с сечением 100 × 100 мм^2 на входе и 100 × 80, 100 × 60, 100 × 40 мм^2 на выходе. Течение на входе в конфузор было турбулентное, развитое и без закрутки. Измерения выполнялись высокоскоростным методом PIV. В работе [3] описан алгоритм обработки полученных PIV-изображений и метод фильтрации осциллограмм скорости. Размер расчетной области 64 × 8 пикс был подобран с точки зрения оптимизации неопределенности измерения и пространственного разрешения. Анализировались профили средней продольной скорости и турбулентных пульсаций скорости, а также проведено их сравнение с соответствующими литературными данными. Исследование существования явления ОПТ в конфузоре было проведено путем анализа осциллограмм продольной и нормальной к стенке составляющих вектора скорости в вязком подслое (y^+ = 0,3) и в буферной области (y^+ = 13) ТПС.

1. Brücker Ch. Evidence of Rare Backflow and Skin-Friction Critical Points in Near-Wall Turbulence Using Micropillar Imaging // Phys. Fluids. 2015. Vol. 27, № 3, Art. 031705. 7 p.
2. Zaripov D., Ivashchenko V., Mullyadzhanov R. et al. On a Mechanism of Near-Wall Reverse Flow Formation in a Turbulent Duct Flow // J. Fluid Mech. 2021. Vol. 923, Art. A20. 15 p.
3. Zaripov D. I., Li R., Dushin N. S. Dissipation Rate Estimation in the turbulent Boundary Layer Using High-Speed Planar Particle Image Velocimetry // Exp. Fluids. 2019. Vol. 60, № 1. 16 p.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. И. Зарипов

УДК 532.529

Численное моделирование стационарного снаряда Тейлора

Ан. А. Лукьянов

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Двухфазные режимы течения в каналах (снарядный, пузырьковый, дисперсно-кольцевой, кольцевой) встречаются в большом числе современных технологических и промышленных устройств. Снарядный режим течения характеризуется наличием в потоке газовых пузырей, по форме напоминающих «снаряд», в литературе часто называемых снарядом или пузырем Тейлора.

В экспериментальных работах по исследованию Тейлоровского снаряда в вертикальной трубе было показано, что одиночный газовый снаряд всплывает со скоростью $U = 0{,}35\sqrt{(gD)}$. Скорость всплытия не зависит от длины пузыря. В опускном потоке жидкости, скорость которого равна скорости всплытия снаряда, возникает режим, в котором жидкость обтекает неподвижный снаряд [1].

Обзор литературы показал большое количество различных подходов к моделированию стационарного снаряда в потоке жидкости. Данная задача является одной из классических верификационных задач. Расчеты проводились с использованием закрытых теплогидравлических и CFD-кодов. В связи с этим возникла цель научной работы — численное моделирование гидродинамики потока вокруг стационарного снаряда с использованием открытой платформы для решения задач механики сплошных сред — OpenFOAM.

Геометрия и условия для численного моделирования стационарного снаряда Тейлора определялись из экспериментальной работы [1]. Скорость потока жидкости составляла 0,15 м/с. Уравнения Навье — Стокса решались для двух сжимаемых неизотермических несмешивающихся жидкостей с использованием метода VOF. Расчетная сетка была выполнена в форме круглого канала длинной 150 мм и диаметром 20 мм со сгущением около стенки. Общее количество ячеек в расчетной области составляло около 3 млн. Уравнения Навье — Стокса дополнялись уравнениями модели турбулентности k-ω SST.

В работе был проведен расчет межфазной поверхности квазистационарного снаряда Тейлора. Получены профили трения на стенке для различных длин снарядов вдоль всего канала. Сравнение расчетных данных с экспериментальными показало хорошее их совпадение.

1. Кашинский О. Н., Курдюмов А. С., Лобанов П. Д. Трение на стенке при обтекании стационарного газового снаряда опускным потоком жидкости // Теплофизика и аэромеханика. 2008. Т. 15, № 1. С. 93–98.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. В. Алексеев

УДК 539.232

Влияние гидрофобных свойств мембраны на процесс сепарации водонефтяной эмульсии

А. В. Мельник

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Разделение нефти и воды является важной задачей для нефтедобычи, экологии, экономики, очистки сточных вод и других приложений. Существующие методы сепарации имеют ограничения, связанные с большими энергозатратами, низкой эффективностью разделения, образованием вторичных загрязнителей и др. Поэтому в середине XX в. было предложено применение мембран для сепарации водонефтяных эмульсий. Затем начались попытки модификации поверхности мембран путем придания ей гидрофобных либо гидрофильных свойств. Благодаря этому усовершенствованию эффективность сепарации на мембранах значительно повысилась, и метод стал конкурировать с уже применяемыми. Это дало стимул для развития методов изготовления сепарационных мембран с модифицированной гидрофобной поверхностью. Фторполимер хорошо подходит для использования в качестве гидрофобных покрытий для сепарационных мембран, так как обладает такими привлекательными потребительскими свойствами, как высокая химическая стабильность, высокая биосовместимость, высокая гидрофобность, гибкость и эластичность.

Для изготовления сепарационных мембран гидрофобные и супергидрофобные фторполимерные покрытия наносились на поверхности металлических сеток методом Hot Wire CVD. Особенностью применения данного метода является возможность получать фторполимерные покрытия с различными свойствами смачивания.

Проведенные эксперименты показали, что полученные мембраны могут использоваться для эффективной сепарации. Показано, что свойства смачивания фторполимерного покрытия мембраны влияют на скорость и эффективность сепарации водонефтяной эмульсии. Чем выше гидрофобность покрытия мембраны, тем лучше эффективность разделения. Получены данные об эффективности процесса сепарации от размера пор мембраны: чем меньше размер поры, тем выше эффективность сепарации, но ниже ее скорость. Проведенные эксперименты показали, что мембраны, изготовленные с помощью метода HW CVD, могут применяться для большого числа циклов сепарации, после чего могут быть очищены и использованы повторно без значительного снижения в эффективности сепарации.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. И. Сафонов

УДК 539.232

Структурирование поверхности металлов обработкой тлеющим разрядом

А. В. Петрова

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В настоящее время получение материалов с различными свойствами поверхности является одной из актуальных задач. Особый интерес представляет создание материалов с управляемой смачиваемостью. Получаемые материалы могут быть использованы в различных приложениях: самоочищающиеся поверхности, интенсификация теплообмена при фазовом переходе, уменьшение гидродинамического сопротивления и др. На свойство смачивания поверхности влияет как морфология, так и химический состав верхних ее слоев. Одним из простых методов изменения этих параметров является обработка поверхности исследуемого материала плазмой тлеющего разряда в среде различных газов.

В представленной работе для придания функциональных свойств металлическим поверхностям был применен тлеющий разряд в воздушной среде при его различных параметрах. Данный метод обеспечивает одновременное изменение химического состава и морфологии поверхности.

В результате проделанной работы были обработаны поверхности различных металлов. В процессе обработки у исследуемых металлов были изменены морфология, химический состав и свойство смачивания.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-79-10119-П).

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. И. Сафонов

УДК 536.42

Зависимость структуры биметаллических наночастиц, полученных при кристаллизации, от состава компонент

К. Г. Савина, С. С. Богданов, А. А. Тактаров

Тверской государственный университет

В настоящее время для решения проблемы изучения закономерностей формирования структуры наночастиц (НЧ) исследователи активно применяют как теоретические подходы, так и компьютерный эксперимент [1]. При этом с развитием компьютерной техники открываются все большие возможности для компьютерного моделирования не только свойств наночастиц, но и технологических процессов их получения, а также для имитации условий эксплуатации наноразмерных рабочих элементов и наноструктурированных материалов. Биметаллические частицы при определенных условиях можно рассматривать и как предельный случай монометаллических наночастиц, легированных малыми добавками другого металла. Они являются перспективными технологическими материалами, поскольку позволяют «наследовать» определенные физико-химические характеристики исходных металлов.

Цель данной работы — определение зависимости структуры биметаллической НЧ Au-Ag (размер 800 атомов), которая была получена путем кристаллизации из расплава, от состава компонент. При моделировании использовался потенциал сильной связи [2].

Показано, что увеличение доли атомов золота приводит к уменьшению значения удельной внутренней энергии, т. е. НЧ становится более стабильной. Анализ структуры с использованием ПО OVITO [3] позволяет сделать вывод о том, что преимущественной является ГЦК-фаза, однако для процентного соотношения компонент Au25-Ag75 и Au75-Ag25 большая часть атомов кристаллизовалась в ГПУ-фазу.

Исследования выполнены при поддержке РФФИ (проект № 20-33-90192).

1. Сдобняков Н. Ю., Соколов Д. Н. Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: Теория и компьютерное моделирование: монография. Тверь: ТвГУ, 2018. 175 с.
2. Cleri F., Rosato V. Tight-Binding Potentials for Transition Metals and Alloys // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48, iss. 1. P. 22–33.
3. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO — the open visualization tool // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol. 18, iss. 1. P. 015012-1-015012-7.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Н. Ю. Сдобняков

УДК 621.039.5

Численный анализ особенностей разрушения имитатора твэла быстрого реактора

Т. А. Сайкина

Новосибирский государственный университет

Для изучения тяжелых аварий на АЭС необходимо численное моделирование, так как проведение экспериментов небезопасно и трудоемко. При тяжелых авариях может произойти расплавление оболочки твэла и оксидного топлива, а для твэлов с нитридным топливом — диссоциация и эвтектическое взаимодействие образующегося металлического урана со стальной оболочкой [1].

Настоящая работа посвящена численному изучению особенностей разрушения отдельного имитатора твэла, который представлял собой цилиндрический стержень из мононитрида урана с цилиндрической полостью внутри. Между стальной оболочкой и топливом имелся газовый зазор, заполненный гелием. Тепловыделение было равномерным по всему объему топлива. На внешней границе был задан теплообмен с теплоносителем.

Для доказательства работоспособности реализованных методик [2] выполнена валидация кода на экспериментах по плавлению имитатора оболочки твэла, проведенных в ИТ СО РАН.

В результате выполненной работы были получены следующие результаты. Плавление твэла с нитридным топливом начинается с плавления стали, затем в результате диссоциации UN образуется жидкий металлический уран, далее начинается плавление UN. Образовавшийся уран вступает в эвтектическое взаимодействие со стальной оболочкой. Времена начала плавления стальной оболочки твэла 2–8 с. Времена начала разрушения топливного стержня твэла 6–22 с.

1. Walter C. M., Dickerman C. E. TREATstudy of the penetration of molten uranium and U/5 wt% Fs alloy through type 304 stainless steel // Nucl. Sci. Eng. 1964. Vol. 18. P. 518–524.
2. Усов Э. В., Бутов А. А., Чухно В. И. и др. Моделирование плавления твэла быстрого реактора и затвердевания образующегося расплава с помощью модуля SAFR/V1 интегрального кода ЕВКЛИД/V2 // Атомная энергия. 2018. Т. 124, вып. 3. С. 123–127.

Научный руководитель — канд. техн. наук Э. В. Усов

УДК 535

Металл-индуцированная лазерная кристаллизация композита золота и аморфного кремния

Ф. А. Самохвалов

Новосибирский государственный университет

В наши дни полупроводниковая электроника присутствует во всех сферах жизни. Тонкопленочные поликристаллические полупроводниковые структуры — это основные материалы для современных технологий в таких областях, как микроэлектроника, наноэлектроника, оптоэлектроника, фотовольтаика. Для промышленности очень важно получение подобных структур на дешевых, легкоплавких подложках (стекло, пластик и т. д.). В настоящее время наиболее перспективным и широко исследуемым способом получения поликристаллических пленок на нетугоплавких подложках является метод металл-индуцированной кристаллизации. При использовании этого метода металл выступает как катализатор формирования кристаллической фазы при термическом отжиге. Чтобы обеспечить локальность кристаллизации и минимизировать нагрузку на подложку, что позволит использовать в качестве материала вещества с низкой температурой плавления, применяется метод импульсного лазерного отжига. В работе представлены результаты экспериментального исследования кристаллизации аморфного кремния с использованием импульсного лазерного отжига в сочетании с методом металл-индуцированной кристаллизации, изучен широкий диапазон условий лазерного облучения: длины волн видимого и инфракрасного диапазонов излучения с наносекундной длительностью импульса в атмосфере и вакууме.

1. Starinskiy S. V., Rodionov A. A., Shukhov Y. G. et al. Formation of Periodic Superhydrophilic Microstructures by Infrared Nanosecond Laser Processing of Single-Crystal Silicon // Appl. Surf. Sci. 2020. Vol. 512. P. 145753.
2. Polyakov D. S., Yakovlev E. B. Modellingof Heating and PHotoexcitation of Single-Crystal Silicon Under Multipulse Irradiation by a Nanosecond Laser at 1.06 μm // Quantum Electronics. 2018. Vol. 48 (3). P. 255.
3. Arora V. K., Dawar A. L. Laser-induced damage studies in silicon and silicon-based photodetectors // Appl. Opt. 1996. Vol. 35, iss. 36. P. 7061–7065.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук С. В. Старинский

УДК 62

Обоснование выбора варианта тепловой защиты силовых гидромеханических передач специального самоходного подвижного состава

И. И. Свяженин

Сибирский государственный университет
путей сообщения, Новосибирск

Цель работы — разработка вариантов тепловой защиты (ТЗ) гидромеханических передач специального самоходного подвижного состава (ССПС).

Задачи работы: сбор и анализ сведений о гидромеханических передачах ССПС; выявление основных причин перегрева гидромеханических передач ССПС; сравнительный анализ систем охлаждения гидромеханических передач самоходных машин; разработка вариантов ТЗ гидромеханических передач ССПС.

К ССПС относится железнодорожный подвижной состав для обслуживания устройств и оборудования железных дорог, например мотовозы погрузочно-транспортные, которые применяют и при перевозке рабочих бригад и грузов, при маневровых работах на станциях и для электропитания путевого инструмента.

Выполнен сравнительный анализ пяти рассмотренных систем охлаждения унифицированных гидромеханических передач (УГП). По совокупности принятых критериев сравнения наиболее предпочтительным типом системы охлаждения для УГП ССПС является воздушная, электромеханическая система охлаждения с регулируемым насосом. Проведенное сравнение вязкостно-температурных характеристик масел показало, что использование масла марки И-12А в УГП не рекомендуется, так как вязкость масла имеет высокую зависимость от температуры. Предпочтительным вариантом по соотношению стоимости и вязкостно-температурных характеристик является масло марки ИГП-18. Так как производительность шестеренчатых насосов падает со снижением вязкости масла, то увеличить время работы УГП можно установкой в насосный блок аксиально-поршневого насоса, который лучше функционирует на текучем масле. Таким образом, можно устранить проектную ошибку и обеспечить конструктивную совместимость насоса и гидромотора в УГП. Ввиду того, что аксиально-поршневые насосы стоят дороже и требуют более высокую тонкость фильтрации, рациональнее установить дополнительный охлаждающий контур со своим насосом, датчиком температуры, теплообменником и гидромотором вентилятора. Реализация такого решения по силам любому эксплуатационному предприятию и позволит увеличить время работы УГП благодаря дополнительному отводу тепла из нее.

Научный руководитель — канд. техн. наук, доц. Н. А. Маслов

УДК 532.517.4, 532.574.7

Распределение старших моментов и асимметрии производной скорости в затопленной круглой струе

А. С. Северин

Новосибирский государственный университет
Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Течения в конфигурации затопленной свободной струи представляют научный интерес, поскольку часто встречаются в природе и имеют множество промышленных применений. Несмотря на большой объем экспериментальных данных по сдвиговым течениям, имеющийся в литературе, информация о распределении старших статистических моментов флуктуаций скорости (асимметрия и эксцесс) практически отсутствует в открытых источниках вследствие сложности вычисления статистических моментов высшего порядка ввиду их высокой чувствительности к ошибочным измерениям («выбросам»), даже если общее число таких «выбросов» незначительно в общей статистике.

В данной работе анализируется турбулентная структура однофазной затопленной свободной струи по данным PIV-измерений мгновенной скорости. Для их анализа к массиву мгновенных полей скорости была применена процедура статистической фильтрации [1]. По отфильтрованным данным были рассчитаны коэффициенты асимметрии и эксцесса. Кроме того, было получено поле асимметрии пространственной производной продольной компоненты флуктуационной составляющей скорости. Эта величина с точностью до знакопостоянного множителя совпадает со структурной функцией третьего порядка, характеризующей каскадный перенос энергии по спектру [2]. Знак структурной функции определяет направление потока энергии по спектру: отрицательное значение говорит о переносе энергии от крупных масштабов к мелким, а положительное — от мелких к крупным.

Вычисление структурной функции и статистических моментов высшего порядка позволило установить зоны обратного каскада энергии и некоторые другие особенности турбулентной структуры течения.

1. Heinz O., Ilyushin B., Markovich D. Application of a PDF Method for the Statistical Processing of Experimental Data // Int. J. Heat Fluid Flow. 2004. Vol. 25, iss. 5. P. 864–874.
2. Hrebtov M. Yu., Ilyushin B. B., Krasinsky D. V. InverseEnergy Cascade in a Turbulent Round Jet // Phys. Rev. E. 2010. Vol. 81, iss. 1. Art. 016315. 6 p.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. Б. Б. Илюшин

УДК 536.46

Прямое численное моделирование ламинарного горения осесимметричного течения метановоздушной смеси

Д. А. Сластная

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Численное моделирование горения газовоздушной смеси позволяет находить новые закономерности и вероятные исходы процесса сажеобразования. Изучение сажеобразования является необходимой задачей теплофизики, ведь наличие частиц сажи в атмосфере представляет серьезную угрозу для здоровья человека и возможного глобального потепления. На сегодняшний день не существует единого и точного механизма для описания сажеобразования, найдены только отдельные полуэмпирические выражения для отслеживания образования прекурсоров сажи на том или ином этапе. Разработка и реализация глобального механизма является важной задачей современной науки.

В данной работе проведено прямое численное моделирование ламинарного горения метановоздушной смеси, вытекающей с постоянной скоростью из сопла Витошинского (число Рейнольдса ~ 1000). Начальная скорость потока 0,07 м/с, соотношение топлива к окислителю — 1:19 (CH_4 — 5 %, Air — 95 %). В качестве основного инструмента моделирования был выбран расчетный пакет laminarSMOKE, построенный на основе открытого вычислительного кода OpenFOAM. Выбранный кинетический механизм (GRI-MECH 3.0) включал 53 реагента и 256 химических реакций, задавался как внешний файл с описанием реакций в формате CHEMKIN. Гидродинамика разрешалась методом конечных объемов в сжимаемой постановке со вторым порядком точности по пространству (центральные разности) и времени (схема Кранка — Николсона). Расчеты проводились в трехмерной осесимметричной постановке. Граничные условия подбирались в соответствии с параметрами аналогичного эксперимента, проведенного в лаборатории 7.4 ИТ СО РАН. Получены поля скорости, температуры и массовых долей отдельных компонент смеси. Поле температуры сравнивалось с данными эксперимента, рассчитанные характерные особенности качественно повторяют экспериментальные зависимости.

Данная работа поддержана грантом РНФ № 19-79-10225.

1. Cuoci A. et al. A Computational Tool for the Detailed Kinetic Model-Ing of Laminar Flames: Application to C2H4/CH4 Coflow Flames // Combust. Flame. 2013. Т. 160, № 5. С. 870–888.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Р. И. Мулляджанов

УДК 62

Теоретическое обоснование выбора способа защиты пневматической системы от промерзания

Г. А. Соболев

Сибирский государственный университет
путей сообщения, Новосибирск

Цель работы — разработка способов защиты пневматической системы (далее — пневмосистемы) выправочно-подбивочно-рихтовочной машины Дуоматик 09-32 (далее — машины) от промерзания при зимней укладке железнодорожного пути и производстве аварийно-восстановительных работ при температурах окружающей среды ниже минимально рекомендуемой инструкцией по эксплуатации машины.

Задачи работы: рассмотреть физику процесса промерзания пневмосистемы, выявить причины промерзания; предложить варианты способов защиты пневмосистемы от промерзания; выполнить сравнительный анализ предложенных способов по сформулированным критериям; разработать рекомендации по выбору способа защиты пневмосистемы.

В пневмосистеме рассматриваемой машины после компрессора установлен осушитель воздуха, который удовлетворительно выполняет свою функцию при температуре от 0 до –10 °С. При температурах окружающего воздуха ниже –10 °С образующийся при работе пневмосистемы конденсат интенсивно промерзает, тем самым внезапно останавливая работу пневмосистемы.

Предложено три способа защиты пневмосистемы рассматриваемой машины от промерзания: увеличение диаметров пневматических трубопроводов; установка дополнительных осушителей воздуха в предполагаемых точках промерзания; установка нагревательных элементов перед пневмоаппаратами. Выполнен сравнительный анализ способов осушения воздуха. Нежелательным для практического применения является использование адсорбционного осушителя из-за необходимости периодической замены адсорбирующего вещества. Средние показатели имеет конденсаторный осушитель, но у него большие габариты. Оптимальным вариантом является установка в пневмосистему машины дополнительного фильтра-влагоотделителя или модернизация существующего осушителя. Выполнен сравнительный анализ предлагаемых способов защиты рассматриваемой пневмосистемы от промерзания. Наилучшие показатели имеет установка в пневмосистему дополнительного осушителя воздуха. Этот способ защиты пневмосистемы от промерзания принят для дальнейшей глубокой проработки. На основании полученных результатов анализа разработаны рекомендации по выбору способа защиты пневмосистемы от промерзания.

Научный руководитель — канд. техн. наук, доц. Н. А. Маслов

УДК 532.5.073

Подготовка и использование малоинерционных температурных датчиков для диагностики вихревого эффекта

Б. А. Соколов [1], М. Р. Гордиенко [2]

[1] Новосибирский государственный университет
[2] Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Прецизионная диагностика температуры важна во многих отраслях физики и техники. Существует большое количество методов диагностики температуры, из которых был выделен метод диагностики температуры на основе применения полупроводниковых термисторов, который обладает рядом преимуществ.

В данной работе применение температурных датчиков планируется внутри вихревой камеры, специально предназначенной для моделирования вихревого эффекта. Требования к датчикам выдвигаются следующие: они должны позволять измерять температуру с высокой точностью (порядка 0,1 градуса), обладать малой инерционностью и хорошей локальностью, слабо зависеть от внешних наводок. Всем этим требованиям удовлетворяют полупроводниковые термисторы.

За основу взята установка из [1], в которой и будет происходит диагностика вихревого эффекта, благодаря полупроводниковым термисторам. Проведен комплекс работ по подготовке полупроводниковых термисторов. Получены табличные данные, благодаря которым был найден интерполяционный многочлен для установления зависимости $R(T)$ для набора полупроводниковых термисторов, где R — сопротивление, а T — температура. Исследована зависимость изменения сопротивления, вследствие изменения температуры жидкости.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-29-01262).

1. Gordienko M. R., Yavorsky N. I., Pravdina M. Kh. et al. Small-Disturbance Temperature Diagnostics in Vortex Tube with a Square Cross-Section // J. Phys. Conf. Ser. 2019. Vol. 1359 (1). P. 3–5.

Научный руководитель — канд. техн. наук И. К. Кабардин

УДК 532.525.2

Управление отрывом потока за цилиндром с использованием пульсирующей струи

М.И. Сорокин

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Развитие активных методов управления отрывными течениями необходимо для решения многих технических задач, таких как проектирование летательных аппаратов, автомобилей, гидро- и газотурбин. Явление срыва вихрей с поверхности обтекаемого тела может приводить к таким нежелательным эффектам, как увеличение лобового сопротивления, повышение уровня шума и уровня вибраций, механические повреждения тел.

Цель данной работы — развитие метода активного управления отрывом с использованием пульсирующей струи [1]. Объектом обтекания был выбран полый цилиндр с продольной щелью, установленный в прямоугольный канал малогабаритной аэродинамической трубы. Размеры сечения канала 125 × 125 мм^2. Параметры цилиндра: длина — 125 мм, диаметр — 15 мм, ширина щели — 2 мм. Эксперименты были проведены с использованием двух конфигураций:

– генерация пульсирующей струи с использованием резонатора Гельмгольца [2] с возможностью регулирования резонансной частоты, измерение полей скорости PIV-системой;

– генерация пульсирующей струи с использованием стороннего источника сжатого воздуха и системы клапанов, измерение сопротивления цилиндра тензометрическими датчиками.

В серии экспериментов, проведенных в первой конфигурации, был выбран режим Re = 5000, скорость набегающего потока 5 м/с. Собственная частота f = 64 Гц. Для генерации пульсирующей струи были выбраны частоты 32, 64, 128 Гц, кратные собственной частоте. Во второй конфигурации были проведены измерения значения коэффициента лобового сопротивления цилиндра без использования методов управления отрывом, в диапазоне $0{,}4 \cdot 10^3 \leqslant \mathrm{Re} \leqslant 2 \cdot 10^4$.

1. Gad-el-Hak M. Flow control. 2000. С. 442.
2. Greco C. S. et al. The von Kármán street behind a circular cylinder: Flow control through synthetic jet placed at the rear stagnation point // J. Fluid Mech. 2020. Т. 901.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук В.М. Дулин

УДК 532.525.2

Динамика потока импактной струи в условиях внешнего возмущения двух гармоник

П. С. Строева

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Турбулентные сдвиговые течения, в том числе струи, широко применяются во многих областях промышленности: в строительстве, медицине, энергетике, нефтяной сфере и др. В настоящее время актуальной задачей является развитие эффективных методов управления гидродинамикой струйных течений для интенсификации тепломассообмена. Способы управления сдвиговыми течениями разделяют на два основных класса: пассивные и активные. Один из наиболее известных методов активного контроля струйными потоками — внесение в поток периодических пульсаций расхода жидкости. Воздействие на поток возмущениями различной частоты может привести к усилению или ослаблению когерентных структур [1].

В данной работе методом цифровой трассерной визуализации были получены поля распределения пульсационных составляющих радиальной и продольной компонент скорости струи. Отсняты изображения без модуляции и при нулевой частоте внешних пульсаций расхода. Далее были наложены внешние пульсации расхода с частотой наибольшей восприимчивости струи. Следующим шагом было наложение модулирующего сигнала. Число Рейнольдса составляло Re = 12500. Расстояние между кромкой сопла и импактной поверхностью составляло H = 2D. Пульсации расхода жидкости генерировались на частоте наибольшей восприимчивости струи [2], которая соответствовала числу Струхаля St = 0,5. Значение пульсационного расхода составляло 10 % от общего расхода струи. С наложением возмущений наблюдалась значительная интенсификация турбулентности в слое смешения струи. Модуляция основного сигнала не влияет на положение максимума амплитуды пульсаций.

1. Бильский А., Ложкин Ю., Небучинов А. Изучение влияния внешних периодических возмущений потока на интенсивность теплообмена в импактной струе // Mod. Sci.: Res., Ideas, Results, Technol. 2010. Т. 1, № 2010_1 (3). С. 101–109.
2. Vejrazka J. et al. Effect of an External Excitation on the Flow Structure in a Circular Impinging Jet // Phys. Fluids. 2005. Т. 17, № 10. С. 105102.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук В. М. Дулин

УДК 53.08

Датчик на основе графена для анализа скорости динамического потока жидкой среды

Д. А. Шатилов

Новосибирский государственный университет

В настоящий момент существует проблема измерения гидродинамических параметров жидкости с минимальным контактом между датчиком и измеряемой средой, а также с желаемо малым временем релаксации и возможностью миниатюризировать сам датчик. Возможным решением этой проблемы является использование такого популярного материала, как графен.

Графен имеет уникальные физические параметры: высокую внутреннюю подвижность носителей заряда, высокую электропроводность, теплопроводность и т. д. Именно поэтому область приложений, где может быть задействован графен, чрезвычайно широка. Будучи однослойным материалом толщиной в атом, графен чрезвычайно чувствителен к внешним воздействиям: практически любое взаимодействие оказывает влияние на электронную структуру графена. Столь высокая чувствительность открывает возможность создания многофункциональных гидродинамических датчиков скорости протока жидкости. В исследовании [1] обнаружена возможность создания гидродинамического датчика, работающего на принципах сорбции/десорбции и изменяющего свое сопротивление при контакте с различными средами.

В работе описана экспериментальная методика создания сенсора из графена, синтезированного методом химического осаждения из газовой фазы (CVD-метод) на поверхность меди. Исследована зависимость влияния механизмов переноса на качество графена. Проведено исследование изменения смачиваемости поверхности графена на меди, характеризующей чувствительность графена к атмосферной влажности. Предложено два различных способа создания электродов на непроводящей подложке: перенос графена на кремниевые пластинки с последующим напылением алюминиевых контактов высокой чистоты методом магнетронного напыления и перенос на подложку из полимера ПЭТ/ЭВА с дальнейшим селективным травлением меди. Исследована временная деградация контактов различных графеновых чипов.

1. Andryushchenko V., Sorokin D., Morozzova M. et al. Graphene-Polymer Composite Conductivity in Air and Water // Appl. Surf. Sci. 2021. № 567.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. В. Смовж

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Председатель секции — д-р физ.-мат. наук, проф. *С. В. Цыбуля*

Ответственный секретарь секции — *В. В. Никулин*

Экспертный совет подсекции «Биомедицинская физика»:
д-р физ.-мат. наук, проф. *В. П. Мальцев*, д-р хим. наук *Н. Э. Поляков*, канд. физ.-мат. наук *М. А. Юркин*, канд. физ.-мат. наук *А. А. Ломзов*, канд. физ.-мат. наук *В. В. Яньшоле*, канд. физ.-мат. наук *Д. И. Строкотов*, канд. физ.-мат. наук *А. Г. Марьясов*, канд. физ.-мат. наук *Ю. И. Глазачев*, канд. физ.-мат. наук *В. М. Некрасов*

Экспертный совет подсекции «Физические методы исследования функциональных материалов и наносистем»:
акад. РАН *В. В. Болдырев*, д-р физ.-мат. наук, проф. *С. В. Цыбуля*, д-р хим. наук, проф. *Е. В. Болдырева*, д-р физ.-мат. наук, проф. *С. А. Громилов*, д-р физ.-мат. наук *Я. В. Зубавичус*, д-р физ.-мат. наук *А. Н. Шмаков*, д-р хим. наук *Б. А. Захаров*, д-р хим. наук *В. А. Садыков*, д-р геол.-минерал. наук *Т. Б. Беккер*, канд. физ.-мат. наук *С. С. Якушкин*, канд. физ.-мат. наук *Д. А. Яценко*, канд. физ.-мат. наук *С. Н. Трухан*, канд. физ.-мат. наук *Я. В. Ракшун*, канд. хим. наук *О. А. Булавченко*, канд. хим. наук *С. Г. Архипов*, канд. хим. наук *А. В. Нартова*, канд. хим. наук *Е. А. Лосев*, канд. хим. наук *В. Ю. Комаров*, канд. хим. наук *И. А. Туманов*, канд. геол.-минерал. наук *С. В. Ращенко*, *В. В. Никулин*

Экспертный совет подсекции «Химическая и биологическая физика»:
д-р физ.-мат. наук, проф. *С. А. Дзюба*, канд. физ.-мат. наук *А. П. Пыряева*, канд. физ.-мат. наук *А. М. Дмитриев*, канд. физ.-мат. наук *А. Э. Художитков*, канд. физ.-мат. наук *В. М. Голышев*, канд. физ.-мат. наук *Д. И. Колоколов*

PHYSICAL METHODS IN NATURAL SCIENCES

Section head — Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *S. V. Tsybulya*

Responsible secretary — *V. V. Nikulin*

Section scientific committee "Biomedical Physics":
Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *V. P. Maltsev*, Dr Chem. Sci. *N. E. Polyakov*,
Cand. Phys.-Math. Sci. *M. A. Yurkin*, Cand. Phys.-Math. Sci. *A. A. Lomzov*,
Cand. Phys.-Math. Sci. *V. V. Yanshole*, Cand. Phys.-Math. Sci. *D. I. Strokotov*,
Cand. Phys.-Math. Sci. *A. G. Maryasov*, Cand. Phys.-Math. Sci. *Yu. I. Glazachev*,
Cand. Phys.-Math. Sci. *V. M. Nekrasov*

Section scientific committee
"Physical methods of functional materials and nanosystems":
Acad. RAS *V. V. Boldyrev*, Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *S. V. Tsybulya*,
Dr Chem. Sci., Prof. *E. V. Boldyreva*, Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *S. A. Gromilov*,
Dr Phys.-Math. Sci. *Ya. V. Zubavichus*, Dr Phys.-Math. Sci. *A. N. Shmakov*,
Dr Chem. Sci. *B. A. Zakharov*, Dr Chem. Sci. *V. A. Sadykov*,
Dr Geol.-Mineral. Sci. *T. B. Bekker*, Cand. Phys.-Math. Sci. *S. S. Yakushkin*,
Cand. Phys.-Math. Sci. *D. A. Yatsenko*, Cand. Phys.-Math. Sci. *S. N. Trukhan*,
Cand. Phys.-Math. Sci. *Ya. V. Rakshun*, Cand. Chem. Sci. *O. A. Bulavchenko*,
Cand. Chem. Sci. *S. G. Arkhipov*, Cand. Chem. Sci. *A. V. Nartova*,
Cand. Chem. Sci. *E. A. Losev*, Cand. Chem. Sci. *V. Yu. Komarov*,
Cand. Chem. Sci. *I. A. Tumanov*, Cand. Geol.-Mineral. Sci. *S. V. Rashchenko*, *V. V. Nikulin*

Section scientific committee "Chemical and Biological Physics":
Dr Phys.-Math. Sci., Prof. *S. A. Dzuba*, Cand. Phys.-Math. Sci. *A. P. Pyriaeva*,
Cand. Phys.-Math. Sci. *A. M. Dmitriev*, Cand. Phys.-Math. Sci. *A. E. Khudozhitkov*,
Cand. Phys.-Math. Sci. *V. M. Golyshev*, Cand. Phys.-Math. Sci. *D. I. Kolokolov*

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

УДК 577.359

Оптимизация передаточной функции вестибулярного импланта

М. Д. Акинина

Томский государственный университет

В течение последних 20 лет активно ведутся исследования и разработки вестибулярных имплантов, однако имеющиеся сегодня образцы вестибулярных имплантов пока еще далеки от совершенства [1]. Дело в том, что, наряду с решением технических вопросов по совершенствованию импланта, существуют принципиальные проблемы, связанные с электропроводящими свойствами тканей вестибулярного лабиринта [2]. Современные исследования в области вестибулярной имплантации сосредоточены в основном на полукружных каналах, тогда как отолитовые органы изучены недостаточно хорошо. Каналы и отолитические сенсорные области внутреннего уха функционируют как единая система: в ответ на движения головы отолитовые сигналы взаимодействуют с сигналами каналов, чтобы генерировать соответствующие ощущения, движения глаз и постуральные реакции [3].

Дальнейшее совершенствование вестибулярного импланта связано с решением проблемы стимуляции отолитовых структур, играющих важную роль в восстановлении отолито-окулярной функции, стабилизации ориентации головы, положения тела, походки, вегетативных функций и пространственного восприятия. Более того, многоканальная стимуляция полукружных каналов совместно со стимуляцией отолитовых органов представляет практически неизученную область знаний. Данное исследование продолжает оптимизацию вестибулярного импланта применительно к стимуляции двух незадействованных на данный момент органов внутреннего уха (утрикулус и саккулус).

Решение задачи направлено на оптимизацию режима электрической стимуляции вестибулярных нервов и улучшение передаточной функции вестибулярного импланта на основе построения комплексной электрофизиологической модели вестибулярного органа с учетом анатомической структуры отолитовых органов и полукружных каналов, задаваемой из модельных представлений и 3D-визуализации МРТ- и КТ-снимков, с математическим описанием физических процессов протекания электрического тока через ткани вестибулярного лабиринта.

1. Демкин В. П., Мельничук С. В., Щетинин П. П. и др. Экспериментальное исследование распространения электрических сигналов в тканях вестибулярного органа // Изв. вузов. Физика. 2018. Т. 61, № 12. С. 1–6.

2. Зуев А. Л., Мишланов В. Ю., Судаков А. И. и др. Эквивалентные электрические модели биологических объектов // Рос. журн. биомеханики. 2012. Т. 18, № 4. С. 491–497.

3. Charles C. Della Santina et al. A Multichannel Semicircular Canal Neural Prosthesis Using Electrical Stimulation to Restore 3-D Vestibular Sensation // IEEE Trans Actions Biomed. Eng. 2007. Vol. 54, № 6. P. 1016–1030.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Демкин

УДК 57.03

Влияние нейрональной активности на ольфакторный захват и транспорт неорганических наночастиц

О. С. Безверхова

Институт цитологии и генетики СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

На данный момент крайне мало данных о паттернах пространственного распределения наночастиц (НЧ) в центральной нервной системе (ЦНС) и факторах, влияющих на этот процесс. Между тем НЧ необходимы для развития новых подходов для точечной доставки лекарств, диагностики заболеваний мозга или создания неинвазивных нейроинтерфейсов. Для НЧ основным способом перемещения по нервным путям является аксональный транспорт, поэтому предполагается, что нейрональная активность должна оказывать заметное влияние на их распределение.

Для проверки этой гипотезы в данной работе проведены серии экспериментов с использованием отрицательно заряженных парамагнитных наночастиц оксида марганца (Mn_3O_4-НЧ), введенных интраназально, и метода Т1-взвешенной МРТ для получение количественного распределения НЧ по структурам мозга. Наличие НЧ в ЦНС дополнительно подтверждено с использованием метода просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Полученные траектории показывают преобладающее накопление интраназально введенных НЧ в структурах лимбической системы, что подтверждено с помощью ПЭМ и микрорентгеновской флуоресценции (micro-XRF) в экспериментах с введением в носовую полость мыши НЧ оксида платины (PtO-НЧ). Также проведена серия экспериментов с использованием ингибиторов нейрональной активности, которые подтвердили ее влияние на транснейрональный транспорт НЧ. Кроме того, в результате эксперимента продемонстрирована возможность менять траектории движения НЧ в пределах мозга мыши с помощью ольфакторных стимулов, предъявление которых приводило к накоплению НЧ в структурах, специфически активируемых в ответ на конкретный одорант.

Полученные данные открывают новые перспективы в изучении контролируемой доставки НЧ в пределах ЦНС.

Научный руководитель — канд. биол. наук А. В. Ромащенко

УДК 539.1.04

Исследование свойств конъюгатов аптамеров с кластерами бора как перспективных препаратов для БНЗТ

А. С. Беспалова

Новосибирский государственный университет

Бор-нейтронозахватная терапия (далее БНЗТ) — это радиохимиотерапевтический подход к лечению опухолевых заболеваний, подразумевающий эффективное и селективное накопление борсодержащих препаратов в опухолевых клетках с последующим их разрушением облучением эпитепловыми нейтронами.

Способность аптамеров (фрагментов нуклеиновых кислот, обладающих определенной вторичной структурой) селективно связываться с определенными мишенями позволяет создавать на их основе лекарственные средства и использовать их в качестве специфических доставщиков препаратов в определенные типы клеток. Аптамеры, способные связываться и проникать в опухолевые клетки, могут быть использованы для доставки в эти клетки противораковых агентов, в том числе борсодержащих соединений. Кластеры бора, в частности клозо-додекаборат ($B_{12}H_{12}^{-2}$), являются привлекательными терапевтическими препаратами для БНЗТ за счет высокого содержания бора, относительной метаболической инертности и низкой токсичности.

Цель работы — получение конъюгатов аптамеров, содержащих несколько кластеров бора; исследование их физико-химических свойств до и после облучения эпитепловыми нейтронами; изучение влияния кластеров бора на способность аптамеров проникать в клетки глиобластомы.

Выбраны аптамер GL44, способный проникать в клетки глиобластомы, и аптамер Waz, способный проникать через гематоэнцефалический барьер. Синтезированы конъюгаты этих аптамеров, содержащие три кластера бора, введенные в гетероциклические основания методом клик-химии. Проведено облучение образцов эпитепловыми нейтронами на установке «Протонный ускоритель Тандем-БНЗТ» ИЯФ СО РАН. Выполнен сравнительный анализ конъюгатов аптамеров до и после облучения методами гель-электрофореза, обращенно-фазовой ВЭЖХ. Для исследования влияния облучения на вторичную структуру аптамеров использован метод термической денатурации. Для оценки способности конъюгатов аптамеров проникать в клетки в конструкции дополнительно введен флуоресцентный краситель по 3’-концу.

Полученные результаты подтверждают перспективность использования конъюгатов аптамеров с кластерами бора в качестве перспективных агентов для БНЗТ.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-74-20127.

Научный руководитель — канд. хим. наук Д. С. Новопашина

УДК 004.3

Разработка аппаратно-программного комплекса для контроля анаэробных возможностей организма во время RAMP-протокола

Д. А. Буянов [1,2], С. В. Забодаев [2]

[1] Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва
[2] Медицинские компьютерные системы, Москва

Согласно медицинской статистике, снижение уровня физической активности даже в относительно молодом возрасте является самостоятельным фактором риска развития патологических процессов в последующие годы жизни. При разумном улучшении физической подготовки повышаются адаптационные возможности организма и работоспособность.

Для контроля физиологических показателей во время физической подготовки разработан аппаратно-программный комплекс, который состоял из 6-канального электрокардиографа для контроля показателей сердечно-сосудистой системы, спектрометров для регистрации показателей оксигенации мышечных тканей, динамометрического велоэргометра и программного обеспечения.

В испытаниях принимал участие мужчина 25 лет со средним телосложением. На *vastus lateralis*, четырехглавых мышцах бедра, были установлены датчики оксигенации тканей, на торсе закреплены ЭКГ-электроды. Испытуемый выполнял педалирование на велоэргометре, нагрузка на велоэргометре задавалась в соответствии с заранее разработанным алгоритмом. Протокол состоял из 10 этапов, длительность 10 мин, каждую минуту нагрузка повышалась на 25 Вт. Пороговая мощность нагрузки на 10-м этапе составила 275 Вт при частоте сердечных сокращений 193 уд/мин.

При наращивании физической нагрузки ЧСС и деоксигенация тканей возрастали, сатурация падала. До 7-го этапа испытуемый выполнял аэробную работу, наблюдался аэробно-анаэробный переход, на 8-м этапе зафиксирован анаэробный порог. У испытуемого резко возрос ЧСС, а сатурация зафиксировалась на нижней точке. Полученные в ходе эксперимента данные позволяют сделать вывод об их корреляции и возможности контроля физиологических параметров с помощью разработанного АПК.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. С. В. Селищев

УДК 577

Определение условного возраста эритроцитов с учетом процесса везикуляризации

А. В. Гисич

Новосибирский государственный университет

В течение своего срока жизни эритроцит циркулирует в кровотоке 100–120 дней. Старение эритроцита приводит к уменьшению многих его морфологических и физиологических параметров, таких как объем, площадь поверхности, содержание гемоглобина. Кроме того, в старых эритроцитах снижается деформируемость, осмотическая хрупкость и уровень креатина.

Данные изменения эритроцитов происходят главным образом за счет процесса везикуляризации, который тесно связан со старением, жизнеспособностью и гибелью клеток. Известно, что у здоровых людей везикулы быстро удаляются из кровотока, тогда как при некоторых патологиях эритроцитов концентрация везикул может изменяться. Таким образом, построение возрастных распределений является важным инструментом для диагностики заболеваний, связанных как с морфологическими, так и с физиологическими нарушениями эритроцитов.

К сожалению, существующие методы, позволяющие измерять возрастное распределение эритроцитов, недоступны в качестве простого и быстрого инструмента для скрининга состояния здоровья. В большинстве из них используется флуоресцентная или радиоактивная изотопная метка, что является продолжительным и довольно сложным методом, который особенно неудобен в случаях срочной необходимости анализа возрастных показателей. Более того, возрастное распределение, полученное с помощью методов мечения, не имеет зависимости с важными морфологическими изменениями эритроцита в процессе старения или процессом везикуляризации.

Цель данной работы — поиск оптимального алгоритма расчета условного возраста эритроцитов, основанного на модели изменения морфологии эритроцитов при везикуляризации. Для этого проведен анализ морфологии эритроцитов с помощью сканирующей проточной цитометрии, позволяющей измерить основные морфологические характеристики отдельных эритроцитов. Разработан оригинальный алгоритм оценки условного возраста и применен на 50 донорах.

В результате работы предложен новый методологический подход к измерению возраста отдельных эритроцитов, построены распределения по условному возрасту для 50 доноров и определены параметры модели (количество отщепляемых от эритроцита везикул за единицу времени, потеря объема за акт везикуляризации), характеризующие возраст и процесс везикуляризации.

Научный руководитель — Е. С. Ястребова

УДК 577

Моделирование пространственных структур белков и 5′-3′ нетранслируемых районов геномной РНК многокомпонентного вируса *Kindia tick virus*

А. А. Гладышева [1,2], А. В. Гладышева [2]

[1] Новосибирский государственный университет
[2] ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора, р. п. Кольцово

Kindia tick virus (KITV) — новый вирус группы *Jingmen virus* (JMV), переносимый клещами *Rhipicephalus geigyi* и обнаруженный в 2017 г. в Африке. Вирусы группы JMV в настоящее время найдены в Азии, Европе, Америке и Африке. Недавно опубликованы первые сообщения об обнаружении этих вирусов на территории России и их возможной патогенности для человека.

Организация (+) ssRNA генома KITV принципиально отличается от классических флавивирусов. Геном KITV распределен на 4 сегмента, и каждый сегмент генома упакован в отдельную вирусную частицу. Фактически ничего не известно об организации и функциональной активности регуляторных элементов в 5’-3’ нетранслируемых районах (5’-3’ UTRs) вирусного генома. Изучение особенности строения генома позволит понять механизмы реализации генетической информации сегментированного генома KITV.

Определены полногеномные последовательности изолятов KITV/2018/1 и KITV/2018/2 (MW341206-MW3412013). Их филогенетический анализ показал, что изоляты 2018 г. формируют отдельную геногруппу по сравнению с другими вирусами JMV. Множественное выравнивание 5’-3’ UTRs для KITV и MGTV продемонстрировало наличие различных вставок, делеций и нуклеотидных замен в 5’-3’ UTRs. С использованием двух независимых программ Vienna RNAfold и UNA mFold построены пространственные модели вторичных структур 5’-3’ UTRs KITV. В результате анализа моделей обнаружена уникальная вариабельная Y-3 структура в 3’ UTR 2-го сегмента. Вариабельность Y-3 структуры связана с появлением протяженной делеции в 35 п.о. у KITV/2018/1 и KITV/2018/2, что приводит к изменению вторичной структуры этого района. Такого рода видоизменения могут напрямую влиять на эффективность репликации сегментированных флавивирусов в клетках хозяина.

Выполнено моделирование пространственных структур вирусных белков в программе AlphaFold, основанной на нейронных сетях. Предсказанная структура вирусного белка VP1 обладала низким коэффициентом достоверности (pLDDT) 45,64. Это указывает на необычный и неизвестный ранее характер пространственной организации VP1 KITV. По всей вероятности, для решения этой проблемы потребуются новые теоретические и экспериментальные подходы.

Научный руководитель — канд. биол. наук В. А. Терновой

УДК 616.151.4

Моделирование кинетики образования тромбина на основе вязкоупругих свойств цельной крови

О. В. Демкин

Томский государственный университет

Система свертывания крови относится к числу важнейших физиологических систем организма. Ее функционирование обеспечивает в норме поддержание крови в жидком текучем состоянии, а также локальное свертывание крови — тромбообразование — в месте повреждения сосуда.

Различаются три основных механизма остановки кровотечения, которые в зависимости от условий могут функционировать одновременно, с преобладанием одного из механизмов: сосудисто-тромбоцитарный, коагуляционный и фибринолиз [1]. Конечным итогом работы свертывающей системы крови является превращение фибриногена в фибрина под действием тромбина. Производство тромбина в результате каскада биохимических реакций задает динамику процессов наработки фибрина и изменение вязкоупругих свойств крови. По этой причине при анализе состояния системы гемостаза особое внимание уделяется оценке кинетики образования и инактивации тромбина как триггеру гемокоагуляции.

В данной работе рассматривается способ оценки генерации тромбина по результатам определения кинетики конечного продукта свертывания — фибрина, наработка которого определяет динамику вязкоупругих характеристик крови при коагуляции. Наиболее подходящей для такой оценки является отечественная технология низкочастотной пьезотромбоэластографии для определения вязкоупругих характеристик крови при коагуляции в условиях действия периодических сдвиговых деформаций, получаемых с помощью ультразвуковых диагностических сканеров напряжений [2].

В соответствии с кинетическим уравнением прямой трансформации фибриногена в фибрин изменение концентрации тромбина $N(II_a)$ определяется уравнением $N(II_a) = \dfrac{\alpha}{N(I) \times R_{I,II}} \dfrac{d\eta}{dt}$, где $N(I)$ — концентрация фибриногена; $R_{I,II}$ — скорость биохимической реакции; $\dfrac{d\eta}{dt}$ — скорость изменения коэффициента вязкости крови; α — коэффициент пропорциональности.

Предложенный метод оценки кинетики генерации тромбина основан на постулате о прямо пропорциональной зависимости коэффициента вязкости крови от концентрации фибрина в процессе коагуляции.

1. Мусинов И. М. Система гемостаза // Вестн. Рос. военно-мед. академии. 2016. Т. 3, вып. 55. С. 167–170.

2. Демкин В. П., Мельничук С. В., Удут В. В. и др. Физические принципы метода низкочастотной пьезотромбоэластографии для изучения реологических свойств цельной крови // Изв. вузов. Физика. 2019. Т. 62, № 6. С. 47–56.

Научный руководитель — д-р мед. наук, проф., чл.-корр. РАН В. В. Удут

УДК 534:57

Обзор существующих моделей динамики отолитовых органов

К. Е. Доровских, В. А. Зайцев

Томский государственный университет

Отолитовые органы человека являются важнейшей структурной частью вестибулярной системы, отвечающей за восприятие линейного ускорения головы и силы тяжести. В каждом внутреннем ухе человека есть два отолитовых органа: маточка и мешочек. Оба органа содержат чувствительный эпителий, макулу [1, p. 2].

Отолитовые органы имеют сложную структуру, описанную большим количеством параметров, из-за чего изучение их динамики необходимо для более полного понимания работы вестибулярного аппарата. Более того, моделирование динамики отолитовых органов поможет в оптимизации электрической стимуляции органов внутреннего уха.

В работе рассмотрены такие модели динамики отолитовых органов, как одномерная модель динамики отолитовых органов человека [1, p. 8], модель овального мешочка черепах [2] и др. Выполнено их сравнение, изучены основные параметры, преимущества и недостатки. Рассмотрены возможные направления создания новых динамический моделей отолитовых органов.

Проведенный анализ показал, что существующие модели в большинстве случаев представляют собой расширенные одномерные модели, которые рассматривают только низкочастотную стимуляцию. В итоге мы полагаем, что для лучшего понимания реакции отолитов на внешние стимулы стоит перейти от одномерных моделей к двухмерным, а также рассмотреть высокочастотную стимуляцию.

1. Kingma H., van de Berg R. Anatomy, Physiology, and Physics of the Peripheral Vestibular System // Handb. Clin. Neurol. 2016. Vol. 137. C. 1.
2. Davis J. L., Grant J. W. Turtle utricle dynamic behavior using a combined anatomically accurate model and experimentally measured hair bundle stiffness // Hear. Res. 2014. Vol. 318. P. 37–44.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Демкин

УДК 616.151

Изучение влияния механизмов свертывания нативной крови на систему гемостаза в условиях изменяющихся внешних возмущений

А. А. Жуковская

Томский государственный университет

Коагуляция крови является важнейшим биохимическим процессом, отвечающим за остановку кровотечения при повреждении сосудистой стенки. Изучение реологического поведения крови очень важно для понимания кровотока, что помогает выявлять и в дальнейшем лечить сердечно-сосудистые заболевания.

Один из методов лабораторной диагностики системы гемостаза — метод низкочастотной пьезотромбоэластографии, в котором изменение агрегатного состояния крови регистрируется в виде зависимости амплитуды сигнала пьезоэлектрического датчика от времени в процессе ее коагуляции.

Кровь — это неньютоновская жидкость, она становится более жидкой при увеличении скорости сдвиговой деформации. При заданном напряжении сдвига детерминантами вязкости цельной крови являются: гематокрит, деформируемость эритроцитов (т. е. структурная реакция эритроцитов на приложенные силы) и вязкость плазмы [1].

Гематокрит выступает промежуточным параметром в оценке соотношения суммарного объема эритроцитов ($V_{\text{эритр.}}$) и объема плазмы крови ($V_{\text{плазмы}}$), в которой они находятся. В норме $\frac{V_{\text{эритр.}}}{V_{\text{плазмы}}} = 0,4$. Значение гематокрита линейно зависит от концентрации эритроцитов, их агрегации и изменения размеров.

Также существует зависимость от вязкости плазмы, определяющаяся концентрацией фибриногена и других белков: иммуноглобулинов и липопротеинов. Влияние белковых структур особенно выражено при малых скоростях сдвига. При изменениях белкового состава плазмы вязкость крови с малым гематокритом может оказаться выше вязкости крови с большим гематокритом.

Существенная зависимость динамической вязкости от биохимического состава крови и внешних факторов окружающей среды обуславливает принципиальные различия в характере течения крови и, соответственно, порождает разнообразие реологических моделей крови.

Данная работа посвящена оценки роли разных факторов свертывания в процессе коагуляции для различных скоростей сдвиговой деформации.

1. Cowan A. Q., Cho D. J., Rosenson R. S. Importance of Blood Rheology in the Pathophysiology of Atherothrombosis // Cardiovasc. Drugs Therapy. 2012. Vol. 26, № 4. P. 339–348.

Научные руководители —
д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Демкин, д-р мед. наук, проф., чл.-корр. РАН В. В. Удут

УДК 577.323.24

Исследование структуры и термической стабильности нового типа РНК

М. А. Канарская

Институт химической биологии
и фундаментальной медицины, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Вторичная и третичная структура нуклеиновых кислот во многом определят их биологические функции. В ИХБФМ СО РАН изучают один из видов вторичной структуры нуклеиновых кислот — самоограниченные комплексы. Их можно получить, взяв пару олигонуклеотидов, содержащих два попарно комплементарных блока, в одном из олигонуклеотидов эти блоки переставлены относительно 5’- и 3’-концов. Такие блоки могут быть соединены дополнительными линкерами.

Цель данной работы — исследование физико-химических свойств РНК, способных формировать самоограниченные комплексы. Объектом исследования являлись короткие синтетические последовательности РНК — олигонуклеотиды, состоящие из 10 звеньев, соединенных линкерами длиной от 0 до 15 нуклеотидов, а также 2 образца длиной 10 нуклеотидов. Проведено исследование влияния размера линкера в цепях олигомеров на физико-химические свойства формируемых ими комплексов.

Методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала исследована термическая стабильность одиночных цепей и межмолекулярных комплементарных комплексов. Для анализа структуры использованы методы гельэлектрофореза в неденатурирующих условиях и метод атомно-силовой микроскопии.

Показано, что формируются межмолекулярные РНК-комплексы и определена их температура плавления. Исследование показало способность формировать самоограниченные комплексы исследованными олигомерами. Результаты, полученные для РНК-комплексов, сопоставимы с результатами аналогичных экспериментов для комплексов ДНК.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ 20-04-00719 и в рамках государственного задания ИХБФМ СО РАН № 121112900217-3.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. А. Ломзов

УДК 616-71

Безмаркерная классификация клеток при проточной цитометрии на основе широкополосных измерений электрического импеданса

А. В. Конев

Томский политехнический университет

Технология измерения электрических параметров живых клеток широко применяется для интегральной оценки функционального состояния клеток *in vitro*. В последнее время появилась возможность измерять электрические параметры отдельных клеток, в том числе в режиме проточной цитометрии [1]. Однако существующие методы безмаркерной классификации клеток по форме, размерам и функциональному состоянию, основанные на электроимпедансных измерениях, уступают по точности, чувствительности и специфичности традиционным методам с метками.

Представленная работа направлена на решение задачи классификации широкополосных электроимпедансных (ЭИ) спектров, получаемых при измерении отдельных клеток в режиме проточной цитометрии. Основной проблемой разделения клеток по значениям измеренных спектральных характеристик является отсутствие в ЭИ-спектре характерных областей, пиков и других особенностей. В первом приближении ЭИ-спектр типичной живой клетки хорошо описывается характеристикой фильтра нижних частот первого порядка. В большинстве опубликованных работ клетки характеризуются измеренными значениями эквивалентной емкости (Ce) и активного сопротивления (Re), при этом частота среза определяется постоянной времени $\tau = Re \cdot Ce$. Такой подход позволяет разделять клетки по форме и размерам, но, к сожалению, данные параметры не являются специфичными по отношению к функциональному состоянию клеток.

Изменения функционального состояния клеток проявляются в отдельных частях ЭИ-спектра как отклонения от спектра референсной группы клеток и нелинейно связаны с базовыми значениями емкости и сопротивления. Проведены теоретические исследования возможности решения задачи классификации при заданных ограничениях. На основе известных моделей проведены сравнительные численные исследования существующих алгоритмов классификации применительно к задаче дискриминации ЭИ-спектров для оценки функционального состояния клеток.

1. Zhang Z., Huang X., Liu K. et al. Recent Advances in Electrical Impedance Sensing Technology for Single-Cell // Anal. Biosens. 2021. Vol. 11. P. 470.

Научный руководитель — д-р техн. наук К. С. Бразовский

УДК 537.635

Локализация ЭЭГ-электродов по анатомическому МРТ-изображению головы

В. В. Константинов

Новосибирский государственный университет

В основе многих исследований мозговой активности лежит электроэнцефалография (ЭЭГ), позволяющая исследовать суммарную электрическую активность головного мозга по распределению на скальпе, а также определить расположение ее генераторов посредством решения обратной задачи. При этом существует множество техник, направленных на повышение точности локализации. Однако один из существенных источников ошибок остается очень распространенным. В такого рода ЭЭГ-исследованиях желательно, чтобы положение электродов каким-то образом было скорегистрировано со структурной МРТ пациента. Как правило, положение каждого электрода оцифровывается относительно реперных точек, которые, в свою очередь, отмечаются на структурной МРТ пациента. Большинство исследователей оценивает положение реперных точек в ортогональных срезах МРТ на глаз, однако эта процедура подвержена ошибкам и зависит от экспериментатора. Предполагается, что локализованные источники будут подвержены соответствующей ошибке смещения, пропорциональной сумме ошибок, связанных со смещением электродов относительно их реального местоположения. В литературе найдено несколько способов решения этой проблемы, однако в большинстве своем они обладают рядом недостатков. Немаловажными являются и временные затраты на фиксирование положений датчиков в комбинированных методах исследования, что может существенно сказываться на состоянии пациентов.

Цель нашей работы — создание оптимального алгоритма для локализации электродов на голове пациента по структурным T1-изображениям при комбинированном ЭЭГ-МРТ исследовании мозговой активности и определение оптимального типа геля. В работе использован тот факт, что артефакты от электродов и геля, обеспечивающего контакт с кожей головы, могут быть обнаружены на структурных МРТ, в связи с чем на основании расчетов кривизны скальпа возможна их точная локализация для всех основных типов используемых в исследованиях ЭЭГ-шапок (т. е. на 32, 64, 96 и 128 электродов). В исследовании использован томограф Philips Ingenia 3T, а для регистрации сигналов в магнитном поле применялись специализированные тканевые ЭЭГ-шапочки BrainCap MR (Brain Products, Germany).

Научный руководитель — Д. Д. Безматерных

УДК 616.1

Исследование хиломикронов методом ультрафиолетовой сканирующей проточной цитометрии

Н. А. Милованов

Новосибирский государственный университет

Исследование хиломикронов представляется перспективным в связи с тем, что они связаны с проблемой метаболизма жиров и риском развития атеросклероза. Существующие в данное время измерительные приборы для обнаружения малых частиц крови человека не обладают достаточной точностью и чувствительностью для детекции и идентификации всей популяции хиломикронов. Большинство методов исследования являются качественными, т. е. показывают только присутствие частиц в крови без указания их морфологических и оптических характеристик: размера, показателя преломления и формы.

Переход в ультрафиолетовый диапазон для изучения оптических свойств субмикронных частиц перспективен в связи с тем, что коротковолновый ультрафиолетовый свет более чувствителен к неоднородностям частиц, чем длина волны видимого диапазона. Таким образом, представляется перспективным использование ультрафиолетовых лазеров в проточной цитометрии для определения оптических и, следовательно, морфологических характеристик клеток и частиц, особенно малых размеров.

Применение сканирующей проточной цитометрии с использованием ультрафиолетового лазера в качестве основного источника излучения решает проблему точной и быстрой идентификации малых частиц в сравнении с длиной волны. В качестве таких частиц исследуются хиломикроны крови человека. Оптические свойства частиц определяются благодаря измерению индикатрисы светорассеяния при помощи метода глобальной оптимизации DIRECT, который способен находить наиболее близкую теоретическую индикатрису к измеренному сигналу при помощи теории Ми.

Благодаря использованию ультрафиолетового лазера с длиной волны 360 нм стало возможным характеризовать частицы размером менее 200 нм с помощью сканирующей проточной цитометрии, что особенно важно для характеризации хиломикронов, которые оптически малы по сравнению с длиной волны видимого света.

Таким образом, исследование показало, что данный метод способен достоверно отделять популяции хиломикронов от других частиц крови, а также с высокой точностью характеризовать их по размеру и показателю преломления.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. Д. И. Строкотов

УДК 53.082.7, 53.082.9

Создание системы контроля функционала живой клетки при исследованиях с помощью рентгеновского излучения

А. А. Неустроева

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск

Активное развитие источников синхротронного излучения (СИ) 4-го поколения и постоянное совершенствование рентгеновской оптики открывает новую главу в физико-химических методах исследования биологических объектов. Повышение яркости, уменьшение времени экспериментов позволяет получать трехмерные изображения живых объектов с рекордным разрешением [1]. Но нельзя полностью исключить радиационное повреждение клеток, которое приводит к изменениям их функционала в процессе синхротронного эксперимента: часть полученного в эксперименте изображения может отражать информацию о живом объекте, а часть — об уже неживом.

Цель настоящей работы — создание системы окружения образца для контроля за функционалом единичной живой нативной клетки непосредственно во время синхротронного эксперимента с использованием неповреждающих клетку зондов, оптимизированных для использования на СИ.

1. Системы окружения образца, существующие на данный момент на источниках СИ, позволяют контролировать и изменять физические параметры, обеспечивать напуск газов и пр. Систем окружения биологических образцов, позволяющих контролировать биологические изменения, на источниках СИ не существует.

2. В связи с происходящей в настоящее время сменой парадигмы в радиобиологии и серьезным усовершенствованием источников СИ возникает необходимость пересмотра стандартного подхода к количественной радиобиологии.

3. Объектом радиобиологических исследований на СИ являются: а) ткани и колонии клеток; б) фиксированные (неживые) клетки. Упоминаний о радиобиологических экспериментах на СИ, объектом которых была бы единичная живая нативная клетка, не найдено.

Создание подобной системы предполагает применение как физических, так и биологических методов контроля параметров образца; разработку и установку зондов для реализации этих методов; создание и воплощение схемы прибора с возможностью комбинации методов контроля; обеспечение передачи многоканального сигнала от исследуемой нативной клетки в электронную систему регистрации и интерпретацию полученных данных.

1. Chkhalo N. I. et al. X-ray optical scheme for station “nanoscope” for biological research in the water window. 2020. URL: https://doi.org/10.1063/5.0031702

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Я. В. Ракшун

УДК 53.06

Исследование воздействия сальбутамола на газотранспортную функцию организма человека

И. Г. Семенова

Новосибирский государственный университет

Одной из важных задач современной науки является быстрое диагностирование заболеваний человека. Изменения характеристик крови ведут к отклонению функционирования различных систем в организме и, как следствие, возникновению заболеваний. Именно поэтому очень важно разрабатывать новые методы диагностики состояния крови, в том числе и клеток, входящих в ее состав. Эритроциты — красные клетки крови — играют важную роль в газотранспортной функции в организме человека. Детальная характеристика морфофункциональных параметров эритроцитов необходима для контроля риска гипоксической стадии в организме и других специфических заболеваний, в том числе сердечно-сосудистой патологии. В данной работе предполагается провести исследование воздействия сальбутамола на газотранспортную функцию организма человека.

Сальбутамол — препарат, применяющийся для купирования приступов бронхиальной астмы и предупреждения преждевременных родов. Он обладает рядом метаболических эффектов, например снижает содержание калия в плазме. Отсюда возникает цель — проверить, влияет ли сальбутамол на регулирование анионного обмена эритроцитов, а значит, и на транспорт кислорода и углекислого газа.

Для выполнения работы проведены эксперименты на сканирующем проточном цитометре в лаборатории цитометрии и биокинетики. Сканирующий проточный цитометр позволяет получить сигнал светорассеяния одиночной частицы. Благодаря однозначной связи между углом рассеяния и регистрируемым сигналом можно построить индикатрису светорассеяния (зависимость амплитуды рассеянного света от угла рассеяния). Индикатриса светорассеяния определяется свойствами частицы и сильно зависит от формы, размеров, показателя преломления и т. д. Для получения характеристик частицы необходимо решить обратную задачу светорассеяния. Для эксперимента взята венозная кровь здорового донора. Измерены кинетики лизисов эритроцитов, которые выдерживались в растворе сальбутамола разное количество времени.

В данной работе выявлена прямая зависимость интенсивности анионного обмена эритроцитов от времени воздействия сальбутамола на кровь. В дальнейших исследованиях планируется проверить влияние разного количества сальбутамола на газотранспортную функцию эритроцитов.

Научный руководитель — Е. С. Ястребова

УДК 004.492

Моделирование адаптации метаболизма клеток скелетных мышц человека в ответ на физическую нагрузку с учетом их утомляемости

А. Ю. Сон

Новосибирский государственный университет
Федеральный исследовательский центр
информационных и вычислительных технологий, Новосибирск

Скелетные мышцы вносят основной вклад в изменения метаболизма человека во время выполнения физических упражнений благодаря высокой способности к адаптации. В последние десятилетия для количественного описания физиологических, метаболических процессов в мышцах активно разрабатывали различные математические модели: начиная с описания отдельных ферментативных процессов энергетического метаболизма [1] и заканчивая более расширенными моделями, учитывающими оба типа мышечных волокон [2]. Такие модели позволили обобщить накопленные эмпирические данные и дать полное представление об изменениях, происходящих в мышцах и измерение которых не всегда возможно экспериментальными методами. Однако существующие варианты моделей не учитывают одно из важных свойств скелетной мышечной ткани — утомляемость, проявляющуюся в снижении мощности при продолжительных или интенсивных физических нагрузках.

В данной работе в качестве базовой использовалась модульная модель, связывающая метаболические процессы, сигнальные пути с регуляцией генной экспрессии в скелетной мышце [3]. Базовая модель расширена за счет учета утомляемости, которая представляет собой функциональную зависимость от концентрации фосфатов и pH, влияющих на активацию и чувствительность миозин-актиновых нитей. Для валидации расширенной версии модели использовался протокол прерывистого аэробного упражнения: периодические разгибания колена в течение 4 мин [4]. Расчеты и анализ модели проводились в платформе BioUML [5].

1. Lambeth M. J., Kushmerick M. J. A Computational Model for Glycogenolysis in Skeletal Muscle // Ann. Biomed. Eng. 2002. Vol. 30, № 6. P. 808–827.
2. Li Y. et al. Computational Model of Cellular Metabolic Dynamics in Skeletal Muscle Fibers During Moderate Intensity Exercise // Cell. Mol. Bioeng. 2012. Vol. 5, № 1. P. 92–112.
3. Akberdin I. R. et al. A Modular Mathematical Model of Exercise-Induced Changes in Metabolism, Signaling, and Gene Expression in Human Skeletal Muscle // Int. J. Mol. Sci. 2021. Vol. 22, № 19. P. 10353.
4. Sundberg C. W. et al. Bioenergetic basis for the increased fatigability with ageing // J. Phys. 2019. Vol. 597, № 19. P. 4943–4957.

5. Kolpakov F. et al. BioUML: an integrated environment for systems biology and collaborative analysis of biomedical data // Nucleic Acids Res. 2019. Vol. 47, № W1. W225–W233.

Научный руководитель — канд. биол. наук И. Р. Акбердин

УДК 004.891

Вязкость крови как детерминанта гемодинамики коронарного кровотока

А. Т. Суюндукова

Томский государственный университет

Сердечно-сосудистые заболевания в мире являются причиной критического числа смертей, составляя почти 31 %, большинство из которых связано с атеросклерозом коронарных артерий [1]. В настоящее время не существует общепризнанной модели, отражающей вязкие свойства крови. Численное моделирование коронарного кровотока даже в нормальных физиологических условиях является нетривиальной задачей из-за сложной анатомии коронарных сосудов, гибкости артериальной стенки, пульсирующего потока, переменного сосудистого сопротивления и неньютоновских свойств крови.

В связи с этим необходима разработка методов и средств информативной оценки состояния сердечно-сосудистой системы на основе применения быстрых, экономичных и неинвазивных методик диагностики нарушений коронарных сосудов, которые пригодны для широкого использования в целях своевременного и оперативного выявления предпатологических состояний [2].

Несмотря на обилие разнообразных статей, в которых применяются различные математические модели и граничные условия для моделирования кровотока, следует отметить, что эффективность и реалистичность вычислительных моделей существенно зависит от реологии крови и физиологических условий ее течения.

В связи с этим данное исследования посвящено оценке пульсовой скорости кровотока в стенозированном коронарном сосуде и анализу поведения вязкости крови в данном интервале скоростей.

1. Virani S. S., Alonso A., Benjamin E. J. et al. Heart Disease and Stroke Statistics-2020 Update. A Report from the American Heart Association // Circulation. 2020. Vol. 141, № 1. P. e139–e596.
2. Carvalho V., Pinho D., Lima R. A. et al. Blood Flow Modeling in Coronary Arteries: A Review // Fluids. 2021. Vol. 6, № 2. P. 53.

Научные руководители —
д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Демкин, д-р мед. наук К. В. Завадовский

УДК 620.3

Влияние параметров гидротермального синтеза на морфологию, структуру и свойства магнитных наночастиц $MnFe_2O_4$ для тераностики

А. О. Уракова, Р. В. Чернозем,
М. А. Сурменева, А. Л. Холкин

Томский политехнический университет

Магнитоэлектрические наночастицы (НЧ) — перспективные кандидаты на роль наноносителей для борьбы с онкологией. Они состоят из пьезоэлектрической оболочки и магнитострикционного ядра и обладают рядом преимуществ: точное позиционирование с помощью внешнего постоянного магнитного поля, высвобождение лекарства с помощью переменного магнитного поля. Однако влияние параметров синтеза на морфологию, структуру и физические свойства таких НЧ слабо изучены, а в качестве магнитострикционных соединений используют токсичные элементы [1–3]. Цель работы — исследование закономерностей формирования биосовместимых магнитострикционных НЧ $MnFe_2O_4$, полученных гидротермальным методом.

Биосовместимые магнитные НЧ $MnFe_2O_4$ получены гидротермальным методом при температуре 180 и 200 °С в течение 3, 6 и 12 ч. Для этого $FeCl_3 \cdot 6H_2O$, $MnCl_2 \cdot 4H_2O$ и NaOH, растворенные в деионизованной воде, смешивались в автоклаве с заполнением в 70 %. После синтеза НЧ промывались с помощью магнитной сепарации и подвергались лиофильной сушке в течение 24 ч. Морфология, структура и намагниченность сформированных НЧ изучены с помощью растровой электронной микроскопии, рентгенофазового анализа и вибрационного метода соответственно.

С увеличением времени синтеза с 3 до 12 ч наблюдалось изменение морфологии НЧ с квазисферической на стержневидную с последующим формированием агломератов и роста размеров НЧ. Увеличение температуры синтеза с 180 до 200 °С позволило сократить время формирования стержневидных НЧ. Образцы, содержащие стержневидные НЧ, показали наибольшую намагниченность.

Таким образом, результаты исследования позволили выявить закономерности формирования НЧ $MnFe_2O_4$ гидротермальным методом. В зависимости от области биомедицинского применения возможен контроль геометрии, размеров и магнитных свойств НЧ $MnFe_2O_4$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-588 от 1.06.2021).

1. Betal S. et al Core-shell magnetoelectric nanorobot — A remotely controlled probe for targeted cell manipulation // Sci. Rep. 2018. Vol. 8. P. 1–9.

2. Nagesetti A. et al. Abhignyan Nagesetti et.al Multiferroic coreshell magnetoelectric nanoparticles as NMR sensitive nanoprobes for cancer cell detection // Sci. Rep. 2017. Vol. 8. P. 1–9.
3. Chen X.-Z. et al. Hybrid Magnetoelectric Nanowires for Nanorobotic Applications: Fabrication, Magnetoelectric Coupling, and Magnetically Assisted in Vitro Targeted Drug Delivery // Adv. Mater. 2017. Vol. 29. P. 1605458.

Научный руководитель — д-р техн. наук, проф. Р. А. Сурменев

УДК 539.1.04

Разработка экспериментальной модели лучевого пневмонита при облучении здоровой ткани легких у крыс

Н. А. Филатова

Новосибирский государственный университет
Национальный медицинский исследовательский центр
им. академика Е. Н. Мешалкина, Новосибирск

Немелкоклеточный рак легкого (НМКРЛ) — наиболее распространенный тип рака легкого в мире среди всех злокачественных новообразований. Лучевая терапия играет ключевую роль при радикальном и паллиативном лечении НМКРЛ. Однако риск развития побочных эффектов, таких как лучевой пневмонит и фиброз легочной ткани, остается актуальным из-за крайне ограниченных исследований.

Цель исследования — создание экспериментальной модели лучевого пневмонита после прецизионного облучения легких крыс под визуальным контролем; оценка взаимосвязи изменений физической плотности легочной ткани, объема и дозы облучения. Задачи: 1) разработка методики облучения мишени в легких у крыс; 2) выбор дозы и локализации облучения; 3) проведение топометрической подготовки и облучения мишени в легких у крыс; 4) наблюдение развития лучевого пневмонита посредством еженедельного КТ-сканирования; 5) анализ корреляций параметров облучения и выживаемости животных.

Для исследования определены 4 группы крыс-самцов линий Wag и Wistar. Экспериментальная работа состояла из двух этапов: 1) однократное облучение мишени в статическом или динамическом (VMAT) режимах; 2) проведение КТ-исследований для наблюдения развития лучевых повреждений. Использовался облучатель с визуальным контролем SmART+ (Precision, Коннектикут, США). Перед облучением и КТ измерялись вес и частота дыхательных движений.

Выполнено облучение различными дозами и методиками мишеней в легких у 14 крыс, а также КТ-исследования в течение 16 недель. Обработаны снимки 4 крыс. Построены корреляции параметров облучения. Установлено, что увеличение средней дозы (D_{mean}) на легкое более 3 Гр приводит к увеличению смертности. Доза облучения 30 Гр приводит к смертности вне зависимости от D_{mean} и D_5 (на легкое, сердце, спинной мозг), а объем облученного легкого более 15 $см^3$ — к увеличению смертности в наблюдаемых группах.

Для достижения целей исследования планируется выполнение анализа КТ-снимков за весь период наблюдения. Для выявления взаимосвязи дозы облучения и развития пневмонита намечается построение графиков зависимости изменения физической плотности от времени наблюдения.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук В. Е. Блинов, О. А. Пашковская

УДК 577

Термическая и ферментативная деградация метаболитов в биологических образцах при пробоподготовке

М. В. Фоменко

Новосибирский государственный университет

Одной из главных проблем количественной метаболомики является деградация органических веществ в образце из биологической ткани в процессе пробоподготовки. Изменения происходят в связи с термическими распадами молекул и энзиматическими реакциями. Таким образом, для проведения исследований, основанных на данных о концентрациях метаболитов в различных тканях, необходимо знать, какие вещества неустойчивы к условиям проводимой пробоподготовки, и учитывать эту информацию в полученных результатах.

Исследование проводилось с двумя типами тканей: человеческой кровью и крысиным мозгом. Чтобы установить степень влияния термических и ферментативных реакций, проведено два типа экспериментов. В первом метаболиты, экстрагированные из мозга и крови, хранились при +4 °C в течение суток, при этом активность ферментов тушилась метанолом на этапе гомогенизации. Во втором типе экспериментов водные гомогенаты крови и мозга хранились в течение суток при +4 °C. Аликвоты экстрактов и гомогенатов забирались через 0; 0,5; 1; 2; 3; 5 и 24 ч. По итогам анализа концентраций метаболитов в тканях, полученных методом ^{1}H ЯМР, установлено, что после остановки ферментативных процессов как для крови, так и для мозга метаболомный состав образцов оставался постоянным в течение суток. При хранении гомогенатов тканей в связи с активностью ферментов прежде всего деградации подверглись метаболиты, вовлеченные в генерацию клеточной энергии. Так, НАДН и НАД практически полностью распались уже в процессе гомогенизации. Также изменения в концентрациях наблюдались практически для всех групп метаболитов. Характерные времена изменения концентраций одних и тех же соединений значительно различаются между кровью и мозгом. Также для некоторых веществ различаются цепочки превращений. Для мозга характерна более глубокая степень деградации метаболитов, чем для крови. Из этого следует, что мозг обладает заметно более высоким уровнем ферментативной активности, чем кровь.

Исходя из полученных результатов, следует, что для получения верных метаболомных данных необходимо тушить ферментативную активность на самой начальной стадии пробоподготовки. Необходимо брать в расчет тип используемой ткани и предполагаемую ферментативную активность. Чем она ниже, тем меньше требования к температуре и времени пробоподготовки.

Научный руководитель — д-р хим. наук, проф. Ю. П. Центалович

УДК 616.151.4

Реологическая модель крови и оценка гемостатического потенциала на основе вязкоупругих свойств цельной крови

А. О. Цибулина, О. В. Демкин

Томский государственный университет

Исследование сосудистого кровотока — актуальная задача, поскольку причина развития многих сердечно-сосудистых заболеваний связана с нарушением гемодинамики. В настоящее время не существует общепризнанной модели, отражающей реологические свойства крови. Согласно общей классификации, существует множество вариантов неньютоновских моделей, которые моделируют поведение крови с разной степенью точности.

Реологические свойства крови определяются системой регуляции агрегатного состояния крови, важнейшей характеристикой которой является гемостатический потенциал (ГП) — показатель баланса свертывающей и противосвертывающей систем. В этой связи адекватность и достоверность методов оценки ГП играет ключевую роль в определении реологических свойств крови. В разработке таких методов особую значимость приобретает привлечение знаний о физических свойствах крови: вязкости и пластичности, определяющих ее реологию. Реологические свойства крови зависят от многих факторов: внешних, определяемых гемодинамическими условиями, и внутренних, зависящих от клеточных компонент и биохимического состава плазмы.

Существующие гемодинамические модели не учитывают значение реологических факторов крови, во многом определяющих характер и состоятельность гемодинамики. В настоящее время самые сложные модели кровотока *in vivo* учитывают только устойчивое сдвиговое поведение реологии крови, часто используя обобщенную ньютоновскую модель [1].

Целью данной работы является разработка динамической реологической модели крови в условиях периодических изменений сдвиговых напряжений, изменяющихся от времени по гармоническому закону.

Основное уравнение реологической модели крови определяется формулой $\tau = \eta(\dot{\gamma}, p)\dot{\gamma}(1),$ где η — комплексный показатель вязкости крови с учетом ее вязкоупругих свойств; p — параметр, задающий набор внутренних реологических факторов; γ — скорость сдвиговых деформаций. Набор внутренних реологических факторов крови определяется из сравнения ГП, измеренного по технологии низкочастотной пьезотромбоэластографии [2] и вычисленного с использованием заданной реологической модели.

1. Horner J. S., Armstrong M. J., Wagner N. J. et al. Investigation of Blood Rheology Under Steady and Unidirectional Large Amplitude Oscillatory Shear // J. Rheology. 2018. Vol. 62, № 577. URL: https: // doi.org/10.1122/1.5017623.

2. Тютрин И. И., Удут В. В. Низкочастотная пьезотромбоэластография цельной крови: алгоритмы диагностики и коррекции гемостазиологических расстройств. Томск: Изд. дом ТГУ, 2016.

Научные руководители — д-р мед. наук, проф., чл.-корр. РАН В. В. Удут,
д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Демкин

УДК 577

Измерение кинетики образования димеров тромбоцитов с использованием АДФ по индикатрисам светорассеяния на длине волны 660 нм

У. В. Цырульникова

Новосибирский государственный университет
Институт химической кинетики
и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Тромбоциты — это безъядерные кровяные клетки, в неактивированном состоянии представляющие собой сплюснутые пластины диаметром 2–4 мкм. В настоящее время показано, что повышение агрегации тромбоцитов свидетельствует о развитии и прогрессировании сердечно-сосудистых заболеваний. Активацию и последующую агрегацию тромбоцитов вызывают различные по природе вещества: тромбин, коллаген, АДФ, адреналин и др. Под воздействием индукторов агрегации происходит видоизменение формы тромбоцитов от дисковидной до сферической с образованием псевдоподий и их склеивание — агрегация тромбоцитов.

Наиболее распространенным методом оценки агрегации тромбоцитов является турбидиметрический метод Борна. Основная проблема данного метода — недостаточная для измерения димеризации (первичной элементарной стадии агрегации) чувствительность агрегометра. В связи с этим с помощью агрегометра нельзя оценить константу скорости димеризации. Метод сканирующей проточной цитометрии позволяет измерить индикатрисы светорассеяния тромбоцитов. Индикатрисы содержат информацию, потенциально достаточную для идентификации мономеров и димеров тромбоцитов.

Цель данной работы — измерение кинетики образования димеров с последующим определением константы димеризации для тромбоцитов с помощью сканирующего проточного цитометра. Для этого проведен эксперимент с измерением индикатрис светорассеяния при различных временах агрегации. Для записи индикатрис использовался лазер с длиной волны 660 нм, а в качестве индуктора агрегации выбран АДФ. Разработан алгоритм по отделению димеров тромбоцитов от мономеров по индикатрисам в диапазоне углов рассеяния от 10º до 70º.

В результате работы из распределений по интегралам от индикатрис светорассеяния получена зависимость доли димеров в пробе от времени агрегации. Из данной зависимости найдена константа димеризации.

Научный руководитель — А. Л. Литвиненко

УДК 53.087

Сравнение скоростей глаз для различных конфигураций электродов электроокулографии во время горизонтального теста импульсных движений головы

А. С. Шаленов, В. А. Зайцев

Томский государственный университет

Электроокулография (ЭОГ) и видеоокулография (ВОГ) являются наиболее распространенными методами детектирования движения глаз, применяемыми для клинической оценки состояния вестибулярной функции [1].

В работе произведена запись скоростей глаз с использованием одновременно двух методов: ЭОГ и ВОГ. Запись сигналов осуществлялась с помощью устройств IMPAQ (*Maastricht, the Netherlands*), ICS Impulse (*GN Optometrics, Taastrup, Denmark*). На лице добровольца были прикреплены электроды ЭОГ, а поверх надеты очки ВОГ. Затем на основе записей проведено сравнение скоростей глаз, записанных с помощью ЭОГ, относительно скорости головы и глаз, регистрируемых ВОГ, при трех конфигурациях электродов: бинокулярной, монокулярной, усреднении отдельных записей правого и левого глаз.

Составлена программа обработки полученных сигналов в пакете Matlab r2014b (The MathWorks, Inc., Natick, Massachusetts, United States), произведена фильтрация сигналов обеих систем и их передискретизация, сигналы выровнены по времени и совмещены при помощи кросс-корреляции.

Выполнено сравнение конфигураций электродов по амплитуде сигнала и наличию шумов. Построен доверительный интервал площадей под кривыми каждого сигнала. Посчитана стандартная ошибка измерений. Показано, что записи ЭОГ при разных конфигурациях электродов различаются по величине амплитуды и наличию шумов, однако в каждом случае присутствует межокулярная асимметрия [2]. В результате исследований доказано, что монокулярная конфигурация является наиболее оптимальной в соотношении «скорость глаз / скорость головы».

1. Зайцев В. А., Плешков М. О., Старков Д. Н. и др. Сравнительный анализ методов окулографии для диагностики вестибулярного аппарата // Изв. высших учеб. заведений. Физика. 2021. Т. 64, № 10. С. 55–59.

2. Liu H., Liao F., de la Villa P. Ocular Asymmetry in Electrooculographic Responses // Symmetry. 2021 Vol. 13, № 10. P. 1809–1821.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. П. Демкин

УДК 615.8

Сравнение результатов лечения метастазов в головном мозге при гипофракционировании и этапной радиохирургии

А. В. Шиленко

Новосибирский государственный университет
ЛДЦ «Медицинский институт им. Сергея Березина», Новосибирск

Онкологические заболевания относятся к числу самых распространенных заболеваний в мире, от которых, по данным *The Global Cancer Observatory* на 2020 г., умерло более 9,9 млн человек [1]. Характерными особенностями рака являются быстрое деление клеток, способность проникать в окружающие ткани и метастазировать в другие органы. Метастазы в головном мозге возникают у 20–40 % онкологических больных [2]. Основными методами лечения являются нейрохирургическое вмешательство, лучевая терапия, а также активно развивается стереотаксическая радиохирургия [3]. Преимущество радиохирургии — неинвазивность, эффективность воздействия на очаги и низкая вероятность лучевых реакций после лечения. Однако у пациентов с объемом опухоли, превышающим 3 см в диаметре, при подведении радиохирургических доз (> 18 Гр) впоследствии высок риск постлучевых осложнений, поэтому все чаще применяют радиохирургические методы гипофракционирования и этапной радиохирургии.

Рассмотрены группа из 28 пациентов, прошедших процедуру гипофракционирования, и группа из 24 пациентов, прошедших этапную радиохирургию. Пациенты отобраны по следующим критериям: возраст 18–80 лет с оценкой функционального статуса Карновского (KPS) > 60; объем опухоли > 10 см^3; лечение в несколько этапов. Клиническое исследование проводилось на установке *Leksell Gamma Knife Icon* (Стокгольм, Швеция). Подведенная доза находилась в диапазоне 21–30 Гр.

Целью нашего исследования являлось изучение и сравнение результатов применения методов гипофракционирования и этапной радиохирургии при метастазах в головном мозге.

1. Ferlay J., Ervik M., Lam F. et al. Global Cancer Observatory: Cancer Today. Lyon, France: Int. Agency Res. Cancer. 2020. URL: https://gco.iarc.fr/today (дата обращения: 06.02.2022).
2. Barnholtz-Sloan J. S., Sloan A. E., Sawaya R. E. at all. Incidence proportions of brain metastases in patients diagnosed (1973 to 2001) in the Metropolitan Detroit Cancer surveillance System // J. Clin. Oncol. 2004. Vol. 22. P. 2865–2872. URL: https://doi.org/10.1200/JCO.2004.12.149.
3. Корниенко В. Н., Пронин И. Н. Диагностическая нейрорадиология. М.: Ин-т им. Бурденко, 2008. Т. 1. 455 с.

Научный руководитель — канд. техн. наук К. О. Ставицкая

УДК 577.323.24

Расчет энергии формирования дуплексов ДНК/ДНК методами молекулярной динамики с использованием метода взвешенных диаграмм

И. И. Юшин

Новосибирский государственный университет
Институт химической биологии
и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск

Производные нуклеиновых кислот (НК) активно используются для таргетного лечения различных заболеваний. Одним из наиболее важных свойств таких соединений является возможность эффективно взаимодействовать с комплементарными последовательностями НК. Поэтому предсказание гибридизационных свойств новых производных НК кислот является актуальной задачей. Для ее решения используют различные методы, одним из которых является метод молекулярной динамики.

В последние десятилетия достигнут большой прогресс в разработке различных подходов для расчета термодинамических параметров методами молекулярного моделирования. Но, несмотря на это, существенными недостаткам использования таких подходов являются большие затраты вычислительной мощности и время вычислений для получения точных результатов.

В данной работе исследована применимость методов молекулярного моделирования для определения гибридизационных свойств ДНК/ДНК-дуплексов. Для построения траекторий выбран метод классической молекулярной динамики, а для их анализа — эффективный и быстрый метод взвешенных диаграмм (WHAM), при помощи которого проводили расчет свободной энергии Гиббса, энтропии и энтальпии формирования ДНК/ДНК дуплексов различной длины и GC-состава.

Экспериментально термодинамические параметры ДНК/ДНК дуплексов определяли методом термической денатурации с оптической регистрацией сигнала. Проанализировав кривые термической денатурации, мы определили доли одноцепочечной и двуцепочечной форм в растворе и рассчитали константу равновесия, энтальпию, энтропию и энергию Гиббса.

Используемый в данной работе метод компьютерного расчета показал высокую эффективность. Наблюдается хорошая корреляция свободной энергии Гиббса, определенная методом WHAM и экспериментально. В будущем планируется исследовать применимость данного метода для определения гибридизационных свойств модифицированных дуплексов ДНК/ДНК.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХБФМ СО РАН № 121112900217-3.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. А. Ломзов

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

УДК 620.3

Development of biomedical electronic components based on graphene-based nanomaterials

E.G. Abyzova, E.M. Dogadina

Tomsk Polytechnic University

Modern medicine needs postoperative patient monitoring, particularly the healing of tissues and the conditions of installed implants. Widely used methods such as computed tomography or radiography show high efficiency, but require visiting clinics, which excludes the possibility of continuous monitoring of patients' condition. The development of implantable electronics provides users with a unique opportunity for continuous monitoring of the state of health. Ideal for the environment and convenience of patients and doctors would be the use of fully biodegradable materials that do not require extraction from the body [1].

Carbon-based materials are widely considered in various fields of biomedical research, including drug delivery systems and tissue scaffolds [2]. One of the new materials is graphene oxide (GO), it has many advantages over noble metals, which are most often used in implants. GO also has low cost and allows one to create flexible surfaces. It can be turned to graphene-like form by chemical, thermal, or photonic reduction making the dielectric into an electrically conductive graphene material known as reduced graphene oxide (rGO).

We propose using rGO with a biodegradable polymer to develop an electronic component for wireless monitoring of the implant condition. This electronic component is possible thanks to the free-form patterning capabilities of laser-reduced GO films.

Polylactic acid was selected as a substrate due to its integration with the rGO. A GO film is deposited on the polymer scaffold, and then reduced by a laser with a wavelength of 405 nm. Further, the samples are tested for mechanical and chemical stability. PLA and PLA surfaces functionalized with rGO were successfully tested for biocompatibility using 3T3 L1 mouse fibroblast cells. Our experimental results were complemented with modeling and calculation results of the spectrum of reflection coefficients of the rGO/PLA electronic component.

The biodegradable electronic components being developed will allow monitoring the fate of smart biodegradable implants in the human body.

1. El-Safty S.A., Shenashen M.A. Nanoscale dynamic chemical, biological sensor material designs for control monitoring and early detection of advanced diseases // Materials Today Bio. 2020. Vol. 5. 100044.
2. Harrison B.S., Atala A. Carbon Nanotube Applications for Tissue Engineering // Biomaterials. 2007. Vol. 28, iss. 2. P. 344–353.

Scientific supervisor — PhD, Prof. E.S. Sheremet

УДК 629.119; 691.175

Способы восстановления деталей сельскохозяйственной техники из полимерных композиционных материалов

Е. В. Агафонова, Т. В. Возженникова, Н. А. Шаповаленко

Новосибирский государственный аграрный университет

Полимерные композиционные материалы в конструкции сельскохозяйственной техники в последние годы используются достаточно широко. При достаточно высокой стоимости их применение является оправданным за счет своих свойств и низкого удельного веса машин [1]. Такие материалы применяют при проведении ремонтных и восстановительных работ деталей сельскохозяйственной техники, они создают конкуренцию традиционным методам ремонта и восстановления (сварка, наплавка, пайка, механическая обработка, пластическое деформирование).

Ремонт деталей полимерными материалами (пластмассами) прост, экономичен и надежен. Для восстановления деталей используют чистые полимеры (полистирол, полиэтилен, полипропилен и др.), полимеры с наполнителями, пластификаторами, красителями, отвердителями и другими добавками, а также синтетические клеи. Преимуществами применения полимерных материалов являются простота технологического процесса, низкая трудоемкость и стоимость работ. Существует множество способов восстановления и ремонта деталей с применением полимерных композиционных материалов, например восстановление неподвижных соединений подшипников качения композицией на основе акрилового адгезива АН-105 [2], позволяющее значительно увеличить долговечность подшипниковых узлов и снизить себестоимость. Использование полимер-полимерной композиции АН-15 и нанополимерной композиции АН-11 [3] для восстановления посадочных мест подшипников качения позволяет применять методы неразрушающего контроля качества восстановленных неподвижных соединений подшипников.

Для повышения ресурса быстроизнашивающихся деталей применяют наплавленный слой, который имеет гетерогенную структуру, получаемую из композиционного порошкового материала, состоящего из двух фаз: матричной и упрочняющей [4]. При ремонте корпусных деталей сельскохозяйственной техники, а также трубопроводов, имеющих трещины и пробоины, используют композиции на основе эпоксидных смол. Полимерные композиции в виде порошков наносят на изношенную поверхность различными методами напыления. Например, газопламенное напыление широко применяют для устранения вмятин и неровностей на кузовах сельскохозяйственных машин.

Таким образом, способов восстановления деталей сельскохозяйственной техники из полимерных композиционных материалов множество, но для более широкого использования этих способов необходимо разработать методику применения различных способов для типовых деталей сельскохозяйственных машин.

1. Образцов Д. К., Агафонова Е. В. Тенденции применения полимерных материалов в конструкции кузовов современных автомобилей и тракторов // Состояние и инновации технического сервиса машин и оборудования: Материалы XII регион. науч.-практ. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых, посвящ. памяти доц. М. А. Анфиногенова. Новосибирск: Новосиб. гос. аграрный ун-т, 2020. С. 120–123.
2. Бутин А. В. Технология восстановления корпусных деталей полимер-полимерным композиционным материалом // Наука в центральной России. 2013. № 4. С. 32–35.
3. Перспективные полимерные, полимер-полимерные и нанополимерные композиционные материалы для ремонта подшипниковых узлов сельскохозяйственной техники / Р. И. Ли, С. И. Кондрашин, А. В. Бочаров и др. // Тр. ГОСНИТИ. 2011. Т. 108. С. 238–240.
4. Перспективы восстановления изношенных деталей машин наплавкой композиционных порошковых материалов / К. З. Косимов, А. Ш. Муйдинов, М. Т. Мадазимов, Х. Х. Хошимов // Вестн. Башкир. гос. аграрного ун-та. 2017. № 3 (43). С. 54–59.

Научный руководитель — ст. преподаватель Е. В. Агафонова

УДК 548.5+54.02

Выращивание монокристаллов твердого раствора на основе BaF_2, легированного Yb^{3+}/Tm^{3+} высокого оптического качества для фотоники

А. А. Александров

Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва
Институт общей и неорганической химии
им. Н. С. Курнакова РАН, Москва

Ап-конверсионные люминофоры на основе фторидов перспективны для люминесцентной термометрии, биовизуализации, преобразования солнечной энергии и защиты от контрафакта. Разработаны различные способы синтеза фторидных порошков люминофоров, но определение наиболее эффективных из них является нетривиальной задачей. Для проведения достоверного сравнения люминесцентных свойств необходимо измерение абсолютного квантового выхода люминесценции в интегрирующей сфере, что в случае порошков затруднительно. Для решения этой проблемы предлагается определение относительного квантового выхода люминесценции с использованием стандарта, в качестве которого предлагается использовать монокристаллы с определенными величинами квантового выхода люминесценции. Цель работы — выращивание и физико-химическая характеризация монокристаллов фторида бария, легированного иттербием и тулием.

Монокристаллы выращивали методом вертикальной направленной кристаллизации в вакуумной печи со фторирующей атмосферой CF_4. Характеризация монокристаллов проведена методами порошкового рентгенофазового анализа (Bruker D8, CuKα-излучение), рентгеноспектрального микроанализа на растровом электронном микроскопе Carl Zeiss NVision 40 и люминесцентной спектроскопии.

В результате выращена серия монокристаллов BaF_2 : Tm^{3+} (0,4 мол.%) : Yb^{3+} (от 2 до 14 мол.%). Определенные параметры решетки и химический состав выявили закономерное изменение характеристик при увеличении содержания иттербия. Определены величины квантового выхода и предложены составы для апробации в качестве стандарта ап-конверсионной люминесценции.

Автор работы выражает благодарность за помощь В. А. Конюшкину, А. Н. Накладову, В. В. Воронову, Э. И. Мадирову, А. А. Туршатову и С. В. Кузнецову.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 21-53-12017).

Научные руководители — д-р хим. наук, проф. П. П. Федоров,
чл.-корр. РАН, д-р хим. наук В. К. Иванов

УДК 544.2

Квантово-химическое исследование адсорбции лития на поверхности 2D-наноматериалов

В. А. Алексеев

Институт неорганической химии
им. А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В современном мире литий-ионные батареи являются одним из важнейших энергоносителей. Потребности современного общества накладывают серьезные требования к их техническим характеристикам: циклической стабильности, емкости, безопасности. Определяющую роль в эффективности батарей играют процессы миграции ионов лития в слоях анодных материалов. С помощью методов квантовой химии можно моделировать процессы адсорбции катионов щелочных металлов, что позволяет получать ценную информацию о свойствах материалов до непосредственного синтеза.

В качестве модельной системы выбран монослой графена с адсорбированными атомами лития в разных положениях. Графен может быть использован в качестве добавки к его аналогам, сульфидам молибдена/ванадия. Такие композитные материалы могут обладать высокой электропроводностью и большой емкостью, что делает их перспективными анодными материалами.

В работе для описания систем использовалась программа Quantum ESPRESSO, в основе которой лежит формализм плоских волн. Теоретически определено равновесное положение иона лития на поверхности углеродных материалов, определена зонная электронная структура. Расчетное значение энергии адсорбции лития в монослое LiC_6 –1,06 eV, что согласуется с источниками [1, 2]. На основании изученных литературных данных сделан вывод о воспроизводимости используемого метода.

1. Zheng J., Margine E. R. First-Principles Calculations of the Superconducting Properties in Li-Decorated Monolayer Graphene Within the Anisotropic Migdal-Eliashberg Formalism // Phys. Rev. B. 2016. Vol. 94. P. 064509
2. Hao F., Chen X. First-Principles Study of Lithium Adsorption and Diffusion on Graphene: The Effects of Strain // Mat. Res. Express. 2015. Vol. 2. P. 105016.

Научный руководитель — д-р хим. наук Л. Г. Булушева

УДК 548.736

Изучение динамики изменения кристаллической решетки полупроводника InSb в диапазоне 90–450 К

М. Д. Афанасьев

Новосибирский государственный университет

Антимонид индия — полупроводниковый материал, широко используемый в различных датчиках и детекторах ИК-спектра. В работе [1] методом рентгеновской дифрактометрии поликристаллов изучена зависимость параметра элементарной ячейки (ПЭЯ) InSb от температуры в интервале 305–598 К. Полученные результаты в этом интервале можно аппроксимировать линейным уравнением $a(T) = 4*10^{-5}T + 6{,}469$. Тепловое расширение InSb при температурах ниже комнатной известно лишь по данным, полученным интерферометрическими измерениями монохроматическим видимым светом [2]. Цель данной работы — изучить зависимость $a(T)$ в интервале 90–450 К с помощью рентгеновской дифрактометрии монокристаллов.

Исследование кристалла InSb проведено на дифрактометрах: 1 — Bruker Duo (Mo$K\alpha$-излучение, четырехкружный гониометр, 2D CCD-детектор) в интервале температур 100–400 К и 2 — Bruker D8 Venture (Mo$K\alpha$-излучение, трехкружный гониометр, 2D CMOP-детектор) в интервале температур 90–450 К. Гониометры откалиброваны по эталонному кристаллу Si, в результате уточнены значения D и $2\theta_д$. Съемки на приборе 1 проведены путем ω-сканирования в интервале 4°. Обработка экспериментальных данных проведена по методике [2]. В результате эксперимента ПЭЯ определены с относительной ошибкой $\Delta a/a = 9*10^{-5}$. Для Т = 300 К получено значение a = 6,4810(6) Å, что хорошо коррелирует с данными [1] a = 6,4802(1) Å. При работе на приборе 2 для уточнения выбраны отражения $(11\ 7\ 5)_{InSb}$ (2θ = 99,698°), а в качестве реперных рефлексов использованы $K\alpha_1$ и $K\alpha_2$ линии рефлекса $(10\ 6\ 0)_{Si}$ (2θ = 99,205°), в результате эксперименты проведены с относительной ошибкой $\Delta a/a = 7*10^{-5}$.

Проведено сравнение полученных результатов с данными работ [1, 2].

1. Breivik M., Nilsen T. A., Fimland B-O. Temperature dependent lattice constant of InSb above room temperature // J. Cryst. Grow. 2013. Vol. 381. P. 165–168.
2. Gibbons D. F. Thermal expansion of some crystals with the diamond structure // Phys. Rev. 1958. Vol. 112 (1). P. 136–140.
3. Серебренникова П. С. и др. К вопросу о точности определения параметров элементарной ячейки монокристаллов на современных лабораторных дифрактометрах // Журн. структур. химии. 2021. Т. 62, № 5. С. 734–744.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. С. А. Громилов

УДК 67.017

Влияние ультразвуковой обработки на структуру и механические свойства сплава Mg-Ca-Zn

А. А. Ахмадиева, Н. И. Кахидзе

Томский государственный университет

Одним из применений магниевых сплавов, таких как сплав системы Mg-Ca-Zn, является использование в качестве материалов для изготовления медицинских имплантов. При этом на сегодняшний день существует проблема повышения механических свойств при сохранении биосовместимости. Известно, что ультразвуковая обработка (УЗО) расплава обеспечивает модифицирование структуры, что приводит к повышению механических свойств. Цель работы — изучение влияния УЗО на структуру и механические свойства сплава Mg-Ca-Zn.

Для проведения исследований изготовлен сплав по следующей методике. 1 кг чистого (99,9 %) магния расплавляли в стальном тигле в атмосфере аргона. Добавка цинка (4 мас. %) и кальция (1 мас. %) осуществлялась при температуре расплава 720 °С посредством стального колокольчика с механическим перемешиванием. Далее проводилась УЗО расплава с частотой 17,6 кГц, мощностью 5 кВт. Заливка расплава осуществлялась в стальной цилиндрический кокиль диаметром 35 мм при вибрационной обработке с частотой 60 Гц и амплитудой 0,5 мм. Исходный сплав для сравнения получен при аналогичных условиях без УЗО.

Структура образцов исследовалась методами оптической и электронной микроскопии. Твердость НВ измерена на твердомере МЕТОЛАБ 703. Испытания на сжатие проведены на испытательной машине Instron 3369.

Установлено, что использование УЗО-расплава обеспечивает снижение среднего размера зерна со 180 до 110 мкм. Значения $\sigma_в$ и δ полученного сплава увеличились с 294 до 322 МПа, с 22 до 25 % соответственно, при значениях $\sigma_{0,2}$ 64 МПа. Твердость составила 54 НВ как для исходного, так и для сплава с УЗО.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1384).

Научный руководитель — канд. техн. наук И. А. Жуков

УДК 669

Исследование влияния базальтовых волокон на структуру и механические свойства технического алюминия

В. Д. Валихов, А. А. Ахмадиева

Томский государственный университет

Технический алюминия марки А7 используется во многих областях промышленности: пищевой и автомобильной промышленности, в качестве листового проката и проволоки. Множество сфер использования алюминиевого сплава А7 объясняется его высокими физико-механическими свойствами (малая плотность, высокая удельная прочность, стойкость к коррозии) относительно других технических сплавов.

В данной работе в качестве матрицы использовался технический алюминий марки А7 (Al — 99,7; Fe — 0,16; Si — 0,15; Zn — 0,04; Mn — 0,03; Ga — 0,03; Mg — 0,02; Ti — 0,01; Cu — 0,01), а упрочняющей фазой являлись базальтовые волокна со средней длиной 57 ± 5 мкм и диаметром 4 мкм. Введение базальта происходило в расплав технического алюминия при температуре 720 °С с одновременным механическим перемешиванием и непосредственно в зону перемешивания. Базальтовые волокна были предварительно нагреты до 200 °С в алюминиевой капсуле. После введение расплав перемешивался 30 с для лучшего распределения волокон базальта по объему расплава. Разливка расплава осуществлялась в стальной кокиль цилиндрической формы. Содержание базальтовых волокон в сплаве составило 5 мас. %. Исходный алюминиевый сплав А7 был отлит при аналогичных условиях для полноценного сравнения.

Результаты измерения твердости и микротвердости показали, что введение базальтовых волокон повышает твердость на 24 %.

Работа проводилась с применением оборудования Томского регионального центра коллективного пользования и при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания № FSWM-2020-0028.

1. Tolaminejad B., Dehghani K. Microstructural characterization and mechanical properties of nanostructured AA1070 aluminum after equal channel angular extrusion // Mater. Des. 2012. Т. 34. С. 285–292.
2. Yilmaz N. F., Öztürk M. Improvement of mechanical properties of AA1070 aluminium by the addition of borax under different holding conditions // Materialwissenschaft Werkstofftechnik. 2012. Т. 43, № 12. С. 1006–1018.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. А. Б. Ворожцов

УДК 533

Изучение процесса образования субмикронных покрытий при натекании высокоэнтальпийного плазменного потока на поверхность подложки

Т. И. Гареев

Новосибирский государственный университет

В работе описаны физико-химические принципы нанесения субмикронных покрытий [1] из различных материалов и установка — импульсный дисковый МГД-ускоритель, предназначенный для генерации плазменных потоков заданного состава и плотности энергии. Описаны использованные методики измерений и исследования получаемого покрытия. Приведены предварительные данные о морфологии полученных покрытий на примере пленок из карбида углерода и нитрида бора.

Работа выполнена на МГД-ускорителе, принцип работы которого описан в [2]. Используя, например, углеродосодержащую плазму, можно получить алмазоподобную пленку. При смеси моносилана и метана образуется покрытие карбида кремния [3].

Развитием методики является изучение образования покрытий из летучих соединений, изначально находящихся в конденсированном состоянии. В качестве такого соединения выбран бромид бора. Если исходный поток содержит азот и пары BBr_3, то в ускорителе образуются плазма, содержащая атомы и ионы азота и бора. При натекании такой плазмы на твердую поверхность на последней синтезируется нитрид бора. Кубический нитрид бора обладает твердостью, приближающейся к твердости алмаза, что определяет интерес к изучению новых принципов нанесения покрытий.

Установка, описанная выше, была модернизирована, а именно была создана и отлажена система внесения паров бромида бора в поток азота. Эксперименты проводились с карбидом кремния и нитридом бора.

1. Fedoseeva Yu. V., Pozdnyakov G. A., Okotrub A. V. et al. Bulusheva Effect of Substrate Temperature on the Structure of Amorphousoxygenated Hydrocarbon Films Grown with a Pulsed Supersonic Methane Plasma Flow // Appl. Surf. Sci. 2016. Vol. 385. P. 464–471.
2. Поздняков Г. А. Дисковый газофазный магнитогидродинамический ускоритель // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33, вып. 11. С. 52–56.
3. Golubov A. I., Katsnelson S. S., Pozdnyakov G. A. Interaction of a Highenthalpy Plasma Jet with Surfaces and Chemically Active Media // IEEE Trans. Plasma Sci. 2010. Vol. 38, № 8. P. 1840–1849.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Г. А. Поздняков

УДК 535.36

Моделирование рассеяния различных бесселевых пучков частицами вблизи плоской подложки

С. А. Глухова

Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Бесселевы пучки занимают заметное положение среди различных видов структурированного электромагнитного излучения. Прежде всего, они имеют большой спектр применений за счет выгодной способности распространяться без дифракции в центральной области луча. Так, бесселевы пучки активно применяются в таких областях, как оптическое манипулирование (оптические пинцеты), обработка материалов, коммуникация, микроскопия и др.

Во многих областях применения бесселевых пучков важно учитывать процесс их рассеяния на различных объектах. Также часто исследуемые образцы находятся на поверхности или подложке, вклад в рассеяние которой тоже необходимо учитывать. Такую задачу удобно решать при помощи метода дискретных диполей, а также его популярной реализации в программном пакете ADDA, где уже имеется возможность вычисления рассеяния плоской волны на частицах вблизи плоской подложки. Таким образом, целью данной работы является разработка теории и реализация кода в рамках программного пакета ADDA для рассеяния обобщенных бесселевых пучков вблизи плоской подложки.

Для решения поставленной задачи удобно раскладывать бесселевы пучки в сумму плоских волн, которые уже удобно «отражать», используя формулы Френеля. Однако из всего разнообразия типов бесселевых пучков (LE, LM, CS, CS’, TE, TM, TEL, TML) разложение бесселевых пучков в сумму плоских волн в литературе известно только для некоторых типов бесселевых пучков (CS, TE, TM). Тем не менее, используя выведенную нами теоретическую классификацию бесселевых пучков, нам удалось получить формулы для разложения обобщенного бесселева пучка в сумму плоских волн. Также полученные теоретические результаты реализованы в отдельной ветке кода ADDA, которая протестирована для рассеяния бесселевых пучков частицами вблизи подложки в пределе плоской волны, т. е. для бесселевых пучков 0 порядка и при стремлении конического угла к 0°.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин

УДК 535-3

Оптимизация параметров глубокой фотолитографии фоторезистов-аналогов SU-8

Н.М. Говоров

Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

При создании микроструктур из фоторезиста методами фото- и рентгенолитографии необходимо минимизировать дефекты, связанные с недостаточной или излишней полимеризацией фотополимера, при неоптимальном режиме экспонирования. Особенно важно снизить влияние литографических дефектов при создании оптических элементов, поскольку они крайне негативно сказываются на эксплуатационных свойствах подобных устройств [1].

В рамках работы по созданию комплекса рентгеновских преломляющих линз методом глубокой УФ-литографии для модуля конфокальной рентгеновской микроскопии на базе станции с источником синхротронного излучения необходимо определить оптимальный режим экспонирования фоторезистов-аналогов SU-8 монохроматическим УФ-излучением.

Время экспонирования t_d рассчитывали, исходя из следующих измеряемых величин: $t_d = D\left[\frac{\mathcal{W}}{s}\mu(\lambda)\cdot exp\left(-\mu(\lambda)d\right)\cdot\left(1-R_g\right)^2\left(1+R_b\right)\right]^{-1}$, где D — пороговая доза поглощенного излучения слоем фоторезиста; $\mathcal{W}$ — мощность излучения светодиода вблизи источника; S — площадь облучения в установке экспонирования, формируемая собирающей линзой; $\mu(\lambda)$ — спектральный удельный коэффициент поглощения фоторезиста; R_g — коэффициент отражения от стеклянной внешней поверхности фотошаблона и линзы; R_b — коэффициент отражения от границы раздела поверхности подложка — фоторезист; d — толщина слоя фоторезиста.

Исследованы фоторезисты марки *mr-X*, состоящие в исходном растворе из эпоксидной смолы с мономером — диглицидиловым эфиром бисфенола А (ДГЭБА) (2,2-бис(4-глицидилоксифенил)пропан) и соли фотогенератора кислоты. УФ-спектры отдельных твердых слоев этих фоторезистов толщиной от 50 мкм до 3 мм измерены с помощью UV-VIS 180-3400 Shimadzu спектрофотометра. Определена длительность экспонирования толстых твердых слоев *mr-X* для различных светодиодных источников, излучающих на длинах волн 365, 385 и 405 нм. Обсуждаются оптимальные параметры экспонирования с учетом геометрии изготовляемого изделия.

1. Reznikova E., Mohr J., Hein H. Deep Photo-Lithography Characterization of SU-8 Resist Layers // Microsystem Technol. 2005. Vol. 11 (4–5). P. 282–291.

Научный руководитель — канд. хим. наук Е.Ф. Резникова

УДК 548.73

Влияние метода синтеза на образование слоистого перовскитоподобного оксида Sr_2TiO_4 и его активность в реакции окислительной конденсации метана

А. С. Горкуша

Новосибирский государственный университет
Институт катализа им Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Слоистый перовскит Sr_2TiO_4 привлекает внимание как перспективный катализатор окислительной конденсации метана (ОКМ) — одностадийного процесса переработки метана в этилен. Известно, что активность катализаторов в большой степени зависит от метода приготовления, определяющего их физико-химические свойства. С целью выявления факторов, влияющих на каталитическую активность слоистых перовскитов Sr_2TiO_4 в ОКМ, приготовленных различными методами, изучены их структурные, поверхностные и морфологические свойства на всех стадиях синтеза.

В рамках данной работы исследованы серии образцов Sr-Ti-O, синтезированные с использованием механохимической активации (МА), цитратным и полимерным методами. Методами ИК-спектроскопии и РФА изучено формирование Sr_2TiO_4 в процессе МА и последующего прокаливания. Исследовано влияние метода приготовления на фазовый состав образцов, определяющий их каталитическую активность в реакции ОКМ. Предположено, что высокая каталитическая активность некоторых образцов может быть связана с наличием планарных дефектов, влияющих на свойства форм кислорода, являющихся активными центрами в ОКМ. Исследование этих образцов с использованием просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения показало, что в образцах Sr_2TiO_4, полученных с использованием стадии МА, наблюдаются множественные планарные дефекты в виде нарушения периодичности в чередовании слоев. Выполнено моделирование структуры фазы Sr_2TiO_4 с различной концентрацией планарных дефектов, показано влияние дефектов на дифракционные картины.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030».

Научные руководители —
д-р физ.-мат. наук, проф. С. В. Цыбуля, канд. хим. наук С. Н. Павлова

УДК 543.429.22

Исследование парамагнитных центров, образующихся в результате пластической деформации алмазов, и влияние на них отжига при высоких давлении и температуре

М. И. Гуськова

Новосибирский государственный университет

Значительная часть природных азотсодержащих алмазов в процессе выноса кристаллов на поверхность Земли пластически деформируется и имеет коричневую окраску. Высказывалось много гипотез о происхождении коричневой окраски, но до сих пор нет четкого понимания, какие дефекты определяют коричневый цвет пластически деформированных кристаллов алмаза. ЭПР-исследования данной работы позволили установить особенности трансформации азотных центров при пластической деформации и их взаимодействие с оборванными связями в ядре дислокаций.

Характерные дефекты пластически деформированных алмазов типа 1aAB — оборванные связи в ядре дислокаций, проявляющиеся в спектрах ЭПР и люминесценции как центр 490,7 нм и W7-центр, имеющий структуру в виде разделенной двумя углеродами пары атомов азота и образующийся при разрушении A-центра (тесной азотной пары). При этом благодаря переносу одного электрона такой азотной пары на оборванные связи центр W7 имеет электронный спин S = 1/2, а сужение линии спектра ЭПР центра 490,7 нм обусловлено подвижностью этого электрона между оборванными связями в интервале температур 300–77 K. Кроме того, подвижность электрона, захваченного оборванными связями, поляризует электронную структуру и модулирует сверхтонкую структуру W7-центра. С другой стороны, перенос электрона от донорного центра W7 на оборванные связи соответствует условиям образования комплекса с переносом заряда. Появление в спектрах оптического поглощения полосы 560 нм в этом случае позволяет отнести ее к полосе переноса заряда такого комплекса. Данную оптическую систему наблюдали многие авторы [1–3], но ее появление никак не интерпретировали.

1. Hainschwang T., Notari F., Pamies G. A Defect Study and Classification of Brown Diamonds with Non-Deformation-Related Colour // Minerals. 2020. Vol. 10 (10). P. 903.
2. Collins T., Kanda H., Kitawaki H. Colour Changes Produced in Natural Brown Diamonds by High-Temperature Treatment // DRM. 2000. Vol. 9. P. 113–122.
3. Hainschwang T., Notari F., Pamies G. A Defect Study and Classification of Brawn Diamonds with Deformation-Related Colour // Minerals. 2022. Vol. 10. P. 903.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук В. А. Надолинный

УДК 669.7.017

Влияние детонационного наноалмаза на значение твердости заэвтектического силумина. Зависимость твердости от высоты отливки

М. А. Ефремов, Н. И. Кахидзе, Р. Г. Мубараков

Томский государственный университет

Повышение эффективности транспортной сферы промышленности реализуется за счет применения конструкционных материалов с высокой удельной прочностью. Заэвтектические сплавы Al-Si (содержание Si от 11,7 %) обладают низкими показателями удельного веса и коэффициента линейного температурного расширения при повышенной износостойкости. Однако содержание Si выше эвтектического приводит к снижению прочностных свойств. Известно дисперсное упрочнение алюминиевых сплавов посредством введения в расплав твердых тугоплавких микро- и наночастиц.

Сплавы для исследования получены методом литья в стальной кокиль. В качестве упрочняющих частиц использовались детонационные наночастицы алмаза, которые для введения в расплав смешивались с микропорошком магния 1 : 9 с дальнейшим прессованием в пресс-форме. Введение 0,14 мас. % наноС в составе полученных прессовок в расплав Al-20 % Si сопровождалось механическим перемешиванием смесителем и ультразвуковой обработкой [1]. Расплав разливался в цилиндрический кокиль диаметром 40 мм и высотой 200 мм. Сплав без добавления наноС получен при аналогичных условиях.

Твердость полученных сплавов измерялась методом Бринелля на твердомере Метолаб 703 с нагрузкой 62,5 кг на стальной индентор диаметром 2,5 мм и выдержкой 10 с. Для контроля распределения значений твердости исследовались верхние, центральные и нижние участки полученных отливок. На каждом участке проведено по 4 измерения.

Получено, что твердость сплава Al-20 Si составляет 98 ± 6,1 НВ. Добавление наноС не влияет на показатели твердости. Во всех отливках отмечается уменьшение показателей твердости от нижнего к верхнему участку: нижняя часть 101,5–106 НВ, центральная часть 96,9–99,2 НВ, верхняя часть 57,5–93,3 НВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государ-ственного задания № FSWM-2020-0028.

1. Кахидзе Н. И., Хрусталев А. П., Ворожцов А. Б. Исследование влияния нанооксида алюминия на структуру и механические свойства сплава системы алюминий — магний // Наука. Технологии. Инновации. 2019. С. 218–220.

Научный руководитель — канд. техн. наук А. П. Хрусталев

УДК 542.8

Исследование аморфизованных форм углерода в наноразмерных углеродных материалах

Н. А. Золотарев

Новосибирский государственный университет
Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Углеродные материалы (УМ) широко используются в науке и технике. Их многообразие требует тщательного охарактеризования свойств и измерения различных параметров: структуры, электронного состояния, различных свойств, наличия примесей и др. Одним из важных параметров является содержание в УМ аморфизованных форм углерода, которые в значительной степени могут влиять на свойства УМ и различных композитных материалов на их основе.

Целью данной работы являлось исследование форм аморфного углерода (АУ) для их идентификации и выявления закономерностей формирования при термических обработках в наноуглеродных материалов. Для исследования форм АУ используется системный набор материалов, таких как многослойные углеродные нанотрубки, сажи, наноуглеродные волокна, стеклоуглеродные волокна, наноалмазы. Для проведения термических обработок изготовлен высоковакуумный узел для нагрева электронным ударом образцов, находящихся на танталовой подложке. Исследование структуры наноматериалов до и после нагрева проведено с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния. КР-спектры показали, что доля аморфного углерода уменьшалась при термической обработке образцов (измерялось соотношение интегральных интенсивностей колебательных мод I_{2D}/I_D, I_D/I_G). С помощью просвечивающей электронной микроскопии также проанализировано распределение размеров растущих графеновых фрагментов. Для исследования морфологии образцов использована сканирующая электронная микроскопия. Также в рамках данной работы с помощью метода рентгенофазового анализа получены данные о межплоскостных расстояниях между графеновыми плоскостями, в дальнейшем планируется исследовать электропроводность полученных образцов в зависимости от их строения и наличия форм АУ.

Научные руководители —
канд. хим. наук В. Л. Кузнецов, канд. хим. наук С. И. Мосеенков

УДК 669.7.017

Синтез лигатуры Al-Er по гидридной технологии. Исследование влияния лигатуры Al-Er на прочностные свойства сплава АМг5 системы Al-Mg

Н. И. Кахидзе, Р. Г. Мубараков, И. Л. Синкина

Томский государственный университет

Повышение эффективности транспортной сферы промышленности реализуется за счет применения конструкционных материалов с высокой удельной прочностью. Прогнозируется увеличение доли алюминия в автомобиле со 160 до 250 кг к 2025 г., что при замене стальных элементов приведет к снижению общего веса на 180 кг.

Сплавы марки АМг5 с добавлением Er и без получены методом литья в стальной кокиль и исследованы в литом виде. Лигатура Al-Er синтезирована методом гидрирования [1] и вводилась в зеркало расплава с дальнейшим перемешиванием специальным смешивающим устройством [2].

Структура сплавов исследовалась методами оптической микроскопии на оборудовании Томского материаловедческого центра коллективного пользования (ТМЦКП). Твердость сплавов измерялась методом Бринелля (ТМЦКП), механические характеристики сплавов получены посредством испытаний на одноосное растяжение стандартных плоских образцов (ТМЦКП).

Получено, что структура сплавов гетерогенна и представлена зернами с двумерной ориентацией. Средний размер зерна сплава АМг5 — 390 мкм, сплава АМг5 + Er — 410 мкм. Значения твердости сплава АМг5 — 57,9 мкм, сплава АМг5 + Er — 61,2 мкм. Значения предела прочности и максимальных деформаций до разрушения для исходного сплава АМг5 составили 151 МПа и 6,4 % соответственно. Значения предела прочности и максимальных деформаций до разрушения для сплава АМг5 + Er составили 187 МПа и 9,6 % соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания № FSWM-2020-0028.

1. Belgibayeva A., Abzaev Y., Karakchieva N. et al. The Structural and Phase State of the Tial System Alloyed with Rare-Earth Metals of the Controlled Composition Synthesized by the “Hydride Technology” // Metals. 2020. Vol. 10, iss. 7. P. 859.
2. Кахидзе Н. И., Хрусталев А. П., Жуков И. А. Исследование влияния наноразмерных модификаторов AlN на механическое поведение магниевого сплава МЛ12 при квазистатическом нагружении // Сб. материалов форума «Новые материалы и перспективные технологии». М.: АНО ЦНТР, 2020. С. 416–419.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. А. Б. Ворожцов

УДК 535.131

Моделирование спектроскопии потерь энергии электронами с учетом полубесконечной подложки под образцом

А. А. Кичигин

Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Для изучения оптических свойств нанообъектов широко применяются спектроскопия потерь энергии электронами (*Electron energy loss spectroscopy* — EELS) и катодолюминесценция (*Cathodoluminescence* — CL). В эксперименте образец облучается релятивистскими электронами с энергией порядка 100 кэВ. После взаимодействия электронов с образцом измеряется их энергия и строится спектр потерь энергии электронами (спектр EELS). При взаимодействии образец сам начинает излучать фотоны, этот свет собирается параболическим зеркалом, и строится спектр CL. Основным преимуществом EELS/CL перед оптическими методами является возможность исследовать оптические свойства с пространственным разрешением менее 1 нм (на длинах волн видимого света и более).

Для интерпретации результатов эксперимента необходима теория взаимодействия быстрых электронов с образцом произвольной формы и соответствующий метод компьютерного моделирования. Существующая теория покрывает случай только частиц в бесконечной среде, что соответствует экспериментам, где частица находится внутри подложки. Однако в реальных экспериментах частица обычно находится на поверхности подложки — случай, не реализованный ни в одном ПО для моделирования EELS/CL.

В данной работе решена объемно-интегральная формулировка уравнений Максвелла через тензор Грина и получена теория моделирования EELS/CL для частиц произвольной формы и внутренней структуры, находящихся вблизи полубесконечной подложки. Полученные выражения реализованы в открытом ПО ADDA. Проведены первые сравнения с экспериментом, где серебряная нанопризма с ребром 78 нм и высотой 10 нм находилась на слюдяной подложке (толщина более 1 мкм, что соответствует случаю полубесконечной подложки) и облучалась электронами с энергией 100 кэВ. Получено соответствие энергий плазмонных пиков (1,75; 2,7 и 3,2 эВ) на промоделированных и экспериментальных спектрах. Также построены плазмонные карты для этих трех пиков, они также совпали с экспериментом. Этот и другие результаты моделирования будут продемонстрированы на конференции.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. А. Юркин

УДК 539.23

Удаление оксида с подложки InP(001) в потоке мышьяка

Д. А. Колосовский [1], С. А. Пономарев [1,2], Д. В. Дмитриев [1]

[1] Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
[2] Новосибирский государственный университет

В настоящее время подложки InP являются ключевым материалом при росте гетероэпитаксиальных структур (ГЭС) для излучающих, передающих, модулирующих и принимающих элементов на основе InGaAs/InAlAs решеточно-согласованных систем. Предэпитаксиальная термическая очистка подложек InP в потоке мышьяка позволяет получить атомарно-чистую поверхность. На сегодняшний день процессы удаления оксида до конца не изучены, однако очевидно, что понимание взаимодействия мышьяка с поверхностью InP, покрытой оксидом, важно для технологии роста ГЭС. В данной работе методом дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО) *in situ* изучены механизмы удаления оксида с поверхности *epi-ready* InP(001) подложки в потоке мышьяка.

Исследования проводились на установке МЛЭ Compact-21T фирмы Riber, оснащенной системой ДБЭО и системой анализа дифракционных картин kSA 400 фирмы k-Space Associates. Для отжига использовались *epi-ready* подложки InP(001) фирмы AXT.

Мы наблюдали медленное возрастание интенсивности (00) рефлекса в ДБЭО при T > 250 °C без потока мышьяка, что говорит о термическом удалении оксида. В момент подачи мышьяка $F_{As} = 6 \times 10^{-6}$ Торр при T = 300 °C не происходит изменений в зависимости интенсивности (00) рефлекса, т. е. вклад взаимодействия с мышьяком в утонение оксида незначителен. При T ~ 350 °C характер процесса удаления оксида резко изменяется, что связано с активацией химической реакции взаимодействия мышьяка с оксидом. Действительно, согласно закону Вант-Гоффа, повышение температуры на 10 °C приводит к увеличению скорости реакции в 2–4 раза.

При температуре T ~ 410 °C достигается максимум интенсивности (00) рефлекса, что свидетельствует о полном удалении оксидного слоя, который более не рассеивает электронный пучок. Последующее понижение интенсивности (00) рефлекса связано с увеличением шероховатости поверхности вследствие десорбции фосфора и сегрегации индия.

Таким образом, вероятно, оксидный слой состоит из оксидов двух типов, один из которых активно взаимодействует с мышьяком, а второй разлагается преимущественно термически.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук К. С. Журавлев

УДК 538.9

In situ дифракционные исследования Mn-Zr оксидных катализаторов в реакциях окисления CO и пропана

В. П. Коновалова

Новосибирский государственный университет
Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Катализаторы на основе переходных металлов представляют особый интерес благодаря своей низкой стоимости, высокой стабильности и устойчивости к каталитическим ядам. Перспективными являются Mn-содержащие катализаторы. Каталитические свойства оксидов марганца зависят от условий процесса, в частности от состава используемого топлива. Поэтому в работе исследованы свойства Mn-содержащих оксидов в различных условиях реакции окисления CO и пропана с помощью *in situ* рентгеновской дифракции и масс-спектрометрии.

В данной работе изучались смешанные Mn-Zr катализаторы. Исследована серия катализаторов с соотношением катионов Mn:Zr = 3:7, полученная соосаждением при температурах прокаливания 400–800 °C. Образцы охарактеризованы методами РФА, адсорбции N_2, ТПВ и РФЭС. Наибольшая активность катализатора, полученного при 650 °C, обусловлена частичным расслоением Mn-Zr твердого раствора и формированием высокодисперсных частиц оксида марганца на поверхности катализатора.

Для наиболее активного катализатора проведены *in situ* дифракционные эксперименты в условиях реакции окисления пропана и для сравнения отдельно в среде кислорода и пропана. Показано, что катализатор остается стабильным в условиях избытка кислорода. В среде пропана наблюдалось восстановление ионов Mn в составе твердого раствора, а также восстановление оксида Mn до состояния MnO.

Смешанный Mn-Zr катализатор с соотношением Mn:Zr = 6:4, полученный соосаждением и прокаливанием при 650 °C, охарактеризован методами РФА и ТПВ. Operando-исследование в условиях окисления CO показало рост каталитической активности в циклах окисление-восстановление, что обусловлено формированием высокодисперсного оксида Mn_3O_4 и увеличением его содержания в составе образца. Наибольший рост конверсии CO в реакции окисления составил от 20 до 70 %.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030».

Научный руководитель — канд. хим. наук О. А. Булавченко

УДК 544.4

Сублимация тонких пленок пентаэритриттетранитрата: исследование методами атомно-силовой микроскопии

Е.К. Косарева

Федеральный исследовательский центр «Химическая физика» им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

Создание материалов с контролируемыми свойствами является одним из основных направлений исследований в области энергетических материалов. Известно, что физические свойства кристаллических соединений тесно связаны с характеристиками индивидуальных кристаллов, в том числе с их размером, структурой поверхности, наличием дефектов и примесей [1, 2]. В свою очередь, контролируя параметры кристаллизации, можно получать кристаллы с различными свойствами [3].

Целью настоящей работы является определение зависимости параметров сублимации пентаэритрита тетранитрата ($(CH_2ONO_2)_4C$, ТЭН) от размеров и формы частиц кристаллов. С помощью различных методов атомно-силовой микроскопии (АСМ) исследована микроструктура тонких пленок ТЭН, полученных кристаллизацией из раствора в ацетоне, нанесенного на кремниевые и золотые подложки по методу спин-коатинга. Установлено, что в зависимости от материала подложки процесс кристаллизации ТЭН приводит к формированию кристаллов различного размера и формы: на кремниевых подложках образуются крупные дендритные кристаллы величиной до 1 мм, а на золотых — торообразные и сферические частицы размером около 10 мкм. Сублимация полученных пленок исследовалась *in situ* с помощью комбинации АСМ и резистивного нагревательного столика. Установлено, что температура, при которой ТЭН полностью сублимирует, прямо пропорциональна размерам кристаллов. Кроме того, с помощью серии АСМ-изображений, полученных при различных температурах, определены скорость и энергия активации процесса сублимации. Полученные результаты открывают новые возможности формирования тонких пленок энергетических материалов с заранее заданными свойствами.

1. Siviour C.R. et al. Particle Size Effects on the Mechanical Properties of a Polymer Bonded Explosive // J. Mater. Sci. 2004. Vol. 39. P. 1255–1258.
2. Kuklja M.M., Kunz A.B. Electronic Structure of Molecular Crystals Containing Edge Dislocations // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89 (9). P. 4962–4970.
3. Mezei G., Kampf J.W., Pecoraro V.L. Temperature-, Molar Ratio- and Counterion-Effects on the Crystal Growth of Bipyridinium-Bis(Alkylcarboxylic Acid)-Crown Etherpseudorotaxanes // New J. Chem. 2007. Vol. 31 (3). P. 439–446.

Научный руководитель — д-р техн. наук А.Н. Пивкина

УДК 542.8

Концепция времяпролетного нейтронного дифрактометра

А. Л. Кудрявцев

Новосибирский государственный университет

Нейтронные дифрактометры, в силу специфики взаимодействия нейтронов с веществом, позволяют проводить исследование кристаллической структуры на таком уровне, который практически невозможен для рентгеновских и электронных дифрактометров. Так, благодаря нейтронной дифракции возможно уточнение положений легких атомов и заселенности кристаллографических позиций атомами разных сортов, а также исследование магнитной структуры вещества.

В настоящее время нейтрондифракционные установки привязаны к реакторам: действительно функционирующих установок в мире считаные единицы. В связи с практически серийным производством относительно компактных ускорительных источников нейтронов для бор-нейтронозахватной терапии (БНЗТ) появляется уникальная возможность создания автономных нейтронных дифрактометров для исследования кристаллических материалов. В данной работе представлена концепция нейтронного дифрактометра, который можно реализовать на базе существующего ускорителя заряженных частиц с нейтроногенерирующей мишенью (БНЗТ, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН). Для монохроматизации потока нейтронов предполагается использовать времяпролетный метод, заключающийся в прохождении потока нейтронов через серию вращающихся поглощающих нейтроны дисков с отверстиями.

Также в работе исследовались возможные конструкции коллиматоров, гониометров и детекторов (в том числе полупроводникового типа с использованием ^{6}Li в качестве изотопа с большим сечением реакции с нейтронами), наиболее подходящих под условия конструкции и позволяющих добиться наилучших скорости и качества кристаллоструктурных измерений.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук С. А. Громилов

УДК 544.2, 544.4

In situ исследование окисления метанола на катализаторе V_2O_5/CeO_2 методами ИК-Фурье-спектроскопии и РФЭС

К. А. Литвинцева

Новосибирский государственный университет
Институт катализа им Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Окисление метанола на ванадиевых оксидных катализаторах является перспективным процессом промышленного синтеза ценных органических соединений, таких как формальдегид (HCHO), метилформиат ($HCOOCH_3$) и диметоксиметан ($H_2C(OCH_3)_2$) [1]. Для создания эффективных катализаторов селективного окисления метанола необходимо выяснить детальный механизм реакции. Соответственно, целью настоящей работы является определение методами ИК-Фурье-спектроскопии и РФЭС реакционных интермедиатов на поверхности катализатора, продуктов реакции в газовой фазе, а также определение состояния катализатора 5,3 % V_2O_5/CeO_2 в ходе реакции окисления метанола. Под определением состояния катализатора подразумевается определение степени окисления катионов ванадия (V^{5+}, V^{4+} и V^{3+}) и церия (Ce^{4+} и Ce^{3+}) при разных температурах в потоках различных газов: чистого метанола, кислорода и смеси метанола и кислорода.

Запись ИК-спектров проводились при атмосферном давлении в диапазоне температур от 60 до 300 °C; состав реакционная смеси — 4 об.% CH_3OH в воздухе или гелии. Методом РФЭС проводился анализ катализаторов после обработки в аналогичных условиях при температурах 100, 200 и 300 °C.

Показано, что в ИК-спектрах поверхности катализатора в потоке метанола в гелии и в потоке метанола в кислороде присутствуют одинаковые полосы поглощения, соответствующие адсорбированному метилформиату, формиат-ионам ($HCOO^-$) и метокси-группам ($-OCH_3$). Основными продуктами реакции в присутствии и в отсутствие кислорода являются формальдегид, метилформиат и диметоксиметан. При низких температурах (до 260 °C) в отсутствие кислорода в газовой фазе концентрации всех продуктов превращения выше, чем в его присутствии. Таким образом, активность катализатора зависит от состава реакционной смеси; по данным РФЭС, это связано с разной степенью восстановления ванадия и церия в условиях реакции.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030».

1. Weckhuysen B. M., Keller D. E. Chemistry, Spectroscopy and the Role of Supported Vanadium Oxides in Heterogeneous Catalysis // Catalysis Today. 2003. Т. 78, № 1–4. С. 25–46.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. В. В. Каичев

УДК 621.793.162

Золото-индуцированная кристаллизация тонких пленок нестехиометрического оксида кремния

Н. А. Лунев

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

Получение тонких пленок поликристаллического кремния (poly-Si) высокого качества на нетугоплавких несобственных подложках вызывает повышенный интерес при изготовлении дисплеев, сенсоров, тонкопленочных транзисторов и солнечных элементов. Один из перспективных подходов для получения тонких пленок poly-Si — использование металл-индуцированной кристаллизации тонких пленок аморфного кремния (a-Si) [1]. Наряду с a-Si в качестве кремнийсодержащего слоя используют также аморфный субоксид кремния (a-SiO_x, $0 < x < 2$) ввиду простоты его получения по сравнения с пленкой a-Si [2].

В данной работе изучен процесс золото-индуцированной кристаллизации (ЗИК) тонких пленок a-$SiO_{0,2}$ в зависимости от температуры и длительности отжига. Образцы были изготовлены в компоновке «подложка/Au/a-$SiO_{0,2}$». Тонкие пленки золота толщиной 30 нм наносились на подложки из кварца методом термовакуумного напыления. Затем тонкие пленки a-$SiO_{0,2}$ толщиной 150 нм осаждались методом газофазного плазмохимического осаждения. Полученные структуры были отожжены в высоком вакууме при температурах 320–500 °C в течение 8,5 ч, а также при 350 °C в течение 3–20 ч.

Структура материала изучена методами оптической и просвечивающей электронной микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света, дифракции отраженных электронов, а фазовый состав исследован с помощью рентгенофазового анализа. С помощью него показано, что порог кристаллизации a-$SiO_{0,2}$ составляет 330 °C, при этом отмечено, что при температурах отжига от 320 °C происходит формирование метастабильных силицидов золота [3]. С помощью *in situ* оптической микроскопии изучены кинетические параметры процесса [4], предложена модель ЗИК аморфного a-SiO_x [2].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-79-10143).

1. Toko K., Suemasu T. Metal-Induced Layer Exchange of Group IV Materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 2020. Vol. 53. P. 373002.

2. Zamchiy A. O. et al. Fabrication of Polycrystalline Silicon Thin Films by Gold-Induced Crystallization of Amorphous Silicon Suboxide // Vacuum. 2021. Vol. 192. P. 110462.

3. Hultman L. et al. Crystallization of Amorphous Silicon During Thin-Film Gold Reaction // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 62. P. 9.
4. Gall S. et al. Aluminum-Induced Crystallization of Amorphous Silicon // J. Non-Cryst. Solids. 2002. Vol. 299. P. 741.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. О. Замчий

УДК 539.23

Изменение поверхностной энергии и морфологии монослоев GaN на поверхности AlN в потоке аммиака

Я. Е. Майдэбура

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

Электронные и оптические свойства полупроводниковых квантовых точек (КТ) вызывают большой интерес исследователей за счет яркого проявления квантово-размерных эффектов, что важно при создании одноэлектронных транзисторов, однофотонных излучателей и светоизлучающих диодов. Типичным способом формирования КТ при росте в молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) является рост по механизму Странского — Крастанова (С-К). В системе GaN/AlN наблюдается модифицированный механизм С-К, в котором для формирования 3D-островков из 2D-слоя GaN (2D-3D-переход) необходимым условием является остановка роста и модификация поверхности слоя GaN, и в случае МЛЭ с аммиаком в качестве источника азота модификация заключается в отключении потока аммиака. Однако механизмы 2D-3D-перехода до сих пор остаются не ясными.

Образцы выращивались на установке MBE “Riber CBE-32” с аммиаком в качестве источника азота. Переход 2D-3D исследован *in situ* методом дифракции быстрых электронов на отражение с последующим анализом поведения дифракционной картины с помощью системы kSA 400. Чтобы выяснить влияние испарения GaN, оценена толщина слоя GaN до и после манипуляций с поверхностью с помощью методов фотолюминесценции и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

В результате исследована трансформация псевдоморфного слоя GaN, выращенного методом аммиачной МЛЭ на поверхности AlN. Экспериментально показано, что выключение или уменьшение потока аммиака до определенных значений приводит к трансформации 2D-слоя в 3D-островки (прямой 2D-3D-переход), а последующее включение потока аммиака приводит к перестройке поверхности из 3D в 2D-состояние (обратный 3D-2D-переход). Установлено минимальное значение эквивалентного давления пучка NH_3 при различных температурах для предотвращения преобразования 2D-слоя GaN в 3D-островки. Теоретически показано, что морфология поверхности слоя GaN сильно коррелирует с его поверхностной энергией. Поверхностной энергией можно управлять, изменяя состав и положение аммиачных фрагментов на поверхности GaN. Это дает возможность контролировать морфологию и плотность GaN КТ путем изменения поверхностной энергии GaN.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук К. С. Журавлев

УДК 539.5

Исследование морфологии и структуры тонких пленок AlN методами зондовой и электронной микроскопии

М. И. Миронова

Новосибирский государственный университет

Нитрид алюминия (AlN) является перспективным материалом и имеет множество практических приложений, но наиболее популярными являются приложения в микроэлектронике отчасти из-за того, что гексагональный данный AlN обладает пьезоэлектрическими свойствами [1]. Тонкие пленки AlN могут быть использованы в качестве материала для создания малых датчиков поверхностных акустических волн на кремниевых пластинах [2]. Также пьезоэлектрический слой из нитрида алюминия можно использовать для изготовления микромеханических ультразвуковых преобразователей [3].

Один из перспективных методов получения тонких пленок AlN — методика магнетронного распыления [4, 5]. Сложностью технологии является необходимость подбора правильных оптимальных характеристик роста пленки (соотношение газов, длительность осаждения, давление в камере, напряжение на мишени), чтобы устройство с пленкой AlN исправно выполняло свои функции. Цель данной работы — изучение морфологии и структуры тонких пленок нитрида алюминия методиками электронной, атомно-силовой микроскопии, в частности методикой микроскопии пьезоотклика.

Работа выполнена при финансировании госзадания МНВО РФ FSUS-2020-0029.

1. Damjanovic D. Ferroelectric, Dielectric and Piezoelectric Properties of Ferroelectric Thin Films and Ceramics // Rep. Prog. Phys. 1998. Vol. 61. P. 1267.
2. Suter J. J., Bryden W. A., Kistenmacher T. J., Parga R. D. Aluminum Nitride on Sapphire Films for Surface Acoustic Wave Chemical Sensors // Johns Hopkins Apl. Tech. Digest. 1995. Vol. 16. P. 3.
3. Shelton S., Guedes A., Przybyla R. et al. Horsley. Aluminum Nitride Piezoelectric Micromachined Ultrasound Transducer Arrays // Solid-State Sens., Actuators, Microsystems Workshop. 2012. P. 291–294.
4. Маскаева Л. Н. Технология тонких пленок и покрытий: учеб. пособие. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2019. 236 с.
5. Петухов В. Ю., Гумаров Г. Г. Ионно-лучевые методы получения тонких пленок: учеб.-метод. пособие. Изд. 2-е. Казань, 2010. 87 с.

Научный руководитель — Doctor of Science (Technology) П. В. Гейдт

УДК 669

Исследование влияния древесного угля на структуру и механические свойства сплава системы Al-Si

В. Д. Мирошкина, В. Д. Валихов

Томский государственный университет

Композиты на основе алюминия обладают множеством достоинств, таких как высокая удельная прочность, устойчивость к коррозиям, трещиностойкость, пластичность, хорошая жидкотекучесть, небольшая линейная усадка (0,9–1 %), стойкость к образованию трещин, достаточная герметичность, благодаря чему они применяются во многих областях промышленности. При введении в матрицу различных армирующих наполнителей можно добиться требуемых характеристик, необходимых для изделия.

В данной работе в качестве матричного материала использован литейный алюминиевый сплав АК9 (Al — 85,9–91,6 %, Si — 8–11 %, Mn — 0,2–0,5 %, Mg — 0,2–0,4 %), а в качестве армирующего наполнителя — порошок древесного угля со средним размером частиц около 85 мкм. В расплав алюминиевого сплава при температуре 700 °С вводился древесный уголь, помещенный в предварительно нагретую до 200 °С алюминиевую капсулу из фольги. Введение модификатора происходило при перемешивании до образования воронки, непосредственно в зону образовавшийся воронки, в защитной среде аргона в течение 50 с. Содержание углерода в полученном композиционном материале составило 0,6 масс. %. Исходный сплав получен при аналогичных условиях без введения модификатора.

Установлено, что введение 0,6 масс. % углерода в сплав системы Al-Si приводит к увеличению механических свойств сплава. При одноосном растяжении выявлено, что предел тякучести увеличен на 15 %, предел прочности — на 24 %, значение деформации изменилось с 2 до 3,1 %. Проведенные испытания на твердость по шкале Бринелля и микротвердость по шкале Виккерса показали увеличение значений на 18 и 51 %.

Работа проводилась с применением оборудования Томского регионального центра коллективного пользования и при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания № FSWM-2020-0028.

1. Веткасов Н. И., Капустин А. И., Сапунов В. В. Исследование процесса механического легирования алюминия наноразмерными аллотропными модификациями углерода // Вектор науки Тольяттинского гос. ун-та. 2017. № 3. С. 24–34.
2. Huang Y. et al. Carbon Materials Reinforced Aluminum Composites: A Review // Acta Metall. Sinica (English Letters). 2014. Т. 27, № 5. С. 775–786.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. П. Хрусталев

УДК 544.653.2.3

Исследование процесса образования микротрещин в Ni-обогащенных слоистых катодных материалах с использованием методики Slice&View

И. А. Моисеев

Сколковский институт науки и технологий, Москва

На сегодняшний день перспективными кандидатами на роль катодных материалов для высокоемких литий-ионных аккумуляторов являются слоистые оксиды переходных металлов $LiNi^{2+}_{x}Mn^{4+}_{y}Co^{3+}_{z}O_2$ с повышенным содержанием никеля ($x \geqslant 0{,}6$, Ni-обогащенные NMC), которые демонстрируют высокие значения электрохимической емкости (до 240 мАч/г). Однако их практическое применение ограничено ввиду постепенного снижения разрядной емкости материала при длительном электрохимическом циклировании. Считается, что одной из причин постепенной деградации емкости материала является накопление структурных напряжений в структуре материала в процессе (де)интеркаляции лития, что приводит к образованию микротрещин в частицах материала. Перспективным подходом к решению данной проблемы является химическая модификация катионной подрешетки катодного материала. В то же время фундаментальный интерес представляет изучение самого процесса образования и распространения трещин в структуре материала.

В ходе данной работы исследован механизм образования микротрещин на примере Mg-допированных слоистых оксидов общего состава $Li(Ni_{0.6}Mn_{0.2}Co_{0.2})_{1-x}Mg_xO_2$ (x = 0; 0,05; 0,1). С этой целью проведена 3D-реконструкция объемных моделей частиц материала с использованием технологии Slice&View после 300 циклов заряда разряда. Для создания 3D-модели микроструктурной организации частиц материала первичный набор изображений сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) получен с помощью двулучевого сканирующего электронного микроскопа FEI Helios G4 Plasma FIB. В ходе Slice&View эксперимента объем катодного материала послойно срезался сфокусированным пучком ионов Xe^{n+} с шагом в 20 нм, при этом в промежутках между травлениями проходила съемка СЭМ-изображений каждого среза частицы. Полученный набор 2D-изображений обрабатывался в программном пакете Avizo, где проводили их объединение, сегментацию областей, отвечающих объему материала и микротрещинам, и, наконец, реконструкцию 3D-объема частицы. Полученные 3D-реконструкции позволили количественно охарактеризовать процесс образования микротрещин в зависимости от степени допирования магнием.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 20-13-00233.

Научный руководитель —
канд. хим. наук, проф. А. М. Абакумов, канд. хим. наук А. А. Савина

УДК 67.017

Влияние наночастиц вольфрама на механические свойства алюминиевого сплава АМг5

Р. Г. Мубараков, А. А. Ахмадиева, Н. И. Кахидзе

Томский государственный университет

Известно, что механические свойства алюминиевых сплавов могут быть повышены за счет дисперсного упрочнения структуры тугоплавкими частицами. При этом чем меньше размер частиц, тем выше эффект упрочнения. В качестве добавки могут быть использованы наночастицы W. В настоящей работе проведена оценка влияния наночастиц вольфрама на механические характеристики алюминиевого сплава АМг5.

В качестве исходного сплава использовался алюминиевый сплав АМг5, в качестве упрочняющих частиц — нанопорошок вольфрама со средним размером частиц 200 нм, полученный методом электрического взрыва проводника. Методом ударно-волнового компактирования получена лигатура Al–W. Лигатура вводилась в расплав при ультразвуковой обработке с использованием магнитострикционного водоохлаждаемого преобразователя при мощности 4,1 кВ и частоте 17,6 кГц. После полного растворения лигатуры ультразвуковая обработка осуществлялась в течение 2 мин. Разливка проводилась при температуре 720 °С в стальной кокиль и вибрационном воздействии с частотой 60 Гц и амплитудой 0,5 мм. Исходный сплав получен при аналогичных условиях без добавления наночастиц W.

Твердость сплава определялась на твердомере METOLAB-703 (Томский материаловедческий центр коллективного пользования (ТМЦКП)). Микротвердость определялась на твердомере METOLAB-502 (ТМЦКП). Испытания на растяжение проводились на разрывном испытательном стенде Instron-3369 (ТМЦКП).

Выявлено, что добавка наночастиц W в количестве 0,5 масс. % способствует увеличению механических характеристик сплава АМг5 в литом состоянии: твердости с 58 до 63 HB, микротвердости с 67 до 85 HV, предела текучести с 52 до 79 МПа, предела прочности с 140 до 155 МПа и относительного удлинения с 1,9 до 5,5 %.

Исследования проводились при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 20-79-00060.

Научный руководитель — канд. техн. наук И. А. Жуков

УДК 621.372

Исследование влияния отжига и покрытия графеном токопроводящей поверхности резонансной системы на ее электродинамические свойства

З. Н. Нуриахметов

Новосибирский государственный университет

Объемные резонаторы активно используются в ускорительной и сверхвысокочастотной (СВЧ) технике. Ключевым параметром объемного резонатора является собственная добротность, связанная с потерями в стенках. В СВЧ-диапазоне основные токи протекают в скин-слое, поэтому изменение поверхностной проводимости влечет за собой изменение собственной добротности. При эксплуатации на токопроводящих поверхностях появляется оксидный слой, осаждаются примеси из атмосферы, что уменьшает поверхностную проводимость.

Одним из методов борьбы с агрессивным воздействием окружающей среды является покрытие поверхностей, проводящих СВЧ-токи, тонкими пленками. Однако существующие покрытия имеют ряд недостатков. Уникальным материалом является CVD-графен, выращенный на медной подложке. Графен обладает высокой электропроводностью и практически не проницаем для большинства газов. Таким образом, такое покрытие может повысить поверхностную проводимость и защищать от агрессивного воздействия окружающей среды.

Настоящая работа посвящена изучению влияния отжига как технологического процесса, предшествующего CVD-синтезу, и покрытия графеном медных токопроводящих поверхностей объемного резонатора на его электродинамические свойства. С этой целью разработан резонатор, позволяющий с высокой точностью оценить влияние поверхностных модификаций на поверхностную проводимость. Получена расчетная картина линий электрического поля и распределения поверхностных токов для определения потерь.

В докладе представлены результаты сравнения нагруженной добротности резонаторов с различными модификациями поверхности, такими как различное время отжига, отжиг в различных газах. Установлено, что отжиг увеличивает собственную добротность резонатора вследствие уменьшения поверхностной проводимости, связанной с ростом кристаллов одной ориентации на поверхности меди, а также травления примесей с поверхности. Показано, что после длительной выдержки меди без покрытия графеном ее токопроводящие свойства ухудшаются.

Научный руководитель — канд. техн. наук Ю. Д. Черноусов

УДК 538.9

Исследование электрических свойств и морфологии слоев частично фторированного графена в зависимости от условий их получения

Н. В. Петякин

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Развитие графеновой электроники, в том числе гибкой и прозрачной, требует получения технологии создания ряда материалов на основе графена, в том числе изоляторов, которые не ухудшали бы свойства самого графена. Ввиду трудоемкости существующих методов создания частично фторированного графена (один из наиболее качественных и стабильных изоляторов на основе графена) в ИФП СО РАН разработан метод фторирования с использованием плавиковой кислоты для тонких слоев графена [1]. Данная работа является частью распространения этого метода на использование с графеновыми суспензиями.

Путем нанесения фторированной суспензии на подложку Si(110) и последующего полного ее высыхания получен ряд образцов тонких пленок (5–50 нм) частично фторированного графена с различными временами фторирования (4–28 дней) и начальными размерами частиц графена в суспензии (0,1–1 мкм).

Исследование морфологии и определение толщины образцов проводилось с использованием атомно-силового микроскопа. Методом вольт-фарадных характеристик (ВФХ) определены встроенный и захватываемый пленкой заряды, а методом вольт-амперных характеристик исследованы напряжения пробоя.

Обнаружено скачкообразное изменение морфологии образцов при увеличении времени фторирования (7–11 дней), выраженное в первую очередь в резком увеличении толщины слоев с ~ 10 до ~ 50 нм. По совокупности проанализированных данных выявлена однородность характеристик слоев в зависимости от расстояния до места нанесения суспензии. На основе ВФХ выявлены наиболее перспективные для практического применения образцы, обладающие наименьшими значениями встроенного ($< 10^{11}$ см$^{-2}$) и захватываемого ($< 10^{10}$ см$^{-2}$) зарядов.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-72-10046.

1. Небогатикова Н. А., Антонова И. В., Володин В. А. и др. Функционализация пленок графена и мультиграфена в водном растворе плавиковой кислоты // Рос. нанотехнологии. 2014. Т. 9, № 1–2. С. 59–65.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Н. А. Небогатикова

УДК 62

Физика отказов щебнеочистительных машин

Р. А. Почтаренко

Сибирский государственный университет
путей сообщения, Новосибирск

Цель работы — практическая интерпретация физики отказов щебнеочистительных машин (ЩОМ). Задачи работы: изучить физику отказов деталей узлов и систем ЩОМ; распределить неисправности ЩОМ по узлам и системам; распределить неисправности ЩОМ по группам; выполнить анализ неисправностей ЩОМ по сформулированным критериям; разработать рекомендации по практической интерпретации физики отказов, ведению статистики и предотвращению неисправностей ЩОМ.

В работе изучена физика отказов, предложено их разделение на механические, гидравлические, электрические и электронные, выполнен сбор и анализ статистики неисправностей ЩОМ отечественного и зарубежного производства. С использованием составленных статистических таблиц выполнено распределение неисправностей ЩОМ по узлам и системам, а также распределение неисправностей по группам двух наиболее проблемных узлов ЩОМ: РО и ДВС.

Проведенный систематический анализ последствий неисправностей основан на логическом определении причин неисправностей ЩОМ. Последствиями неисправностей явились: деформация, срез, заедание деталей ЩОМ или образование задиров на их поверхностях. Срез — последствие хрупкого или усталостного разрушения. Хрупкое разрушение происходило из-за внезапного увеличения нагрузки, которая превышала резервы прочности материала. Усталостное разрушение явилось результатом длительного превышения допускаемой нагрузки. Изучение кристаллической структуры поверхности и формы деформаций позволило определить причины, которые провоцируют разрушение.

В результате изучения физики отказов и анализа неисправностей выявлены проблемы при эксплуатации ЩОМ. Основная проблема — внезапные неконтролируемые неисправности. Предложены: мониторинг параметров работы узлов ЩОМ для прогнозирования их отказов; контроль качества изготовления, ремонта, монтажа узлов ЩОМ, а также модернизация систем и узлов ЩОМ для ограничения динамических нагрузок. Второстепенная проблема — постепенно развивающиеся неконтролируемые неисправности. Предложена периодическая диагностика приводов ЩОМ. Внедрение в процесс эксплуатации ЩОМ дискретной или непрерывной диагностики ее состояния, а также модернизация систем и узлов ЩОМ для ограничения динамических нагрузок позволит: резко снизить эксплуатационные расходы; повысить годовую эксплуатационную производительность ЩОМ; снизить трудоемкость ремонтных работ.

Научный руководитель — канд. техн. наук, доц. Н. А. Маслов

УДК 536.2

Исследование влияния углеродных нанотрубок на теплопроводность композитных материалов

О. Т. Рыжук

Новосибирский государственный университет

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ), будучи материалом на основе графена, демонстрируют уникальные свойства, в связи с чем являются перспективными для использования в нанокомпозитах в качестве ультрадисперсного наполнителя. Актуальной задачей при этом является контроль характеристик изготавливаемых продуктов в зависимости от свойств матрицы и дисперсанта. Цель данной работы — разработка и проверка методики измерения коэффициента теплопроводности тонких полимерных пленок с различными массовыми концентрациями ОУНТ при помощи рамановского спектрометра.

Пленки изготавливались из гранул на основе полиамида 6 (PA6) с различными концентрациями ОУНТ при помощи термического пресса. Методика проведения эксперимента включала построение калибровочной зависимости сдвига рамановской G — моды ОУНТ от изменения температуры, а также измерения сдвига пика от мощности лазера. По имеющимся данным вычислялись температуры в верхних слоях пленки для приложенной мощности лазера рамановского спектрометра. Для определения геометрических параметров проведены измерения толщин образцов на оптическом микроскопе. Показано, что мощность излучения не поглощается в верхних слоях пленок для малых концентраций ОУНТ, поэтому на поверхности полимерных образцов наносились пленки из дисперсий на основе воды и SDBS с высокой концентрацией нанотрубок. Такой способ позволил проводить исследование материалов без УНТ в объеме и является полезным для изучения тонких пленок из любых типов материалов.

Путем калибровки по образцу чистого PA6 вычислены значения коэффициентов теплопроводностей исследуемых пленок. Наблюдается рост коэффициента с увеличением доли УНТ в композите, для значений 3–5 % содержания нанотрубок измеренная теплопроводность в 2 раза выше в сравнении с калибровочным образцом. Однако оценка вклада УНТ в коэффициент на единицу процента массовой концентрации показала, что он значительно меньше, чем теоретический. Возможно, это объясняется неоднородностью и наличием большого числа агломератов в дисперсии, применяемой в изготовлении гранул, а также влиянием теплового эффекта Капицы в местах контактов УНТ разных типов и полимерной матрицы. Проведена работа по оценке тепловых потерь и нахождении численного решения задачи теплопроводности в программе Elcut.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. О. Сайк

УДК 539.213

Размерная зависимость структурных превращений в биметаллических наночастицах в процессе кристаллизации

К. Г. Савина, С. С. Богданов, Е. С. Митинев, И. Р. Галузин

Тверской государственный университет

В последние годы исследованию структурных характеристик металлических наночастиц (НЧ) в процессах плавления и кристаллизации уделяется большое внимание. На температурный диапазон структурной стабильности оказывают влияние следующие факторы: размер, начальная геометрическая форма и состав НЧ, тип и степень атомного упорядочения [1]. С учетом тенденции миниатюризации активных и пассивных элементов, используемых в нанотехнологии, проблема размерной зависимости структурных превращений в биметаллических наночастицах в процессе кристаллизации и вероятность реализации определенных сценариев является актуальной задачей, не имеющей к настоящему времени универсального решения [3, 4].

Целью данной работы является определение зависимости структурных характеристик биметаллической НЧ Au-Ag эквиатомного состава, но различного размера: 200, 400, 800, 1520 и 3000 атомов. При моделировании использовался потенциал сильной связи [4]. Установлено, что преимущественной является ГПУ-фаза, причем с увеличением размера НЧ ее доля увеличивается. Энергетический спектр НЧ показывает, что НЧ остаются термически стабильными вне зависимости от размера.

Исследования выполнены при поддержке РФФИ (проект № 20-33-90192).

1. Мясниченко В. С., Ершов П. М., Богданов С. С. и др. Кристаллизация биметаллических наночастиц: влияние размерного несоответствия атомов и внешнего давления // Физ.-хим. аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2020. Вып. 12. С. 274–283.
2. Сдобняков Н. Ю., Соколов Д. Н. Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование: моногр. Тверь: ТвГУ, 2018. 175 с.
3. Сдобняков Н. Ю., Колосов А. Ю., Мясниченко В. С. и др. Исследование поведения структурных характеристик наночастиц металлов вблизи фазового перехода плавление/кристаллизация // X Междунар. науч.-техн. конф. «Микро- и нанотехнологии в электронике». Нальчик: Каб.-Балк. ун-т, 2018. С. 92–95.
4. Cleri F., Rosato V. Tight-Binding Potentials for Transition Metals and Alloys // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48, iss. 1. P. 22–33.

Научный руководитель — канд. физ.-мат наук Н. Ю. Сдобняков

УДК 538.9

Создание тонких пленок $BiFeO_3$ методом осаждения из химического раствора с послойным контролем морфологии и фазового состава

В. А. Сафина [1], А. С. Абрамов [1], А. Г. Соболь [2], В. Слабов [3], Л. А. Трусов [2], А. В. Васильев [2], В. Я. Шур [1], А. Л. Холкин [1,3], Д. О. Аликин [1]

[1] Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург
[2] Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
[3] Университет Авейру, Авейру, Португалия

$BiFeO_3$ (BFO) является одним из перспективных мультиферроиков, тонкие пленки которого обладают высокой спонтанной поляризацией и антиферромагнитными свойствами [1, 2]. Метод осаждения из химического раствора позволяет получать тонкие пленки с большой площадью покрытия для использования в различных электромеханических устройствах и сенсорах. Однако микроструктура таких пленок часто достаточно неидеальна, особенно для пленок толщиной в несколько сотен нанометров, получаемых методом послойного осаждения. Влияние послойного осаждения и качества отдельных слоев на свойства пленок в литературе обсуждается редко.

В данной работе использована силовая микроскопия пьезоэлектрического отклика и атомно-силовая микроскопия проводимости для исследования тонких пленок BFO, полученных методом послойного осаждения из химического раствора (золь-гель процесс). Проанализированы морфология, распределение локальных пьезоэлектрических свойств и проводимости в зависимости от числа нанесенных слоев пленки. Установлено, что конечные свойства получаемых тонких пленок определяются не только составом геля и условиями термической обработки на стадии кристаллизации, но и морфологией пленки, формирующейся на стадии гелеобразования. Показано, что температура и продолжительность сушки раствора сильно влияют на качество покрытия пленкой поверхности, что в итоге определяет морфологию пленки и протекание процесса кристаллизации.

Работа выполнена с использованием оборудования УЦКП «Современные нанотехнологии» УрФУ, при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-72-10076).

1. Catalan G., Scott J. F. Physics and Applications of Bismuth Ferrite // Adv. Mater. 2009. Vol. 21. P. 2463–2485.
2. Fujino S., Murakami M., Anbusathaiah V. et al. Combinatorial Discovery of a lead-Free Morphotropic Phase Boundary in a Thin-Film Piezoelectric Perovskite // Appl. Phys. Lett. 2008. Vol. 92. P. 202904.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. Д. О. Аликин

УДК 67.017

Исследование влияния наночастиц алмаза на структуру и механическое поведение сплава Mg-Ca-Zn

М. А. Селиховкин, В. Д. Валихов

Томский государственный университет

Одним из активно развивающихся направлений на основе новых сплавов является создание биорезорбируемых имплантатов. Медицинский магний является перспективным для использования в качестве матричного материала, однако он быстро разлагается в физиологических средах. Один из способов упрочнения — получение ультрамелкозернистой структуры с помощью усложнения химического состава сплава путем добавления нанопорошка алмаза. Цель работы заключалась в исследовании влияния высокомодульных наночастиц алмаза на структуру и механическое поведение сплава Mg-Ca-Zn.

В исследовании изготовлен сплав путем плавления чистого магния (99,9 %) в стальном тигле в атмосфере аргона с добавлением цинка (4 мас. %) и кальция (1 мас. %). Далее в магниевый сплав системы Mg-Ca-Zn вводили наночастицы алмаза с последующей разливкой в стальной кокиль при температуре расплава 710 °С. Получены отливки сплава с добавления наночастиц и без для сравнения.

Твердость определялась методом Бринелля с нагрузкой 250 кг на сферический индентор диаметром 5 мм с выдержкой в 30 с. Микроструктура исследовалась на микроскопе Olympus GX71, средний размер зерна исследуемых сплавов посчитан методом случайных секущих по изображениям микроструктуры. Испытание на сжатие стандартных плоских образцов проведены на испытательном стенде Instron 3369 со скоростью нагружения 4,8 мм/мин.

Обнаружено, что в сплаве магния без наночастиц алмаза твердость составила 54 HB, а твердость сплава с содержанием 0,1 мас. % наноалмаза — 52 HB. Средний размер зерна у сплава без частиц — 190 мкм. При введении наноалмаза в расплав средний размер зерна снизился до 80 мкм. Исходя из данных, полученных при сжатии стандартных образцов исследуемых сплавов, установлено, что для исходного и модифицированного сплава с содержанием 0,1 мас. % наноалмаза условный предел текучести составил 66 и 75 МПа, предел прочности — 294 и 332 МПа при значении пластичности 22 и 27 % соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1384)

Научный руководитель — канд. техн. наук И. А. Жуков

УДК 54-162.2

Экспериментальное исследование стабильности метана в условиях недр планет – ледяных гигантов

А.И. Семерикова

Новосибирский государственный университет
Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН

Метан — один из самых распространенных углеводородов во Вселенной, входящий в состав льдов планет — ледяных гигантов (Урана и Нептуна) [1]. Фазовая диаграмма метана при условиях недр этих планет представляет собой исходную информацию, необходимую для понимания их физики. Кроме того, интерес представляет стабильность легких углеводородов как составляющей глубинных флюидов Земли, в том числе в связи с образованием восстановленных углеродсодержащих фаз (алмазов, карбидов и др.) [2].

Результаты предыдущих исследований традиционно интерпретировались в пользу разложения метана с образованием алмаза при давлении 16–60 ГПа и температуре 1700–3200 К [3, 4]. Однако для повышения эффективности нагрева в соответствующих экспериментах использовались материалы-поглотители излучения (в основном платина).

Нами убедительно продемонстрировано, что в условиях высоких давлений (20–100 ГПа) и температур (1500–2500 К) разложение метана в присутствии платины на самом деле связано с образованием гидридов платины [5]. Проведенные термодинамические оценки показали, что образование таких гидридов может снижать давление разложения метана на водород (связывающийся в гидрид) и алмаз на ~ 200 ГПа.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030».

1. Guillot T., Gautier D. Giant Planets // arXiv. 2014.
2. Zhang C., Duan Z. A Model for C–O–H Fluid in the Earth's Mantle // Geochim. Cosmochim. Acta. 2009. Vol. 73, № 7. P. 2089–2102.
3. Benedetti L.R. Dissociation of CH_4 at High Pressures and Temperatures: Diamond Formation in Giant Planet Interiors? // Science. 1999. Vol. 286, № 5437. P. 100–102.
4. Hirai H. et al. Polymerization and Diamond Formation from Melting Methane and Their Implications in Ice Layer of Giant Planets // Phys. Earth Planet. Interiors. 2009. Vol. 174, № 1–4. P. 242–246.
5. Semerikova A. et al. Face-Centered Cubic Platinum Hydride and Phase Diagram of PtH // Eur. J. Inorg. Chem. 2020. Vol. 2020, № 48. P. 4532–4538.

Научный руководитель — канд. геол.-минерал. наук С.В. Ращенко

УДК 538.9

Разработка подходов к повышению точности определения параметров элементарных ячеек монокристаллов

П. С. Серебренникова

Новосибирский государственный университет

Недостаточная точность определения параметров элементарной ячейки (ПЭЯ) монокристаллов на лабораторных дифрактометрах широко обсуждается [1]. К основным проблемам можно отнести несовершенство существующего программного обеспечения рентгеноструктурного анализа: отсутствие возможности введения поправки на эталон и разделения дублета $K\alpha_{1,2}$. Для учета этих недостатков ранее предложена методика, основанная на использовании внешнего эталона. Основным достоинством методики является ее применимость к кристаллам любой сингонии. Для уточнения ПЭЯ высокосимметричных кристаллов требуется определить положение одного или двух рефлексов. Если эти рефлексы можно вывести в отражающее положение в центральную область детектора, то полная калибровка детектора не требуется, достаточно в этих же условиях снять рефлексы эталона и ввести поправки. Настоящая работа посвящена разработке новой методики использования внутреннего эталона при уточнении ПЭЯ монокристаллов.

В качестве тестовых образцов выбрана группа фаз $[Pd(NH_3)_4]Mo_xCr_{1-x}O_4$ (x от 0 до 1), интересных в качестве прекурсоров для получения металлических сплавов-катализаторов. Ранее показано, что при длительной совместной кристаллизации исходных солей значение x распределено дискретно и зависит от времени выпадения монокристаллов.

Проведено уточнение ПЭЯ исследуемых солей по нескольким методикам: внешний и внутренний эталон, схема Бонда [2], дифрактометрия поликристаллов. Наилучшим образом совпадают значения ПЭЯ, полученные в последних трех вариантах. Показано, что зависимость объема элементарной ячейки от x близка к линейной (аналог правила Зена) и погрешность определения $x(V)$ не превышает 0,01.

Для проверки наличия эффекта отрицательного теплового расширения использовалась разработанная ранее методика $K\alpha 1$. Показано, что для параметра c характерна смена знака коэффициента теплового расширения (перегиб) при переходе через 300 К. Для объяснения этого эффекта проведена серия рентгеноструктурных анализов при разных температурах.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030».

1. Herbstein F. H. How Precise are Measurements of Unit-Cell Dimensions From Single Crystals? // Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci. 2000. Vol. 56, № 4. P. 547–557.
2. Bond W. L. Precision Lattice Constant Determination // Acta Crystallogr. 1960. Vol. 13, № 10. P. 814–818.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. С. А. Громилов

УДК 542.8

Исследование структуры сплавов системы Al-Si. Апробация подходов электрохимического травления металлографических шлифов

И. Л. Синкина, Н. И. Кахидзе, В. Д. Валихов, М. А. Селиховкин

Томский государственный университет

Электрохимическое травление металлографических шлифов позволяет при изучении металлов более точно определить формы и размеры отдельных фаз и зерен, микропустоты и их расположение. Электрохимическое травление осуществляется при воздействии реагентов с приложением электрического тока, и, согласно источнику «Лаборатория металлографии», сплавы Al-Si травятся в электролитах тетрафтороборной и серно-плавиковой кислот [1].

Материал для исследования — заполированные до зеркального блеска образцы из сплава системы Al-Si марки АК7, методика получения которого описана в [2].

Травление образцов производилось электрохимическим методом при напряжении 10–22 В, 0,2–0,3 А в электролитах: тетрафторборной (HBF_4 3 % раствор) или серно-плавиковой (H_2SO_4 80–85 %, HF (50 %) 10–18 %, H_2O 5–8 %) кислотах. Время травления образцов 2–5 мин, комнатная температура. Средний размер зерна исследуемых сплавов рассчитан методом случайных секущих.

Травление в серно-плавиковой кислоте не приводило к проявлению структуры исследуемых образцов. После травления образцов в тетрафторборной кислоте удалось определить границы зерен и их формы. Получено, что в центральной части отливок сплава АК7 структура представлена равноосными зернами с включениями микропор размерами до 30 мкм. Рассчитано, что средний размер зерна в центральной части отливки составляет 240 мкм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания № FSWM-2020-0028.

1. Панченко Е. В., Скаков Ю. А., Кример Б. И. и др. Лаборатория металлографии. М.: Металлургия, 1965. 440 с.
2. Valikhov V., Kahidze N., Khrustalyov A. et al. Investigation of Structure, Mechanical Properties and Crystallization of Aluminum Alloys Containing Aluminum Oxide Nanoparticles // MATEC Web Conf. France: EDP Sci., 2018. № 243. P. 00022.

Научный руководитель — канд. техн. наук А. П. Хрусталев

УДК 544.03, 537.6, 53.096

Магнитноструктурные корреляции в цепочечно-полимерных комплексах $Cu(hfac)_2$ с нитронилнитроксилами

К. А. Смирнова

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Комплексы Cu(II) со стабильными нитроксильными радикалами известны способностью демонстрировать обратимые магнитноструктурные переходы [1, 2]. Такие системы являются перспективными для создания молекулярных устройств, индикаторов или переключателей. Температура и характер магнитноструктурных аномалий определяются заместителями как в нитронилнитроксильном фрагменте, так и в пиридиновом цикле.

Цель данной работы — исследование магнитноструктурных корреляций в серии новых комплексов гексафторацетилацетоната Cu(II) ($Cu(hfac)_2$) с алкил-пиридилзамещенными нитроксильными радикалами L^R (R = Me, Et, *i*-Pr, *n*-Pr, *n*-Bu и циклопентил — CP) методами РСА и магнетохимии.

Рентгеноструктурное исследование показало, что полимерно-цепочечные комплексы $\{[Cu(hfac)_2L^R]_2[Cu(hfac)_2]\}_n$ образованы циклическими димерами $[Cu(hfac)_2L^R]_2$, объединенными в цепь фрагментами $[Cu(hfac)_2]$. Парамагнитный L^R координируется атомами O нитронилнитроксильного фрагмента и атомом N пиридинового цикла, выполняет тридентатно-мостиковую функцию.

При исследовании магнитных свойств комплексов обнаружено значительное изменение $\mu_{эфф}$ при понижении температуры, что свидетельствует о наличии фазового перехода. Для комплексов с L^R, где R = Et, *n*-Pr, *i*-Pr, CP, переход происходит при 230, 190, 170, 290 K соответственно, тогда как для комплексов с L^{Me}, $L^{n\text{-}Bu}$ переход не завершен при температурах вплоть до 350 K.

Структурные данные, полученные в интервале температур 335–100 K, позволили установить, что фазовый переход вызван изменением координационного окружения ионов Cu(II) в димерных фрагментах, при котором происходит смена координации нитронилнитроксила с аксиальной на экваториальную и появление сильного антиферромагнитного обмена между спинами парамагнитных центров. Также выявлено, что температура разупорядочения алкильного заместителя в пиридиновом цикле коррелирует с температурой фазового перехода.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030».

1. Ovcharenko V. I. Stable Radicals / ed. R. G. Hicks. UK Wiley, 2010. C. 461–506.
2. Tolstikov S. E. et al. Heterospin complex showing spin transition at room temperature // Polyhedron. 2015. T. 100. C. 132–138.

Научные руководители — канд. хим. наук А. С. Богомяков, Г. А. Летягин

УДК 544.225.2:548.713.022.723

Электронная структура и динамика решетки Be_2NF

В. С. Тимофеев

Кемеровский государственный университет

Одним из важных направлений современного материаловедения является поиск новых соединений с заданными свойствами на основе теоретического моделирования гипотетических структур, среди которых значительное число занимают полупроводники со структурой халькопирита или антихалькопирита. В настоящей работе предполагаемая структура Be_2NF (антихалькопирит) выбрана на основе анализа структурных и электронных характеристик нитридов и фторидов бериллия, для многих из которых характерна тетраэдрическая координация атомов в решетке, а оценка параметров решетки получена с использованием атомных радиусов. Для уточнения структурных характеристик, исследования устойчивости кристалла, а также электронных и динамических свойств выполнены первопринципные расчеты с использованием программного пакета QuantumEspresso [1] в локальном приближении теории функционала плотности.

Расчетные параметры решетки составляют a = 3,9743 Å, c = 7,9772 Å, при этом величина тетрагонального сжатия $\gamma = c/a = 2{,}0072$ близка к идеальному для удвоенной ячейки сфалерита, но смещение анионов достаточно заметное, u = 0,3232, что обусловлено неэквивалентностью связей Be-N (1,5732 Å) и Be-F (1,9057 Å). Анализ зонной структуры Be_2NF показывает, что данный кристалл является полупроводником, E_g = 4,47 эВ, а характер распределения заряда, форма функции электронной локализации (ELF), значения эффективных зарядов Борна и высокочастотная диэлектрическая проницаемость ($\mathcal{E}_{xy}$ = 3,44, $\mathcal{E}_z$ = 3,24) указывают на ионный тип химической связи. Фононный спектр Be_2NF (полная ширина ~ 1200 cm^{-1}) не содержит мнимых частот, что является подтверждением устойчивости Be_2NF.

1. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T. et al. Advanced Capabilities for Materials Modelling with Quantum ESPRESSO // J. Phys.: Condens. Matter. 2017. Vol. 29. P. 465901.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. А. Б. Гордиенко

УДК 621.315.592

Изучение роста гетероэпитаксиальных наноструктур германия на рельефных поверхностях кремния

У Цзяи

Новосибирский государственный университет

Пространственно упорядоченные массивы квантовых точек могут быть использованы для создания многих микроэлектронных приборов нового поколения. Надежным методом для получения таких массивов является гетероэпитаксиальный рост на подложках с паттернингом в виде системы пространственно упорядоченных ямок. С фундаментальной точки зрения малоизученным является механизм поверхностной атомной диффузии по стенкам ямок. В данной работе методом молекулярной динамики (МД) изучается процесс образования атомных димеров и димерных цепочек при осаждении атомов Ge на стенки ямок в подложке Si. На основе результатов МД моделирования анализируются возможные сценарии роста смачивающего слоя Ge в ямках.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук П. Л. Новиков

УДК 537.3, 537.6

Особенности электронного транспорта в $YBaCo_4O_{7+x}$

Д. И. Фролов

Новосибирский государственный технический университет

В данной работе исследовался электронный транспорт в слоистом соединении $YBaCo_4O_{7+x}$ с различным содержанием кислорода. Поликристаллические образцы получены твердофазным синтезом в ИНХ СО РАН и охарактеризованы рентгенофазовым анализом и электронной микроскопией. Оригинальные методики отжига образцов в вакуумной и кислородной среде позволяли добиться значения x с точностью до ~ 0,001. Электросопротивление измеряли 4-контактным методом в интервале температур 77–350 K. Удельное электросопротивление образцов понижалось с увеличением кислорода.

Температурные зависимости электросопротивления образцов $YBaCo_4O_{7+x}$ имеют активационный рост сопротивления при понижении температуры, что характерно системам с локальным беспорядком. Электронным транспортом в таких системах является прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка, что означает: с понижением температуры носителям тока становится выгоднее перемещаться на большие расстояния с меньшим изменением энергии $\left(\rho = \rho_0 \exp\left(\frac{T_M}{T}\right)^{\frac{1}{n+1}}\right)$. Для определения параметров электронного транспорта из экспериментальных данных вычислялись значения энергии активации от температуры: $\Delta E_{FF} = \frac{d \ln \rho}{d\left(1/T\right)} = \frac{\ln \rho_0}{n+1}\left(\frac{T_M}{T}\right)^{\frac{1}{n+1}-1}$. Проводилась нелинейная аппроксимация полученной зависимости по формуле aT^b, где $b = 1 - \frac{1}{n+1}$, а n — размерность системы. Установлено, что $b \approx ½$ ($n = 1$) для всего набора образцов $YBaCo_4O_{7+x}$. Такое значение $n = 1$ можно объяснить либо в рамках модели кулоновской щели, либо одномерной прыжковой проводимостью с переменной длиной прыжка.

Температурные зависимости магнитного момента образцов измерены от 2 до 350 K в магнитных полях до 1 Тл с помощью СКВИД-магнитометра MPMS. Из температурных зависимостей магнитной восприимчивости установлено, что образцы являются сильно фрустрированным антиферромагнетиком. Ниже 50 K наблюдается термомагнитная необратимость, характерная для состояния спинового стекла. Можно предположить, что это связано с геометрической фрустрацией: магнитные моменты трех ионов кобальта в треугольной решетке не могут выстроиться антиферромагнитно. По-видимому, с этим же явлением связан и электронный транспорт: носителям тока для движения по локализованным областям необходимо активационно преодолеть некий барьер (кулоновскую щель), который связан с изменением локального магнитного порядка ионов кобальта.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Е. Н. Ткачев

УДК 548.734

Структурная диагностика нанесенных никельсодержащих катализаторов Ni-$Ce_{1-x}Zr_xO_2$ для процесса метанирования оксидов углерода

Н. А. Харченко

Новосибирский государственный университет
Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Каталитический процесс метанирования оксидов углерода представляет интерес в качестве перспективного метода получения синтетического природного газа. Эффективными для данного процесса представляются нанесенные никелевые катализаторы $Ni/Ce_{1-x}Zr_xO_2$. Ранее показано, что в катализаторах $Ni/Ce_{1-x}Zr_xO_2$ есть сильное взаимодействие между активным компонентом и материалом носителя с вхождением атомов никеля в структуру носителя [1, 2]. Однако вопросы о возможности формирования твердых растворов Ni-Ce-Zr-O и их стабильности остаются открытыми.

Данная работа посвящена исследованию структурных особенностей систем $Ni\text{-}Ce_{1-x}Zr_xO_2$, полученных методом Пекини с доказанной эффективностью для синтеза смешанных оксидов.

Методами порошковой дифракции проведен сравнительный анализ никельсодержащего образца $Ni\text{-}Ce_{1-x}Zr_xO_2$ и референсного образца $Ce_{1-x}Zr_xO_2$. Результаты подтвердили возможность образования твердого раствора замещения Ni-Ce-Zr-O со структурой типа флюорита. Зафиксировано искажение его кристаллической структуры из-за различий в характерной координации и радиусов катионов. Методами ПЭМ подтверждено равномерное распределение никеля в образце на атомарном уровне. Данные спектроскопии комбинационного рассеяния света также указали на формирование твердого раствора Ni-Ce-Zr-O с точечными дефектами в виде кислородных вакансий и разупорядоченной структурой. По данным H_2-ТПВ установлено, что восстановление соединений никеля в образце затруднено, так как сопряжено с процессом выхода катионов никеля из структуры смешанного оксида.

На основании данных *in situ* дифракции и ПЭМ установлено, что твердый раствор Ni-Ce-Zr-O не стабилен. В восстановительных условиях реакций метанирования он распадается с выходом части катионов никеля из структуры и сегрегацией частиц металлического никеля Ni^0.

Испытания в реакциях метанирования выявили низкую активность катализатора $Ni\text{-}Ce_{1-x}Zr_xO_2$ по сравнению с нанесенным катализатором $Ni/Ce_{1-x}Zr_xO_2$ с близким содержанием никеля. Образующиеся при распаде твердого раствора Ni-Ce-Zr-O частицы Ni^0 декорированы и недоступны для реагентов.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030».

1. Ashok J. et al. Enhanced Activity of CO_2 Methanation Over Ni/CeO_2–ZrO_2 Catalysts: Influence of Preparation Method // Catal. Today. 2017. Vol. 281. P. 304.
2. Pakharukova V. P. et al. Investigation of the Structure and Interface Features of Ni/Ce1-xZrxO_2 Catalysts for CO and CO_2 Methanation // J. Phys. Chem. C. 2021. Vol. 125. P. 20538.

Научный руководитель — канд. хим. наук В. П. Пахарукова

УДК 539.143.43

Строение силикоалюмофосфата SAPO-11 по данным твердотельной ^{27}Al, ^{29}Si, ^{31}P ЯМР-спектроскопии в сочетании с квантово-химическими расчетами

Н. Е. Черепанова

Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В настоящее время кристаллические силикоалюмофосфаты (SAPO-n) активно используют в качестве катализаторов разложения N_2O, гидроизомеризации н-октана, изомеризации н-парафинов. Микропористые силикоалюмофосфаты получают путем включения атомов Si в структуру алюмофосфатов ($AlPO_4$-n), механизм формирования кремниевых центров кристаллических силикоалюмофосфатов SAPO-n является актуальной задачей исследования.

Цель данной работы заключается в исследовании механизмов формирования кремниевых центров силикоалюмофосфата SAPO-11 сочетанием методов твердотельной ^{27}Al, ^{29}Si, ^{31}P ЯМР-спектроскопии и квантово-химических расчетов, комбинация указанных методов позволит проследить температурную закономерность формирования кремниевых центров SAPO-11.

Объектом исследования являлся кристаллический силикоалюмофосфат SAPO-11, полученный путем темплатного гидротермального синтеза, в работе исследована серия образцов SAPO-11, прокаленных при разных температурах.

Современная твердотельная ЯМР-спектроскопия позволяет на молекулярном уровне определить локальное окружение ядер, включенных в структуру SAPO-11. Получена серия MAS ЯМР-спектров SAPO-11 для ядер ^{27}Al, ^{29}Si, ^{31}P. ^{31}P MAS ЯМР-спектры SAPO-11 характеризуются суперпозицией как минимум 3 линий, положение которых около –33, –29, –23 м. д., при этом в случае непрокаленного SAPO-11 эти линии уширены по сравнению с прокаленными образцами.

^{27}Al — квадрупольное ядро со спином 5/2, вследствие чего уширение спектральных линий, вызванное ядерным квадрупольным взаимодействием второго порядка, значительно усложнило анализ ^{27}Al MAS ЯМР спектров. Для определения ЯМР-параметров квадрупольных ядер необходимо проведение дополнительных экспериментов, в данном случае использована методика MQMAS (*Multiple Quantum Magic Angle Spinning*), которая позволила определить положения линий в ^{27}Al MAS ЯМР-спектрах SAPO-11. ^{27}Al MAS ЯМР-спектры SAPO-11 представляли собой суперпозицию 3 линий, находящихся в диапазоне, характерном для тетраэдрически координированных атомов алюминия. В случае непрокаленного SAPO-11 наблюдалась дополнительная линия около 6 м. д., которая может быть отнесена к пятикоординированному алюминию, появляющемуся в результате координации одной молекулой воды тетраэдрически координированным атомом алюминия.

Сопоставление данных ^{27}Al и ^{31}P MAS ЯМР-спектров позволило установить изменения в строении SAPO-11, происходящие при удалении темплата при прокаливании образцов. Но самым информативным методом исследования системы SAPO-11 является ^{29}Si MAS ЯМР-спектроскопия, ^{29}Si MAS ЯМР-спектры получены для образцов, обогащенных изотопом ^{29}Si (80 % обогащение). Методом ^{29}Si MAS ЯМР-спектроскопии для SAPO-11 проследили температурную зависимость формирования кремниевых центров. Стоит отметить, что для прокаленных образцов характерны линии со сдвигами около –93; –94,5; –97; –100 м. д., это позволило отнести их к силикоалюмофосфатным центрам типа Q^0 [Si(4Al)], Q^1 [Si(3Al,1Si)], Q^2 [Si(2Al,2Si)], Q^3 [Si(1Al,3Si)] соответственно; для непрокаленного образца линия на –97 м. д. Q^2 [Si(2Al,2Si)] отсутствовала. Для более детального исследования формирования кремниевых центров SAPO-11 проведены квантово-химические расчеты.

Квантово-химические расчеты для исследования строения SAPO-11 выполнены методом функционала электронной плотности (DFT — *Density Functional Theory*) в программном пакете CASTEP. Метод GIPAW (*Gauge Including Projector Augmented Waves* — метод калибровочно-инвариантных проекционных присоединенных плоских волн) с пороговой энергией 600 эВ использовали при расчете ^{27}Al, ^{29}Si, ^{31}P ЯМР-параметров структур SAPO-11.

Первоначально проведены квантово-химические расчеты ^{27}Al, ^{29}Si, ^{31}P ЯМР-параметров для структуры $AlPO_4$-11. Далее рассматривалось влияние включения атомов Si в структуру алюмофосфата на ^{27}Al ЯМР-параметры. Определено, что наличие одного атома Si в первой координационной сфере атома Al ([Al(3P,1Si)]) изменило ^{27}Al ЯМР-параметры следующим образом: увеличило квадрупольную константу C_Q в 2–5 раз, изменило изотропное значение ХС δ_{iso} на 5–20 м. д.

Научные руководители — И. В. Яковлев, д-р хим. наук О. Б. Лапина

УДК 535.34

Антиотражающие свойства покрытий из частиц германия, выращенных на оксидированной поверхности кремния

Чжу Чжен

Новосибирский государственный университет

Антиотражающие покрытия используются во многих областях науки и техники, в частности в солнечной энергетике и оптике. Обычно они состоят из нескольких сплошных пленок разного химического состава. Альтернативой им могут служить покрытия, состоящие из массивов диэлектрических частиц с размерами, в несколько раз меньшими длины волны рассеиваемого света, т. е. из частиц субволнового размера. По сравнению со сплошными пленками антиотражающие свойства таких покрытий меньше зависят от угла падения света и могут быть более широкополосными или, наоборот, служить в качестве узкополосных фильтров. Под действием электромагнитного излучения в частицах возбуждаются магнитные и электрические колебания. Такие колебания становятся интенсивными в условиях резонансов. Для сферической частицы диаметром d в среде воздуха магнитный дипольный резонанс возбуждается на длине волны $\lambda_m = nd$, где n — показатель преломления материала частицы.

Изучены спектры отражения покрытия из частиц германия, полученных на подложке кремния, покрытой тонким слоем оксида кремния. Ранее показано, что отжиг тонкого сплошного слоя германия, осажденного на такие подложки, приводит к его распаду с образованием компактных частиц [1]. Спектры отражения измерены в диапазоне длин волн 300–1200 нм. Размер частиц германия зависел от толщины исходного сплошного слоя германия. Распределение частиц по размеру определялось посредством компьютерной обработки изображений поверхности образцов, полученных с помощью сканирующего электронного микроскопа. В измеренных спектрах отражения наблюдалось два минимума. Минимум в длинноволновой области спектра коррелирует с условиями возбуждения магнитного и электрического дипольных резонансов. Минимум в коротковолновой области спектра, вероятно, связан с возбуждением квадрупольных резонансов. Благодаря появлению этих двух минимумов отражающее свойство исследуемых покрытий из диэлектрических частиц германия становится широкополосным. Установлено также, что глубина минимумов выше у покрытий, полученных при более высоких температурах отжига.

1. Shklyaev A. A., Latyshev A. V. Dewetting Behavior of Ge Layers on SiO2 Under Annealing // Sci. Rep. 2020. Vol. 10. Art. No 13759.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук А. А. Шкляев

УДК 66.088

Микроструктура UO_2–Y_2O_3 керамики, полученной методом искрового плазменного спекания

Н. Д. Чуй, А. А. Белов, А. Н. Федорец

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

В работе исследована фазовая структура UO_2 керамики, полученной из смеси порошков UO_2 с добавлением 2 % Y_2O_3 методом искрового плазменного спекания (ИПС). Основными преимуществами получения методом ИПС являются высокая скорость нагрева и низкая конечная температура материала [1]. Добавление Y_2O_3 к керамике в качестве выгорающих поглотителей нейтронов является эффективным средством оптимизации управления активной зоной ядерных реакторов [2–3].

По данным рентгенофазового анализа, спекание порошка UO_2 с добавлением 2 % Y_2O_3 приводит к формированию керамики на основе твердого раствора $(U,Y)O_2$ со структурой типа флюорита. Отдельной фазы Y_2O_3 не наблюдается, однако отмечается небольшое уширение дифракционных пиков и их смещение. Это указывает на изменение постоянных решетки, связанное с образованием соединения $(U,Y)O_2$, подобного диоксиду урана. Анализ параметров решетки показывает изменение объема элементарной ячейки при добавлении оксида иттрия: UO_2 ($a = b = c = 5{,}46881 \pm 0{,}0009$ Å), UO_2 + 2 % Y_2O_3 ($a = b = c = 5{,}47256 \pm 0{,}0009$ Å), что свидетельствует об образовании твердого раствора $(U,Y)O_2$.

Методом дифракции отраженных электронов (ДОЭ) проведен анализ микроструктуры полученной керамики, который позволил определить разориентировку границ кристаллитов, долю малоугловых границ и определить текстуру материала. На ДОЭ-картинах микроструктуры наблюдается однородная структура, размер зерен достигает 2 мкм. На картине разориентации межзеренных границ преобладают большеугловые границы. Это может свидетельствовать о завершенных процессах релаксации и слабом развитии субструктуры в керамике, полученной методом ИПС.

1. Papynov E. K., Shichalin O. O., Buravlev I. Yu. et al. UO_2–Y_2O_3 Ceramic Nuclear Fuel: SPS Fabrication, Physico-Chemical Investigation and Neutron Absorption Evaluation // J. Alloy. Compd. 2021. Vol. 877, article 160266.
2. Lovecký M., Závorka J., Jiřičková J. et al. Increasing Efficiency of Nuclear Fuel Using Burnable Absorbers // Prog. Nucl. Energy. 2020. Vol. 118, article 103077.
3. Gosset D. Absorber Materials for Generation IV Reactors // Struct. Mater. Generation IV Nucl. Reactors. Elsevier Ltd; N.Y., 2017. P. 533–567.

Научный руководитель — канд. хим. наук Е. К. Папынов

УДК 621.315.592

Расчет потенциального рельефа непланарных поверхностей методом молекулярной динамики

Чэнь Юйцзин

Новосибирский государственный университет

Ряд перспективных микроэлектронных приборов и устройств основан на электронных свойствах пространственно упорядоченных массивов квантовых точек. Наибольшее распространение для создания таких массивов получил гетероэпитаксиальный рост на подложках, поверхность которых содержит систему регулярных ямок, сформированных с помощью литографии. Свойства рельефных кристаллических поверхностей с точки зрения поверхностной атомной диффузии малоизучены. В данной работе методом молекулярной динамики рассчитывается потенциальный рельеф на стенках ямок на различных стадиях роста смачивающего слоя Ge на подложке Si. Определены положения минимумов, седловых точек, энергия активации поверхностной диффузии и характерные маршруты миграции атомов Ge по стенкам ямок.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук П. Л. Новиков

УДК 616-74

Изучение структуры и физико-механических свойств скэффолдов на основе поли-3-оксибутирата и магнетита после биодеградации *in vitro*

Л. Е. Шлапакова, И. Парий, А. С. Прядко,
М. А. Сурменева, Р. В. Чернозем

Томский политехнический университет

В данном исследовании проводилась биодеградация *in vitro* электроформованных гибридных скэффолдов на основе поли-3-оксибутирата (ПОБ) и частиц субмикронного (М3) и наноразмерного (М1, М7) магнетита. Поверхность наночастиц М1 модифицирована лимонной кислотой. В качестве модельных сред для биодеградации выбраны фосфат-буферный раствор (БФС) и свиная панкреатическая липаза в БФС в концентрации 0,25 мг/мл.

Рентгенофазовый анализ позволил установить для всех композитов основные характерные пики орторомбической α-фазы ПОБ при 2θ = 13,6° (020) и 16,9° (110). Кроме того, наблюдаются менее выраженные рефлексы в области 21,4° (101); 22,4° (111); 25,5° (031/130); 26,9° (040). Выраженные рефлексы при 18,2° (111); 30,4° (220); 35,9° (311); 43,5° (400); 53,5° (422); 57,7° (511); 63,1° (440) соответствуют магнетиту с гранецентрированной кубической решеткой [1]. Важно отметить, что в случае композита с субмикронными частицами (ПОБ/М3) после инкубации как в БФС, так и в растворе липазы наблюдается сдвиг рефлекса плоскости (020) в сторону больших углов, что указывает на снижение параметров решетки кристаллической фазы полимера и, как следствие, наличие растягивающих микронапряжений. Вследствие этого мы предполагаем уменьшение расстояния между ламелями и уплотнение кристаллической структуры в ходе биодеградации. В случае гибридных скэффолдов с наночастицами магнетита (ПОБ/М1, ПОБ/М7) указанный рефлекс сдвигается в сторону меньших углов после биодеградации. Помимо этого, на рентгенограммах каждого из исследуемых композитов после деградации у рефлекса (020) при 2θ = 13,6° появляется плечо в области меньших углов при 13,2°, связанное с расщеплением данного пика. Эти наблюдения свидетельствуют об увеличении параметров элементарной ячейки и наличии сжимающих микронапряжений. На основании этого можно предположить увеличение расстояния между ламелями кристаллической фазы композитных полимерных скэффолдов после биодеградации в исследуемых средах.

В ходе механических испытаний на растяжение установлено увеличение механических свойств всех композитов после биодеградации. В случае композита ПОБ/М3 максимальное напряжение до разрыва увеличивается от 0,73 ± 0,07 МПа до 0,90 ± 0,28 и 2,05 ± 0,05 МПа соответственно после деградации в БФС и липазе. Также наблюдается увеличение модуля Юнга гибридных скэффолдов ПОБ/М3 и ПОБ/М7. Модуль Юнга композита ПОБ/М7 увеличился от 116,05 ± 7,77 МПа

до 146,26 ± 20,80 и 144,84 ± 13,49 МПа соответственно в гидролитической и ферментативной средах. Для композитов с добавлением модифицированных наночастиц удлинение при растяжении возрастает от 7,51 ± 0,57 % до 17,02 ± 4,76 % после деградации в растворе с липазой.

Авторы выражают благодарность коллективу кафедры биоинженерии Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова под руководством А. П. Бонарцева за проведение экспериментов по биодеградации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (проект № 20-63-47096).

1. Li J. H. et al. Simple synthesis and magnetic properties of Fe3O4/BaSO4 multi-core/shell particles // Mater. Chem. Phys. 2009. Vol. 133 (1). P. 140–144.

Научный руководитель — д-р техн. наук, проф. Р. А. Сурменев

УДК 532.5.032, 537.31

Изучение электропроводности и теплопроводности наножидкостей с УНТ

А. А. Шупик

Новосибирский государственный университет

Наножидкости активно изучаются уже четверть века. При этом следует различать наножидкости с обычными сферическими частицами и с углеродными нанотрубками. И если процессы переноса в первых достаточно хорошо изучены, то систематическое изучение этих процессов в наножидкостях с УНТ фактически только начинается.

Целью данной работы является измерение и изучение электропроводности и теплопроводности наножидкостей с одностенными и многостенными углеродными нанотрубками (ОУНТ и МУНТ), а также диффузия УНТ в жидкостях. В экспериментах использовались ОУНТ производства OCSiAl и МУНТ «Таунит-М» производства НаноТехЦентр, весовая концентрация которых варьировалась от 0,05 до 0,2 %, а также базовые жидкости на основе воды и этиленгликоля с добавлением ПАВов ПВП и СДБС. Диффузия частиц измерялась методом динамического рассеяния света (ДРС), электропроводность — 4-контактным методом, а теплопроводность — методом нагретой нити. Все наножидкости приготовлены двухшаговым методом: механическим перемешиванием и ультразвуковой обработкой.

Установлены зависимости электропроводности и теплопроводности от весовой концентрации УНТ, времени ультразвуковой обработки наножидкости, размера частиц в наножидкости. Измерения электропроводности показали, что в наножидкости она растет практически линейно при увеличении концентрации УНТ, сильно зависит от базовых жидкостей и от ПАВов, добавленных в нее. Кроме того, установлено, что МУНТ дают существенно меньший вклад в увеличение как электропроводности (разница электропроводности наножидкостей на основе одних и тех же базовых жидкостей, но с разными УНТ может доходить до трех порядков), так и в теплопроводности. Помимо этого, экспериментально установлено, что добавление ОУНТ может увеличивать теплопроводность базовой жидкости вплоть до 20 %.

Параллельно для каждой приготовленной наножидкости методом ДРС на приборе Zetasizer ZSP Nano определены и изучены средние гидродинамические размеры частиц в них, а также соответствующие коэффициенты диффузии.

Работа выполнена при частичном финансировании Российского научного фонда (проект № 20-19-00043).

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. В. Я. Рудяк

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 533.1

Исследование структурных перестроений ионных жидкостей при стекловании методами ЭПР и МД

Д. В. Алимов

Новосибирский государственный университет

Понимание гетерогенных наноструктур различных органических стекол важно для многих приложений. Методом ЭПР-спектроскопии исследованы структурные перестроения различных органических стекол вблизи их температур стеклования. Обнаружена аномальная зависимость микровязкости от температуры.

Цель работы — исследовать модельную систему дибутилфталат/TEMPO методом молекулярной динамики, чтобы понять механизм данного явления.

Моделирование проводилось в пакете Gromacs с использованием силового поля OPLS-AA. Сформирована система из 500 молекул дибутилфталата и 1 нитроксильного радикала TEMPO. Получены серии NVT-траекторий для температур в окрестности температуры стеклования: 160, 180, 190 K.

Исследованы радиальные распределения атомных групп, вращательные корреляционные функции, кластеризация растворителя. Обнаружено сосуществование двух типов сольватации радикала алкильными цепями растворителя. Первый тип допускает только вращательные колебания радикала с малой амплитудой и соответствует зажатию карбоксильными группами растворителя. Второй тип сольватации допускает вращение с большей амплитудой, сопряженное с динамикой бутильных цепей растворителя. Получено качественное соответствие с экспериментом.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. Ю. Иванов

УДК 523.429.22

Определение энергии расщепления в нулевом поле высокоспиновых ионов кобальта(II) с помощью циркулярно-поляризованного излучения

А. В. Бородулина

Новосибирский государственный университет

Соединения, содержащие высокоспиновые ионы кобальта(II), являются представителями молекулярных магнетиков, имеющих энергетический барьер между состояниями с разной намагниченностью. Одним из наиболее важных для практического применения свойств таких соединений является медленная релаксация намагниченности. Время релаксации зависит от механизмов, которые могут быть различными в зависимости от окружения магнитных центров соединения. Поэтому имеет важное значение изучение диамагнитно-разбавленных соединений, где магнитные ионы частично заменены диамагнитными аналогами. Однако диамагнитное разбавление может не только повлиять на механизмы релаксации намагниченности, но и изменить величину энергии расщепления в нулевом поле. Таким образом, важно иметь возможность определения энергии расщепления в нулевом поле для диамагнитно-разбавленных образцов.

В данной работе представлены результаты экспериментов по определению энергии расщепления с использованием циркулярно-поляризованного излучения для четырех образцов соединения $Co(L(^{III}))_2$ с различной степенью диамагнитного разбавления цинком (100, 30, 10, 3 % $Co(L(^{III}))_2$). Метод определения энергии расщепления в нулевом поле основывался на возможности селективного возбуждения переходов между уровнями системы иона кобальта, находящегося в слабом внешнем магнитном поле, при помощи право- и левополяризованного излучения. Это позволило определить величину энергии расщепления по результатам деления спектров пропускания образцами право- и левополяризованного излучения дальнего ИК-диапазона. Эксперименты проведены на ИК-спектрометре с оптическим криостатом при температуре около 5 К и автоматизированы для повышения уровня сигнал/шум на полученных спектрах. В результате для исследуемых образцов получены значения энергии расщепления в нулевом поле в диапазоне 43,6–43,4 $см^{-1}$.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер

УДК 539.2

Исследование комплексов порфиринов с человеческим сывороточным альбумином с помощью ЭПР-спектроскопии

С. А. Дементьев

Новосибирский государственный университет

Фотодинамическая терапия (ФДТ) — перспективный метод лечения рака, который основан на действии фотосенсибилизатора (ФС), способного накапливаться в тканях опухоли. ФС «активируется» светом, что приводит к образованию синглетного состояния ФС с последующим переходом в триплетное состояние с помощью интеркомбинационной конверсии. Затем триплетное состояние подвергается фотохимическим реакциям и образует активные формы кислорода, при этом синглетный кислород ($^1O_2$) является наиболее эффективным. $^1O_2$ обладает высокой реакционной способностью: он способен вызывать повреждение клеток и необратимый распад поврежденных тканей. Порфирины широко используются в качестве ФС из-за их высокого квантового выхода $^1O_2$. Как правило, наиболее эффективные ФС плохо растворяются в физиологических средах и склонны к агрегации. Большинство агрегатов ФС неэффективны при генерации $^1O_2$. Однако гидрофобные ФС могут полностью или частично дезагрегировать, взаимодействуя с белками плазмы. Сывороточный альбумин человека (HSA) — наиболее распространенный белок в плазме крови, имеющий множество сайтов связывания и являющийся эффективным носителем различных фотосенсибилизаторов. Актуальной задачей является построение корреляции между структурой ФС, его локализации в комплексе с белком и эффективностью в ФДТ.

В данной работе проведены исследования эффективности генерации синглетного кислорода различными порфиринами с использованием спиновой ловушки TAAN. Использовалось 2 (+1 в качестве референса) порфирина с различными свойствами: анионный TCPP, катионный TmPyP4 в качестве референса и катионный C_5Py. Исследована генерация синглетного кислорода при стационарном фотолизе с помощью светодиода при комнатной температуре в оптической кювете при интенсивном перемешивании раствора. Обнаружено, что эффективность генерации синглетного кислорода в буфере без HSA для всех исследуемых фотоагентов ниже, чем для водорастворимого порфирина TmPyP4, однако в присутствии альбумина эффективность генерации падает. С помощью дипольной ЭПР-спектроскопии определены сайты связывания порфиринов и HSA. Порфирин TCPP локализован в сайте связывания субдомена IIIA HSA и экранирован от молекул растворителя. Порфирин C_5Py образует комплекс с белком в том же сайте связывания, что и TmPyP4 (сайт связывания Гема). Недавно показано [1], что синглетный кислород, образующийся при фотолизе комплекса TmPyP4 с HSA, расходуется на окисление белка и не регистрируется методом ЭПР, отсутствие генерации синглетного кислорода для C_5Py объясняется аналогично.

Таким образом, два порфирина с совершенно различными свойствами локализуются в разных сайтах связывания HSA. Их спектроскопические и функциональные свойства отражают особенности соответствующего локального окружения.

1. Sannikova N. E. et al. Application of EPR to Porphyrin-Protein Agents for Photodynamic Therapy // J. Photochem. Photobiol. B: Biol. 2020. Т. 211. С. 112008.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук О. А. Крумкачева

УДК 543.4

Возможности спектроскопии рассеяния Мандельштама – Бриллюэна для исследования и характеризации мембран эритроцитов человека

Е. А. Добрынина

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск

В ряде социально значимых заболеваний, таких как сахарный диабет и COVID-19, возможно изменение свойств и состава мембран эритроцитов крови [1, 2], сопровождаемое изменением их жесткости, что может привести к инфарктам, инсультам, тромбозу. Исследование вязкоупругих свойств (скорости звука и величины упругого модуля), а также контроль за их изменением в ходе заболевания могут быть осуществлены с применением спектроскопии рассеяния Мандельштама — Бриллюэна (РМБ) — бесконтактной, неинвазивной экспериментальной методики. РМБ активно используется для изучения упругих свойств различных биологических объектов [3], однако ранее эта методика не применялась для исследования свойств мембран эритроцитов.

Основная задача работы — исследование возможностей методики РМБ для изучения свойств мембран эритроцитов. Объектами исследования являлись мембраны эритроцитов человека, выделенные из крови методом Доджа [4], осажденные на стеклянную подложку. Поскольку вода оказывает значимое влияние на спектр РМБ биологических объектов, мембраны исследованы как в сухом, так и в гидратированном состоянии.

В результате работы продемонстрировано, что спектры РМБ мембран эритроцитов существенно отличаются от спектра воды и схожи со спектрами синтетических липидных систем, применяемых для моделирования клеточных мембран. Это указывает на перспективы применяемой методики для изучения мембран эритроцитов. Для более детального исследования механических характеристик эритроцитов методом РМБ планируется использовать альтернативные протоколы отчистки мембран для минимизации вклада гемоглобина, а также изучить вопрос донороспецифичности и воспроизводимости результатов и влияние заболевания на параметры спектра.

1. Lin J. et al. Erythrocyte Membrane Analysis for Type II Diabetes Detection Using Raman Spectroscopy in High-Wavenumber Region // Appl. Phys. Lett. 2014. Т. 104, № 10. С. 104102.
2. Kubánková M. et al. Physical Phenotype of Blood Cells is Altered in COVID-19 // Biophys. J. 2021.
3. Eltony A. M., Shao P., Yun S. H. Measuring Mechanical Anisotropy of the Cornea with Brillouin Microscopy // arXiv preprint arXiv:2003.04344. 2020.
4. Dodge J. T., Mitchell C., Hanahan D. J. The Preparation and Chemical Characteristics of Hemoglobin-Free Ghosts of Human Erythrocytes // Arch. Biochem. Biophys. 1963. Т. 100, № 1. С. 119–130.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. А. Зыкова

УДК 577

Адаптация метаболома хрусталиков проходных и пресноводных рыб к осмотическим нагрузкам

А. В. Калинина

Международный томографический центр, Новосибирск

Рыбы как водные позвоночные вынуждены адаптироваться к осмотической нагрузке среды. Нарушения в механизмах адаптации приводят к различным заболеваниям, например катаракте. Актуальными объектами для исследования в этой области являются представители семейства лососевых. Данное семейство включает в себя пресноводные и проходные виды, что позволяет производить анализ образцов, близких генетически, но принципиально отличающихся по условиям обитания. Кроме того, они часто выращиваются в рыбных хозяйствах. В данной работе впервые применен метаболомный подход к установлению механизмов адаптации хрусталиков проходных и пресноводных рыб семейства лососевых к осмотической нагрузке среды. Методом ЯМР-спектроскопии произведено количественное метаболомное профилирование хрусталиков рыб из следующих групп: пресноводных (чир, сиг, хариус, валек) — река Пясина; проходных — Тихий океан (горбуша) и Охотское и Берингово моря (кета, нерка), а также радужной форели из рыбного хозяйства в НСО.

Метаболом хрусталика форели существенно отличается от остальных. Вероятнее всего, это связано с искусственными условиями содержания рыб, поэтому форель из дальнейшего анализа была исключена. При помощи спутниковых карт определены солености водоемов в местах вылова. Статистический анализ показал, что суммарная концентрация всех метаболитов напрямую коррелирует с концентрацией соли в водоеме. Однако для отдельных осмолитов (определенных в ранних работах лаборатории [1]) данная корреляция не наблюдается. Можно сделать вывод, что необходимая компенсация осмотического давления происходит не только за счет осмолитов хрусталика, но и за счет увеличения концентраций метаболитов в целом. Также было предположено, что главный осмопротектор — NAH, поскольку он являлся основным мажорным метаболитом для всех исследованных видов рыб.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-24-00390.

1. Tsentalovich Y. P., Yanshole V. V., Yanshole L. V. et al. Seasonal Variations and Interspecific Differences in Metabolomes of Freshwater Fish Tissues: Quantitative Metabolomic Profiles of Lenses and Gills // Metabolites. 2019. Vol. 9. P. 264.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Е. А. Зеленцова

УДК 544.478.01

Восстановление активной фазы никелевых катализаторов переноса водорода в среде сверхкритического изопропанола

И. Т. Кандаракова

Новосибирский государственный университет
Институт катализа им Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск

В химической промышленности в реакциях переноса водорода часто применяются катализаторы с активной фазой на основе наночастиц никеля [1]. В Институте катализа предложено использование метода одновременного соосаждения в среде сверхкритического CO_2 солей никеля с золями оксидов (SiO_2, TiO_2) для синтеза наноструктурированных катализаторов [2]. Показано, что в процессе восстановления полученных систем в токе водорода при повышенных температурах в них наблюдается образование наночастиц никеля с размером < 10 нм.

Важным фактором при использовании наноразмерных металлических частиц является их тенденция к окислению на воздухе. Для хранящихся на воздухе металлических катализаторов характерно образование на поверхности частиц металла оксидной пленки, которую перед использованием в реакции необходимо повторно восстановить до металла, например при помощи водорода. При этом некоторые оксиды металлов, например оксид кобальта, в присутствии спиртов в сверхкритическом состоянии способны восстанавливаться [3]. Неясным, однако, остается механизм этого процесса, и до сих пор не сообщалось о прямом наблюдении процесса восстановления Ni-содержащих катализаторов.

В данной работе методом ФМР в режиме *in situ* исследовался процесс начальных стадий формирования активной фазы в СК-изопропаноле NiO и NiO/TiO_2. Также проведено сравнение процессов восстановления NiO/TiO_2 в токе водорода и СК-изопропаноле.

1. Jalama K. Carbon Dioxide Hydrogenation Over Nickel-, Ruthenium-, and Copper-Based Catalysts: Review of Kinetics and Mechanism // Catal. Rev. Sci. Eng. Taylor Francis. 2017. Vol. 59, № 2. P. 95–164.
2. Nesterov N. S., Smirnov A. A., Pakharukova V. P. et al. Advanced Green Approaches for the Synthesis of Nicu-Containing Catalysts for the Hydrodeoxygenation of Anisole // Catal. Today. 2020.
3. Gubin S. P., Buslaeva E. Y. Supercritical Isopropanol as a Reducing Agent for Inorganic Oxides // Russ. J. Phys. Chem. B. 2009. Т. 3, № 8. С. 1172–1186.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук С. С. Якушкин

УДК 537.6

Интегрирование импульсов заданной формы в ЭПР-спектрометр

М. И. Колоколов

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

ЭПР-спектроскопия — один из важных методов исследования в физике, биологии и химии. Важной вехой в развитии метода стало использование импульсных последовательностей, с помощью которых можно получать дополнительную информацию о внутренних взаимодействиях. Последней инновацией в этой области являются импульсы заданной формы, в которых частота и амплитуда — произвольные функции от времени. Главным их преимуществом является большая спектральная ширина (несколько сотен мегагерц). Это решает проблему узкого спектра возбуждения прямоугольного импульса, что позволяет увеличить чувствительность и тем самым ускорить проведение эксперимента. Также с ними возможно проводить абсолютно новые эксперименты, основанные на полном возбуждении спектра.

В данной работе рассматривается введение поддержки импульсов заданной формы в коммерческий ЭПР-спектрометр. Прежде всего рассматриваются условия, накладываемые на используемые нами импульсы, после чего описываются адиабатические импульсы WURST и sech/tanh. Приведено сравнение спектров прямоугольных, WURST и sech/tanh-импульсов для демонстрации преимущества последних. Описана экспериментальная установка, состоящая из генератора импульсов заданной формы, up-конвертора и дигитайзера. В конце приведены результаты T2 и DEER-экспериментов с использованием адиабатических импульсов. Продемонстрировано повышение чувствительности.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук О. А. Крумкачева

УДК 537.6

Развитие методов МРТ-визуализации реакторов каталитического гидрирования с использованием параводорода

Е. С. Кононенко

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Методы магнитно-резонансной томографии (МРТ) могут применяться для operando-исследований гетерогенных каталитических процессов с участием газов. Визуализация пространственного распределения реагентов и продуктов реакции с помощью МРТ дает более детальное понимание эффективности работы гетерогенных реакторов. Несмотря на широкий спектр возможностей, существует ряд сложностей и ограничений при проведении таких экспериментов. В частности, спиновая плотность газов на три порядка ниже, чем в конденсированной фазе, что существенно снижает интенсивность сигнала ЯМР, не позволяя использовать классический подход МРТ. Это ограничение можно преодолеть, применяя методы гиперполяризации, например индуцированную параводородом поляризацию ядер (ИППЯ). В то же время для ИППЯ в сильных полях характерны сигналы антифазного вида. При недостаточном спектральном разрешении положительная и отрицательная части антифазного сигнала могут взаимокомпенсировать друг друга, снижая интенсивность спектра ЯМР. Однако на данный момент в литературе не было подробно описано влияние антифазной намагниченности на получаемые МРТ-изображения.

Целью данной работы является исследование влияния антифазного порядка намагниченности на качество получаемых МРТ-изображений. Для устранения негативного влияния антифазного сигнала в экспериментах МРТ реализована импульсная последовательность, позволяющая переводить антифазные сигналы ИППЯ в синфазные.

В рамках данного исследования показано существенное влияние антифазного порядка намагниченности на МРТ-изображения, а также разработана импульсная последовательность по переводу антифазной намагниченности ($2\hat{I}_{1Z}\hat{I}_{2Z}$) в синфазную ($\hat{I}_{1Z}+\hat{I}_{2Z}$). Использование этой импульсной последовательности позволило более чем в 2 раза повысить отношение сигнал/шум в двумерных МРТ-изображениях гиперполяризованного пропана, полученного в процессе гидрирования пропилена параводородом с применением гетерогенного катализатора Rh/TiO_2. Также наш подход позволил визуализировать положение каталитически активных гранул в модельном реакторе на трехмерном МРТ-изображении, что имеет большое значение для дальнейшего исследования реальных реакторов.

Научный руководитель — д-р хим. наук, проф. И. В. Коптюг

УДК 543.4

Исследование свойств гидрогелей на основе желатина методом спектроскопии рассеяния Мандельштама – Бриллюэна

А. В. Лактионова

Новосибирский государственный университет

Ксеногенные коллагенсодержащие ткани являются распространенным материалом, применяемым в кардиохирургии в качестве биоимплантов. Важным параметром ткани при трансплантации является модуль упругости, характеризующий ее механические свойства. Спектроскопия рассеяния Мандельштама — Бриллюэна (РМБ), бесконтактная неинвазивная методика, позволяет получать информацию об упругих характеристиках материала (скорости звука и упругом модуле) в гигагерцовом частотном диапазоне. Указанная методика хорошо зарекомендовала себя при исследовании различных биологических объектов, однако ранее не была применена для исследования кардиоимплантов.

Биологические ткани являются сложным многокомпонентным объектом и в ходе различных исследований часто заменяются модельными системами, обладающими схожими свойствами. При моделировании коллагенсодержащих тканей часто используются гидрогели на основе желатина, который представляет собой продукт денатурации коллагена.

Настоящая работа посвящена изучению возможностей РМБ для исследования модельных гидрогелей на основе желатина. Свойства гидрогелей сильно зависят от содержания воды в образце. Для разработки протокола исследования и анализа влияния степени гидратации материала на его свойства приготовлены гидрогелевые пленки с различным содержанием воды. Варьирование водной составляющей осуществлялось путем изменения влажности окружающего воздуха.

Из анализа спектров РМБ следует, что даже небольшое изменение влажности приводит к существенным изменениям степени гидратации гидрогелей, что отражается в значениях скорости звука и упругого модуля исследуемых образцов. Таким образом, контроль за влажностью воздуха является важным моментом, который необходимо учитывать при измерениях.

При изменении содержания водной компоненты от полностью гидратированного образца до дегидратированного наблюдается увеличение скорости звука в гидрогеле более чем в два раза. Зависимость скорости звука от степени гидратации может быть описана в рамках двухфазной модели, включающей в себя водную компоненты и компоненту желатина.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. А. Зыкова

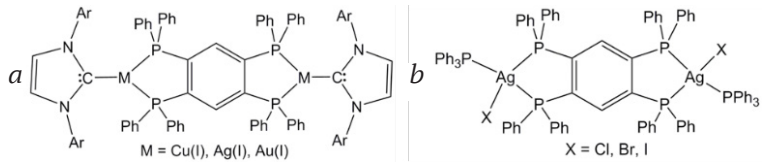
УДК 544.1

Исследование электронной структуры диядерных комплексов монетных металлов (Cu(I), Ag(I), Au(I)) с тетрафосфановым мостиковым лигандом

И. М. Одуд

Новосибирский государственный университет
Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Хотя OLED-технологии уже успешно используются, актуальным остается поиск новых эффективных и высокостабильных органических и металлорганических люминофоров. В группе д-ра хим. наук А. В. Артемьева (ИНХ СО РАН) недавно синтезированы две серии симметричных диядерных комплексов с одинаковым бис-бидентантным мостиковым лигандом, но разными терминальными лигандами (см. рисунок). Симметричные биядерные комплексы синтезированы, исходя из модели Давыдова, предполагающей, что дипольные моменты электронных переходов в таких системах будут складываться, приводя к существенному увеличению силы осциллятора (вплоть до 4 раз) и, следовательно, к такому же росту константы скорости излучательного перехода, что должно привести к росту квантового выхода флуоресценции [1].



Электронная структура комплексов рассчитана методом теории функционала плотности (ТФП) и проанализирована с использованием квантовой теории атомов в молекулах (QTAIM) и теории NBO. На основании расчетов и проведенного анализа установлено, что координационные связи M-C и M-P являются частично ковалентными. Для всех комплексов с терминальными карбеновыми лигандами (см. рисунок, *a*) энергия связи M-C заметно выше, чем M-P; например, для комплекса Cu(I) ~ 135 и ~ 80 ккал/моль соответственно. Основной вклад в энергию связей вносит взаимодействие пары электронов атома C карбена или неподеленной пары атома P с незаполненной (n+1)s-AO металла, которое приводит к переносу электронной плотности от донора к акцептору (металлу).

Методом зависящей от времени ТФП рассчитаны электронные спектры поглощения всех диядерных комплексов, которые находятся в прекрасном согласии с экспериментом, а также их моноядерных фрагментов. Установлено, что не наблюдается 4-кратного увеличения силы осциллятора длинноволновых переходов, оно составляет ~ 1,9 раза для комплексов типа *a* и ~ 2,7 для *b*.

1. Schinabeck A. et al. Symmetry-Based Design Strategy for Unprecedentedly Fast Decaying Thermally Activated Delayed Fluorescence (TADF). Application to Dinuclear Cu(I) Compounds // Chem. Mater. 2019. Т. 31, № 12. С. 4392–4404.

Научные руководители —
д-р хим. наук, проф. Н. П. Грицан, канд. физ.-мат. наук Д. Е. Горбунов

УДК 543.4

Исследование накопления дейтерированной стеариновой кислоты в эмбрионах мышей методом комбинационного рассеяния

А. Н. Омельченко

Новосибирский государственный университет

Криоконсервация — метод сохранения биологических объектов в результате их охлаждения до низких температур, при которых останавливаются все биологические процессы. Однако замораживание и последующий отогрев приводят к повреждению клеточных структур и нарушениям в клеточном метаболизме. Нарушения липидного обмена (транспорт, накопление и переработка жирных кислот) можно отслеживать методами спектроскопии.

Данная работа посвящена исследованию накопления насыщенных жирных кислот в эмбрионах мыши, выживших после криоконсервации. Для этого первые 20 ч после криоконсервации эмбрионы культивировались в присутствии дейтерированной стеариновой кислоты. Эмбрионы мыши подготовлены сотрудниками сектора криоконсервации и репродуктивных технологий ИЦиГ СО РАН. Для определения эффективности поглощения жирных кислот использовался метод комбинационного рассеяния света (КРС).

В ходе работы получены спектры КРС от эмбрионов мышей контрольной группы и групп, переживших криоконсервацию по протоколам программного замораживания и витрификации. Выделены спектры липидов в составе эмбрионов мышей и сделана оценка уровня накопления дейтерированных соединений. Показано, что в контрольной группе новые, дейтерированные липиды составляют примерно 13 % от общего состава. Для эмбрионов, перенесших криоконсервацию по протоколу программного замораживания, доля новых липидов оказалась в среднем в 1,5 раза больше, а для эмбрионов после витрификации — в 1,3 раза. Обнаружено, что наиболее сильный эффект наблюдается для эмбрионов, развившихся за сутки до стадии морулы. При этом для 4-клеточных эмбрионов такой эффект не наблюдался.

Таким образом, в работе показано, что криоконсервация оказывает значительный эффект на липидный обмен веществ. Предложенный в работе подход по характеризации обмена веществ в клетках с помощью КРС-соединений, меченых стабильными изотопами, может быть применен для изучения разных аспектов клеточного обмена веществ.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-74-10108.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук К. А. Окотруб

УДК 577.34

Восстановленный никотинамидадениндинуклеотид – естественный УФ-фильтр хрусталика птиц

Н. А. Осик

Новосибирский государственный университет
Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск

Важнейшими функциями хрусталика глаза человека являются фокусировка света на сетчатке и поглощение УФА-излучения. Последнее обеспечено высоким содержанием молекулярных УФ-фильтров: кинуренина и его производных. Поглощая ультрафиолет, данные метаболиты защищают ткань сетчатки от фотоиндуцированных повреждений, а также в значительной степени снижают хроматические аберрации. Таким образом, УФ-фильтры в хрусталике напрямую влияют на остроту зрения. На данный момент такие соединения обнаружены только в хрусталиках человека, некоторых приматов и белок. Большой интерес вызывает метаболомный состав хрусталика хищных птиц, отличающихся особо острым зрением. Однако по метаболомике животных крайне мало данных в литературе.

Целью данной работы является установление особенностей метаболома хрусталиков птиц, ответственных за остроту зрения. Методом ^{1}H ЯМР-спектроскопии проведено количественное метаболомное профилирование хрусталиков 11 различных видов птиц, включая водоплавающих (чайковые, поганковые) и хищных (ястребиные, сорокопут). Обнаружено, что в хрусталиках черного коршуна и поганковых птиц содержится необычно высокая концентрация кофермента НАД-Н. Метаболит эффективно поглощает УФА-излучение, в результате фотовозбуждения не образует реакционно-активных интермедиатов и является крайне фотостабильным. Анализ оптического поглощения метаболомного экстракта хрусталика коршуна показал, что поглощение УФА-излучения в хрусталике обеспечено присутствием НАД-Н.

Таким образом, в работе впервые установлено, что НАД-Н является эффективным естественным УФ-фильтром хрусталика птиц. Присутствие УФ-фильтра в хрусталике можно однозначно связать со снижением хроматических аберраций и повышением качества зрения птиц.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-23-00021.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Е. А. Зеленцова

УДК 539.2

Исследование структурной подвижности металлорганического каркаса UiO-66 (Zr) в присутствии гостевых молекул методом ^{2}H ЯМР-спектроскопии

М. С. Плеханов

Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Металлорганические каркасы (МОК) — это активно изучаемый класс соединений, состоящих из металлических центров, соединенных между собой органическими линкерами. Данные соединения имеют множество перспективных областей применения, таких как катализ, адсорбция, разделение смесей веществ и доставка лекарственных препаратов.

Одним из самых перспективных для применения МОК является UiO-66 (Zr) в силу своей высокой химической и термической стабильности, а также способности к разделению линейных и разветвленных углеводородов. Пространственная структура UiO-66 (Zr) представляет из себя трехмерную систему пор, соединенных узкими окнами (d ~ 6 Å) из органических линкеров. Вращательная подвижность терефталевых линкеров способна изменять эффективный размер окна, таким образом влияя на скорость диффузии гостевых молекул внутри каркаса.

UiO-66 (Zr) может находиться в двух формах: гидроксилированной и дегидроксилированной в зависимости от условий активации. На данный момент обнаружено, что форма каркаса может влиять на диффузию гостевых молекул через МОК. Однако механизм подобного влияния остается не изученным. Одним из возможных объяснений является влияние формы каркаса на динамику вращения линкеров, что, в свою очередь, может влиять на процесс перехода гостевых молекул через окно между полостями.

В данной работе подготовлены образцы UiO-66 (Zr) в двух различных формах. Линкеры каркаса дейтерированы для отслеживания их динамики вращения с помощью ^{2}H ЯМР. Из моделирования записанных спектров получена температурная зависимость скорости вращения линкеров. Проведено сравнение структурной подвижности материала в отсутствие гостевых молекул и при насыщении изобутаном.

В результате работы показано, что в гидроксилированной форме энергетический барьер для вращения линкеров меньше, чем в дегидроксилированной на 17 кДж/моль. В то же время в присутствии гостевых молекул изобутана различие в величине барьеров уменьшилось до 3 кДж/моль.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. И. Колоколов

УДК 539.2

Исследование самоассоциатов макромолекул полисахаридов в водных растворах методом динамического светорассеяния

А. А. Пудова [1,2], М. В. Зеликман [2]

[1] Новосибирский государственный университет
[2] Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск

Декстраны и арабиногалактан (АГ) относятся к классу природных полисахаридов и используются в различных областях промышленности. Декстраны с молекулярной массой 10, 40 и 70 кДа представляют собой гидрофильные полисахариды, характеризующиеся хорошей растворимостью в воде и низкой токсичностью. В литературе описано большое количество примеров, в которых декстраны являются конъюгатами с различными ЛС [1]. Арабиногалактаны — это класс полисахаридов, присутствующий в большом количестве растений. Разветвленное строение АГ, отличающее его от уже используемых в фармацевтике полисахаридов, позволило применить АГ в качестве молекулы «хозяина» для лекарственных средств и создания комплексов-включений на его основе [1].

Цель нашей работы заключается в изучении молекулярных механизмов образования супрамолекулярных систем полисахаридов с липофильными молекулами лекарственных веществ (ЛВ) в водных растворах, которые можно использовать в качестве системы их «доставки». Включение молекул ЛВ в такие комплексы позволяет увеличить водорастворимость и биодоступность и многократно снизить действующие дозировки и токсические эффекты [2]. В первичных моделях межмолекулярных комплексов исследован эффект самоассоциации в водных растворах указанных полисахаридов.

Характеристики растворов полисахаридов исследованы в воде и растворах $LiNO_3$ при различных температурах и концентрациях методом динамического светорассеяния. Во всех случаях показана значительная степень самоассоциации в единицах изменений их молекулярных масс (кДа) и зависимость этих характеристик от указанных условий.

1. Хвостов М. В. и др. Применение природных полисахаридов в фармацевтике // Биоорган. химия. 2019. Т. 45, № 6. С. 563–575.
2. Душкин А. В. и др. Супрамолекулярные системы доставки лекарственных молекул на основе растительных метаболитов. Физико-химические, фармакологические свойства и особенности механохимического получения // Химия в интересах устойчивого развития. 2019. № 3. С. 133–244.

Научный руководитель — д-р хим. наук, проф. А. В. Душкин

УДК 539.196.5

Измерение энергии ван-дер-ваальсовых комплексов кислорода с ксеноном с использованием техники визуализации карт скоростей фотофрагментов

В. М. Роговешко

Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Фотохимия кислорода — актуальная сфера исследований, так как фотопроцессы в молекулярном кислороде являются ключевыми в процессах фотоокисления, протекающих в природе. Фотохимия атмосферы определяется поглощением молекулы кислорода в полосе Герцберга, однако соответствующие переходы в молекуле обладают крайне малыми сечениями поглощения, т. е. они являются запрещенными. При этом известно, что наличие слабосвязанного окружения кислорода в газе приводит к резкому увеличению сечений поглощения этих переходов вплоть до того, что переходы становятся разрешенными. В частности, это наблюдается у слабосвязанных комплексов кислорода с ксеноном [1].

Актуальность данной работы также связана с изучением этой системы с активным практическим применением. Известно, что ксенон обладает анестезирующим воздействием на человека. Есть предположение, что это происходит из-за того, что ксенон образует с кислородом, распространенным в нашей атмосфере, устойчивые комплексы.

Данная работа посвящена изучению комплексов кислорода с ксеноном в холодном молекулярном пучке. Образование комплексов кислорода с ксеноном подтвердилось существенным увеличением сигнала от ионов кислорода после добавления ксенона в газовую смесь к кислороду. С помощью техники визуализации карт скоростей получено распределение фотофрагментов по энергиям, а также анизотропия их разлета из молекулы кислорода. Сдвиг по энергии и углам фотофрагментов, образованных из комплекса кислорода с ксеноном, по отношению к энергии и углам фрагментов фотодиссоциации молекулы O_2 позволил извлечь энергию связи кислорода с ксеноном в комплексе.

1. Baklanov A. V., Bogdanchikov G. A., Vidma K. V. et al. Cluster-enhanced X-O_2 photochemistry (X = CH_3I, C_3H_6, C_6H_{12}, and Xe) // J. Chem. Phys. 2007. Vol. 126. P. 124316.

Научные руководители —
д-р хим. наук, проф. А. В. Бакланов, канд. физ.-мат. наук А. С. Богомолов

УДК 544.431.1

Исследование термического разложения фуроксана и его производных с помощью квантово-химических расчетов

А. Р. Садыков

Новосибирский государственный университет
Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Гетероциклы с высоким содержанием азота — перспективные «зеленые» энергетические соединения, так как при термическом разложении высвобождают большое количество экологически безвредного молекулярного азота. Информация о кинетике и механизме термического разложения важна для решения проблем безопасного хранения и транспортировки энергетических соединений. Ввиду естественных экспериментальных трудностей, связанных с высокоэнергетической природой исследуемых соединений, современные количественные квантово-химические расчеты являются важным источником информации о переходных состояниях и константах скорости элементарных реакций разложения.

Данная работа посвящена исследованию термического разложения фуроксана (1,2,5-оксидиазол-N-оксида) и его производных: метилфуроксана, метилнитрофуроксана и 4,4’-динитро-3,3’-диазенофуроксана (DDF). В работе использовались два подхода. Для реагентов, интермедиатов и переходных состояний, волновая функция которых хорошо описывается одним детерминантом, геометрия оптимизирована с помощью теории функционала плотности (M06-2X). Далее энергия всех найденных точек уточнялась с помощью высокоточных квантово-механических расчетов CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12 и DLPNO-CCSD(T)/aug-cc-pVQZ. Для исследования стационарных точек на поверхности потенциальной энергии с существенным бирадикальным характером (многодетерминантной волновой функций) использовались многоконфигурационные методы: CASSCF с различными активными пространствами для оптимизации геометрии с последующим уточнением энергии более высокоуровневыми методами (CASPT2, NEVPT2, MRCI и т. д.). Наиболее простое соединение, фуроксан, использовано в качестве тестовой системы для сравнения всех расчетных подходов.

Для фуроксана и его метил-производного рассмотрено два канала: концертный разрыв кольца и разрыв C-C-связи через транс-изомер открытой формы, барьеры этих реакций требуют уточнения с помощью многоконфигурационных методов. Для метилнитрофуроксана нитро-нитритная перегруппировка имеет барьер ~ 58 ккал/моль, а безбарьерный отрыв NO_2 группы — энтальпию ~ 68 ккал/моль. Термическое разложение динитродиазенофуроксана происходит через 3 близких по энергетике конкурирующих радикальных и молекулярных канала с эффективным барьером ~ 55 ккал/моль.

Научные руководители —
канд. физ.-мат. наук В. Г. Киселев, канд. физ.-мат. наук Д. Е. Горбунов

УДК 532.785

Кристаллизация парамагнитных соединений в градиентом магнитном поле сверхпроводящего магнита

А. А. Самсоненко

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Сила воздействия магнитного поля на вещества может в какой-то степени компенсировать гравитационную силу. Наиболее известным примером левитации в магнитном поле, вероятно, является левитация лягушки [1]. В отличие от диамагнитных веществ, левитация парамагнитных соединений невозможна по фундаментальным причинам [2]. Несмотря на то что в случае парамагнитных соединений полная компенсация гравитационной силы невозможна, остаточное «эффективное» ускорение свободного падения может быть значительно уменьшено, что позволяет улучшить качество получаемых кристаллов. Другим преимуществом кристаллизации в градиентом магнитном поле является разная величина силы магнитного поля, действующего на кристаллы разных парамагнитных соединений, и, как следствие, возможность пространственного разделения этих соединений внутри магнита.

В настоящей работе детально охарактеризован профиль поля ЯМР-магнита с протонной частотой 300 МГц, а также рассчитана магнитная сила, действующая на образцы с различной магнитной проницаемостью. Получена оценка величины магнитного поля, необходимого для достижения частичной компенсации гравитационной силы ряда веществ. Описана экспериментальная установка, созданная для проведения кристаллизации в магнитном поле ЯМР-магнита. Целью работы является демонстрация особенностей кристаллизации парамагнитных соединений в градиентом магнитном поле на примере кристаллов медного купороса в качестве модельной системы. Обсуждаются преимущества данного метода кристаллизации.

1. Simon M. D., Geim A. K. Diamagnetic Levitation: Flying Frogs and Floating Magnets // J. Appl. Phys. 2000. Vol. 87. P. 6200–6204.
2. Palagummi S., Yuan F.-G. Magnetic Levitation and Its Application For Low Frequency Vibration Energy Harvesting // Struct. Health Monit. (SHM) Aerospace Struct. 2016. P. 213–251.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук С. Л. Вебер

УДК 544.022.533

Исследование диффузии фосфолипидных бислоев методом восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания

К. П. Сараева

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск

Восстановление флюоресценции после фотообесцвечивания (FRAP) — стандартная методика диффузиометрии, основанная на анализе изменения градиента концентрации флюоресцентных молекул во времени, широко использующаяся в различных биофизических задачах для определения коэффициентов диффузии на микрометровом масштабе. Наличие дефектов и неоднородностей на различных масштабах образца, сопутствующие химические реакции влияют на диффузионный перенос [1, 2]. На данный момент разработаны различные варианты численных методов FRAP-эксперимента, учитывающие особенности диффузии в материалах [3, 4].

Реальные биологические мембраны — высокодинамические структуры, текучесть которых является важной характеристикой. Так, наличие эффектов, связанных с вязкостью, влияет на слияние биомембран, что связано с обменом веществ в клетках, а также на движение липидных рафтов, которые участвуют в передаче клеточных сигналов [5]. Метод FRAP широко применяется в исследовании текучести фосфолипидных мембран [6].

Цель данной работы — постановка методики FRAP-эксперимента и последующее определение температурной зависимости коэффициента диффузии в однокомпонентных мембранах DPPC и DOPC с использованием флюоресцентных меток (Rhodamine B).

В ходе работы исследованы различные численные модели для оценки параметров в эксперименте обесцвечивания области гауссовым лазерным пучком: с помощью стандартной кривой восстановления интенсивности [7], аппроксимация временной эволюции концентрации точным решением уравнения диффузии для начального условия гауссового распределения интенсивности, оценка параметров на основе численного решения уравнения диффузии.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-12-00127.

1. Lorén N., Hermansson A.-M., Nydén M. Determination of Local Diffusion Properties in Heterogeneous Biomaterials // Adv. Colloid Interface Sci. 2009. Vol. 150 (1). P. 5–15.
2. Sprague B. L., McNally J. G. FRAP Analysis of Binding: Proper and Fitting // Trends Cell Biol. 2005. Vol. 15 (2). P. 84–91.
3. Röding M. et al. A Highly Accurate Pixel-Based FRAP Model Based on Spectral-Domain Numerical Methods // Biophys. J. 2019. Vol. 116 (7). P. 1348–1361.

4. Jonasson J. K. et al. A Pixel-Based Likelihood Framework for Analysis of Fluorescence Recovery after Photobleaching Data // J. Microsc. 2008. Vol. 232 (2). P. 260–269.
5. Sanders D. et al. Calcium at the Crossroads of Signaling // Plant Cell. 2002. Vol. 14. P. S401–S417.
6. Zhang Y. et al. Effect of Cholesterol on the Fluidity of Supported Lipid Bilayers // Colloids Surf., B: Biointerfaces. 2020. Vol. 196. P. 111353.
7. Axelrod D. et al. Mobility Measurement by Analysis of Fluorescence Photobleaching Recovery Kinetics // Biophys. J. 1976. Vol. 16 (9). P. 1055–1069.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук К. А. Окотруб

УДК 536.4

Исследование влияния добавок антипиренов на горение и термическое разложение армированной стекловолокном эпоксидной смолы

Е. А. Соснин

Новосибирский государственный университет

Горючесть различных материалов, используемых в промышленности, является важной проблемой в современном мире. Данная работа посвящена исследованию влияния антипиренов (графен и DOPO-THPO) на горючесть эпоксидной смолы, армированной стекловолокном.

Для проведения исследования использовались образцы с добавлением графена (0–4 %), DOPO-THPO (0–4 %) и их комбинациями. Для этого проведены тесты кислородного индекса, термогравиметрический анализ для получения кинетических параметров и эксперименты с вертикальным горением пластин образцов под действием горелки бунзена, в ходе которого фиксировалась убыль массы образцов. Температура поверхности образца измерялась с помощью инфракрасной камеры, а температура в пламени — с помощью тонкой Pt-PtRh10 % термопары. Проведено связанное моделирование распространения пламени по образцу стеклопластика под действием горелки бунзена в программе FDS 6.7.7 с использованием математической модели для турбулентного пламени LES (*Large eddy simulation*). Данные термогравиметрического анализа не выявляли явного влияния антипиренов на горючесть армированной стекловолокном эпоксидной смолы в конденсированной фазе. В тестах горения под пламенем горелки бунзена все исследованные составы антипиренов показали тенденцию к снижению горючести стеклопластика. При этом лучше всего себя проявил образец, в составе которого 1 % графена + 3 % DOPO-THPO, так как он имел наименьшую скорость потери массы и относительно низкую температуру в пламени.

Таким образом, наблюдается синергизм действия графена и DOPO-THPO. Графен улучшает термическую стабильность поверхности полимера, а DOPO-THPO ингибирует химические реакции в газовой фазе. Также отмечен ингибирующий эффект антипирена для образца, в составе которого 2 % DOPO-THPO, даже больший, чем 4 % DOPO-THPO. Он также имеет низкую температуру в пламени и сравнимую с предыдущим образцом скорость распространения пламени, однако значительно быстрее теряет массу в процессе горения. На основе полученных данных сделан вывод, что DOPO-THPO является подходящим антипиреном для стеклопластика, а добавка графена приводит к синергетическому эффекту на горючесть стеклопластика.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 20-19-00295.

Научный руководитель — С. А. Трубачев

УДК 539.2

Каналы диссоциации при диссоциативном захвате электронов одорантами класса мальтолов

М. М. Таюпов

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа

Современный вариант оригинальной вибрационной теории механизма обоняния, предложенный Люкой Турином [1], подразумевает перенос электрона на рецептор, что приводит к изменению его конформации и дальнейшему распространению запахового сигнала посредством активации G-протеина. Ранее нами было показано, что данный механизм очень схож с процессами, происходящими при диссоциативном захвате электрона [2, 3].

В представленной работе данный подход применен к молекулам одорантов класса мальтолов: мальтолу и этил мальтолу. Это белые порошкообразные вещества с ярким запахом карамелизированного сахара и леденцов. Причем в этил мальтоле при замене метильного заместителя на этил, в сравнении с обычным мальтолом, этот запах усиливается в 4–6 раз [4].

Как показали исследования методом масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов, в диапазоне энергий электронов 0–4 э, который рассматривается как основной в рамках вибрационной теории [1], данные вещества претерпевают большое количество диссоциативных распадов. Самые интересные из них связаны с отрывом метильного и этильного «хвостов» молекул. Также можно отметить, что в обоих веществах интенсивно происходит отрыв при низких энергиях водородов при разрыве O-H связей в молекулах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90013.

1. Turin L. A Spectroscopic Mechanism for Primary Olfactory Reception // Chem. Senses. 1996. Vol. 21 (6). P. 773–791.
2. Таюпов М. М., Рахмеев Р. Г., Асфандиаров Н. Л., Пшеничнюк С. А. Определение сродства к электрону на основе экспериментально измеренных времен жизни отрицательных молекулярных ионов производных кумарина // Мат. физика и компьют. моделирование. 2020. Т. 23, № 3. С. 45–59.
3. Pshenichnyuk S. A., Rakhmeyev R. G., Asfandiarov N. L. et al. Can the Electron-Accepting Properties of Odorants Be Involved in Their Recognition by the Olfactory System? // J. Phys. Chem. Lett. 2018. Vol. 9. P. 2320.
4. Park S. M. Determining Potency of Odorants: Concentration-Detection Functions and Recognition Point of Fragrance Chemicals. UC San Diego, 2012.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук С. А. Пшеничнюк

УДК 536.461

Изучение химии образования катионов в пламени этилена: эксперимент и численное моделирование

А. В. Черепанов

Новосибирский государственный университет
Институт химической кинетики и горения
им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Пламя представляет собой слабо ионизированную плазму. Понимание химии превращения ионов в пламени имеет решающее значение для развития новых методов диагностики, а также для разработки ионно-чувствительных технологий для управления процессами горения. В этой работе методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии измерено пространственное распределение положительных ионов (катионная структура) в пламени предварительно перемешанной смеси этилен/кислород/аргон в широком диапазоне коэффициентов избытка горючего $\phi = 0{,}4 \div 1{,}5$, стабилизированного на плоской горелке при атмосферном давлении. Проведены численные расчеты катионной структуры этих пламен с применением программного обеспечения Cantera (v.2.5.1) [1]. Для расчетов использован детальный кинетический механизм, включающий реакции с участием заряженных частиц, построенный на основе доступных в литературе моделей и дополненный реакциями для катиона $C_3H_5^+$. На основе сопоставления данных эксперимента и моделирования установлено, что механизм корректно описывает относительное содержание ключевых кислородсодержащих катионов (CH_5O^+, $C_2H_3O^+$) в пламенах, а также катиона $C_3H_5^+$, обнаруженного экспериментально в богатом пламени ($\phi = 1{,}5$), но значительно недооценивает относительную мольную долю катиона $C_3H_3^+$, который является ключевым в богатых пламенах. Кроме того, в богатом пламени ($\phi = 1{,}5$) идентифицировано несколько ароматических и циклических катионов с общей формулой C_xH_y. Полученные данные послужат основой для дальнейшего усовершенствования механизма превращения ионов в богатых пламенах углеводородов.

1. Goodwin D. G., Speth R. L., Moffat H. K., Weber B. W. Cantera: An Object-Oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes // Computer Sci. 2016.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. А. Князьков

УДК 544.022.533, 543.424.2

Исследование влияния гидратации и температуры на фазовое разделение планарных структур DOPC/DPPC/Cholesterol методом микроспектроскопии КРС

Д. В. Шамаева

Новосибирский государственный университет
Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск

Клеточная мембрана имеет сложный химический состав и представляет собой двойной фосфолипидный бислой со вставками белковых молекул. Синтетические многокомпонентные фосфолипидные бислои широко применяются для изучения физико-химических свойств биологических мембран. В клеточных мембранах могут формироваться липидные рафты — области с разным химическим составом и разной упорядоченностью фосфолипидных молекул, соответствующие разным фазовым состояниям бислоя. Расположение и состав рафтов определяют свойства мембраны и играют важную роль, например, в процессе межклеточной сигнализации. Поэтому исследование физико-химических свойств многокомпонентных бислоев и развитие новых подходов для их изучения является актуальной задачей.

Одним из малораспространенных подходов для изучения многокомпонентных бислоев является спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС). Спектроскопия КРС позволяет проводить бесконтактные измерения и изучать состав и конформационное состояние липидов на микронном масштабе. Цель данной работы — изучение фазового разделения многослойных пленок DOPC (1,2-диолеоил-sn-глицеро-3-фосфохолин)/$DPPC_{d62}$ (1,2-дипальмитоил-sn-глицеро-3-фосфохолин с дейтерированными углеводородными цепочками)/Chol (холестерин) методом КРС.

В работе методом осаждения однослойных везикул получены пленки DOPC/DPPC/Chol толщиной 10–100 бислоев. Методом картирования КРС получены спектры сосуществующих доменов и исследовано влияние влажности температуры и химического состава смеси на состав сосуществующих доменов.

Показано, что состав сосуществующих фаз зависит от влажности и температуры. Для образцов, гидратированных в парах 100 % относительной влажности, фазовый состав доменов согласуется с данными ЯМР, полученными на многослойных везикулах. При высыхании наблюдается разделение на домены с высокой концентраций DPPCd62 и смесью DOPC/Chol. Как для сухих, так и для гидратированных доменов наблюдается различие в конформационном упорядочении DPPCd62. При понижении до 0 и –35 °C также наблюдается разделение на фазы. Конформационное упорядочение липидов в обеих фазах различается при охлаждении и высыхании.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-74-10108.

Научный руководитель — канд. физ. мат. наук К. А. Окотруб

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ, АСТРОФИЗИКА И КОСМОЛОГИЯ

Председатель секции — канд. физ.-мат. наук *А. Ю. Гармаш*

Ответственный секретарь секции — *Т. В. Мальцев*

Экспертный совет секции

д-р физ.-мат. наук *М. Н. Ачасов*
канд. физ.-мат. наук *А. Ю. Гармаш*
канд. физ.-мат. наук *Е. А. Кравченко*
д-р физ.-мат. наук *И. Б. Логашенко*
канд. физ.-мат. наук *А. В. Резниченко*
д-р физ.-мат. наук *К. Ю. Тодышев*

ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS, ASTROPHYSICS AND COSMOLOGY

Section head — Cand. Phys.-Math. Sci. *A. Yu. Garmash*

Section responsible secretary — *T. V. Maltsev*

Section scientific committee

Dr Phys.-Math. Sci. *M. N. Achasov*
Cand. Phys.-Math. Sci. *A. Yu. Garmash*
Cand. Phys.-Math. Sci. *E. A. Kravchenko*
Dr Phys.-Math. Sci. *I. B. Logashenko*
Cand. Phys.-Math. Sci. *A. V. Reznichenko*
Dr Phys.-Math. Sci. *C. Yu. Todyshev*

УДК 539.1

Регистрация процесса электрон-позитронной аннигиляции в мюон и антимюон с детектором КМД-3 на коллайдере ВЭПП-2000 в интервале энергий от 1 до 2 ГэВ

В. А. Бочко

Новосибирский государственный университет

Задача детектора КМД-3 на коллайдере ВЭПП-2000 — изучение физики легких мезонов, а также прецизионное измерение сечений аннигиляции электрон-позитронной пары в адроны. Значения этих сечений важны при измерении аномального магнитного момента мюона. Сечение электрон-позитронной аннигиляции в пион и антипион, измеренное на детекторе КМД-3, получается вычитанием из общего сечения образования пары мюонов и пионов сечения образования мюонов, которое точно вычисляется в рамках квантовой электродинамики. Использование данного метода влечет увеличивающиеся статистические ошибки сечения при увеличении энергии пучка. Недавно включенная в анализ мюонная система детектора позволит разделять процессы аннигиляции в пару мюонов и пионов, что даст возможность измерять сечение аннигиляции в пионы с большей точностью при повышении энергии пучка. Сравнение измеренного сечения аннигиляции в мюоны с теоретическим позволит убедиться в правильности работы системы.

В работе исследуются параметры мюонной системы, такие как оптимальный телесный угол, доля мюонов, достигших счетчика в зависимости от энергии пучка. Моделируются сигнальные и фоновые процессы. В качестве фоновых процессов рассматриваются: Bhabha-рассеяние, аннигиляция в пару противоположно заряженных пионов и каонов. Разрабатываются критерии отбора сигнального процесса. Моделируется мюонная система. Изучается эффективность регистрации сигнального процесса. Разрабатывается процедура разделения мюонов и пионов. Измеряется сечение электрон-позитронной аннигиляции в мюон-антимюонную пару в интервале энергий от 1 до 2 ГэВ на детекторе КМД-3. Производится оценка систематических неопределенностей измерения сечения.

Научный руководитель — А. А. Коробов

УДК 523.4-852

Численное моделирование поглощения линии Hα атмосферой горячего Юпитера Wasp-52b

Е. С. Ветрова, С. С. Шарипов

Новосибирский государственный технический университет

В данной работе представлены результаты численного моделирования поглощения линии Hα при транзитных наблюдениях в трехмерной геометрии для экзопланеты Wasp-52b. Для расчетов и интерпретации наблюдений была написана численная Монте-Карло модель для переноса Lyα фотонов [1].

В решаемой задаче атмосфера рассматривалась сферически симметричной с изначально заданными распределениями объемной плотности атомов водорода и температуры. Начальные параметры рассчитывались с помощью трехмерной многожидкостной газодинамической модели [2].

В результате численного моделирования была получена линия поглощения Hα атмосферой горячего Юпитера Wasp-52b. Исходя из этого был сделан вывод, что для данной планеты основной вклад в возбуждение атомов водорода на второй энергетический уровень вносит излучение звезды и совсем небольшой — столкновительные и рекомбинационные процессы внутри атмосферы.

1. Мирошниченко И. Б. Влияние Lyα излучения родительской звезды на поглощение в линии Hα атмосфер горячих Юпитеров HD 189733b и HD 209458b // Астроном. журн. 2021. № 1. С. 66–74.

2. Shaikhislamov I. F. et al. 3D Aeronomy modelling of close-in exoplanets // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2018. Т. 481, № 4. С. 5315–5323.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук И. Б. Мирошниченко

УДК 539.12

Радиационные поправки к фотон-фотонному рассеянию при низких энергиях

М. М. Галактионов

Новосибирский государственный университет

В рамках квантовой электродинамики два фотона могут столкнуться друг с другом и рассеяться. Но этот процесс идет не напрямую: 2 начальных фотона рождают виртуальную электрон-позитронную пару, потом она аннигилирует в 2 конечных фотона. В процессе могут образоваться виртуальные фотоны или дополнительные электрон-позитронные пары, которые будут вносить свой некоторый вклад в процесс рассеяния. Поэтому диаграмма Фейнмана, моделирующая протекающий физический процесс, будет сложнее (иметь дополнительные петли) и иметь много вариаций, в связи с чем расчет амплитуды вероятности этого процесса будет более трудоемким. Цель работы — вычисление первых двух радиационных поправок к фотон-фотонному рассеянию. Для достижения этой цели используется система компьютерной алгебры общего назначения REDUCE.

Рассматривается рассеяние фотонов низких энергий (соответственно с малыми импульсами). В этом случае можно разлагать в ряд Тейлора по импульсам внешних фотонов и оставлять только первый ненулевой член этого разложения. В однопетлевом и двухпетлевом приближениях известны явные формулы для интегралов по петлевым импульсам, которые встречаются в этом процессе. В трехпетлевом случае ситуация сложнее. Все нужные трехпетлевые интегралы делятся на 2 семейства. Используя метод интегрирования по частям, можно свести все интегралы из первого семейства к 2 мастер-интегралам; для них известны явные формулы. В случае второго семейства вдобавок к этим 2 мастер-интегралам появляется еще третий; для него известно некоторое конечное число членов разложения по (ϵ). Каждая отдельная диаграмма приводит к расходящемуся петлевому интегралу, поэтому используется размерная регуляризация, что делает его конечным. После суммирования по всем диаграммам можно перейти к пределу снятия регуляризации ($\epsilon \to 0; d \to 4$), суммарная амплитуда вероятности рассеяния конечна. В двух-/трехпетлевых приближениях надо произвести перенормировку заряда и волновых функций внешних фотонов. Только после этого можно переходить к пределу $(\epsilon \to 0)$.

На сегодняшний день еще никто не рассчитывал радиационные поправки к фотон-фотонному рассеянию в трехпетлевом приближении, поэтому результат может быть довольно полезным в областях, где рассчитывается фотон-фотонное рассеяние.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук А. Г. Грозин

УДК 539.126.3

Измерение сечения процесса $e^+e^- \to K_s^0 K^\pm \pi^\mp$ на детекторе СНД

В. А. Кладов

Институт ядерной физики им Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Целью работы является измерение сечения процесса с точностью, сравнимой с предыдущими измерениями. Данный процесс дает ощутимый вклад (около 10 % при энергии в центре масс $\sqrt{s} \approx 1{,}65$ ГэВ) в полное сечение e^+e^- аннигиляции в адроны. Также измерение сечения является базисом для дальнейшего изучения физики резонансов в области энергий до 2 ГэВ, а именно семейств векторных ϕ и ρ мезонов.

Сечение процесса измеряется в нейтральной моде распада прямым методом по энергии в диапазоне от 1,2 до 2,0 ГэВ с использованием данных, накопленных на детекторе СНД ускорителя ВЭПП-2000 за 2011, 2012 и 2017 гг. В анализе используется кинематическая реконструкция событий для определения импульсов заряженных и уточнения параметров нейтральных частиц, накладывающая условия на сохранение четырехимпульса. Основным методом отделения фона является разделение похожих заряженных π и K мезонов на основе совместных данных аэрогелевого счетчика и трековой камеры, имеющих разную зависимость эффективности разделения от импульса частицы. Светимость определяется по событиям Bhabha-рассеяния как одного из двух процессов КЭД с наибольшим сечением. Радиационная поправка вычисляется из аппроксимации борновского сечения в модели векторной доминантности с использованием резонансов $\phi(1680)$ и $\rho(1450)$.

В работе измерено предварительное сечение процесса. На основе выработанных методов будет изучена его динамика.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук К. И. Белобородов

УДК 539.126.3

Изучение конверсионного распада омега мезона в π^0 мезон и электрон-позитронную пару

Б. Д. Куценко

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Измерение относительной вероятности конверсионных распадов необходимо для проверки модели векторной доминантности и оценки фона при изучении кварк-глюонной плазмы. Важным источником информации о физических процессах, происходящих в кварк-глюонной плазме, являются процессы рождения дилептонов, в частности рождение электрон-позитронной пары. В ряде экспериментов расчетное число пар дилептонов оказалось меньше измеренного числа. В расчетах используются в том числе относительные вероятности распада.

Изучение конверсионного распада $\omega \to \pi^0 e^+ e^-$ в канале $\pi^0 \to \gamma\gamma$ было выполнено на криогенном магнитном детекторе (КМД-3), работающем на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-2000 в ИЯФ СО РАН. В работе используются данные, набранные в 2013 г. в диапазоне энергии в системе центра масс 760–840 МэВ с интегральной светимостью 10 пб$^{-1}$.

Основными фоновыми процессами являются события распада $\omega \to \pi^0\pi^+\pi^-$, события КЭД и события радиационного распада $\omega \to \pi^0\gamma$, в которых монохроматический фотон конвертирует в электрон-позитронную пару на материале перед чувствительным объемом детектора. Для подавления последнего типа фона использовалась глубокая нейронная сеть. Рассчитана эффективность реконструкции фотонов, триггера, восстановления близких треков, отборов нейронной сети. Измерено видимое сечение исследуемого процесса в диапазоне 760–840 МэВ и получен предварительный результат для относительной вероятности распада $\omega \to \pi^0 e^+ e^-$. Точность полученного результата почти в два раза выше всех предыдущих измерений относительной вероятности распада.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук В. Ф. Казанин

УДК 539.1.074.23

Измерение пространственного разрешение для малого прототипа дрейфовой камеры Супер чарм-тау фабрики

Д. А. Кыштымов

Новосибирский государственный университет

В настоящее время в ИЯФ СО РАН активно ведется работа над проектом Супер чарм-тау фабрики. Создание нового коллайдера со светимостью 10^{35} $см^{-2}с^{-1}$ позволит исследовать ранее не изученные процессы в диапазоне энергии рождения чармониев и вблизи порога рождения тау-лептонов.

Один из ключевых элементов будущего детектора — дрейфовая камера (ДК), предназначенная для реконструкции траекторий заряженных частиц, определения их импульса, а также их идентификации по измерению ионизационные потерь в рабочем газе ДК. В данном проекте ДК состоит из гексагональных ячеек с характерным размером 7 мм, рабочей смесью является He/C3H8 (60/40). Основная характеристика ДК — импульсное разрешение, которое прямо пропорционально пространственному разрешению координатной системы.

Для реализации проведения измерения пространственного разрешения разработан алгоритм реконструкции траекторий заряженных частиц, в основе которого лежит метод перебора касательных линий к изохронам проволочек и численный перебор параметров траектории путем минимизации функции хи-квадрат, отлажена процедура калибровки $R(t)$ и методика проведения эксперимента с общим стартом.

Также был проведен эксперимент по измерению разрешения на смеси He/C3H8 (60/40) на малом прототипе ДК. В ходе эксперимента было достигнуто среднее пространственное разрешение около 90 мкм, что хорошо согласуется с ожидаемой величиной, полученной при моделировании.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук К. Ю. Тодышев

УДК 539.1

Изучение рождения состояния X(3872) в распадах нейтральных B-мезонов в эксперименте LHCb

Р. В. Ли

Новосибирский государственный университет

Экзотическое состояние X(3872) было впервые обнаружено экспериментом Belle в спектре инвариантных масс ($J/\psi\ \pi^+\ \pi^-$) в распаде $B^+ \to J/\psi\pi^+\pi^-K^+$ [1]. Позже оно было подтверждено в других экспериментах. В анализе данных эксперимента LHCb впервые определили квантовые числа как $J^{PC} = 1^{++}$ [2]. Однако распады нейтральных B-мезонов изучены гораздо хуже, вероятности распадов $B^+ \to X(3872)K^+$ и $B^0 \to X(3872)K^0$ измерены только в экспериментах Belle и BaBar: $Br[B^+ \to cc(3872)K^+] = (8{,}6 \pm 0{,}8)10^{-6}$, $Br[B^0 \to cc(3872)K^0] = (4{,}3 \pm 1{,}3)10^{-6}$ [3]. Это различие может указывать на нарушение изоспина в процессе рождения X(3872) в распадах B-мезонов. Задачей данной работы является измерение отношения вероятностей распадов Br[B → X(3872)K^0] / / Br[B^0 → ψ(2S)K^0] с использованием данных эксперимента LHCb. Подобное отношение для распадов заряженных B-мезонов уже измерено в эксперименте LHCb.

1. Choi S.-K. et al. Observation of a Narrow Charmoniumlike State in Exclusive $B^\pm \to K^\pm \pi + \pi$-J/ψ Decays // Phys. Rev. Lett. 2003. № 91 (26). URL: arxiv.org/abs/hep-ex/0308029.
2. Aaij R. et al. Determination of the X(3872) meson quantum numbers // Phys. Rev. Lett. 2003. № 110 (22). URL: arxiv.org/abs/1302.6269.
3. Zyla P. A. et al. The Review of Particle Physics // Prog. Theor. Exp. Phys. 2020. 083C01. URL: pdg.lbl.gov/.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук П. П. Кроковный

УДК 539.12.01

Вычисление полного борновского сечения процесса e + Ze → Ze + e^+e^-e

А. А. Любякин

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Высокоэнергетическая асимптотика процессов A + B → A + B + l^+l — изучалась еще в работах Racah [1–3]. Однако в этих работах не учитывалась возможность появления тождественных частиц в конечном состоянии. Для процесса e + Ze → Ze + e^+e^-e конечное состояние содержит два электрона.

Целью данной работы является вычисление полного борновского сечения этого процесса. Вычисление использует сведение интегрирования по фазовому объему конечных частиц к петлевым интегралам с разрезанными пропагаторами. Для вычисления получающихся трехпетлевых интегралов используются современные методы многопетлевых вычислений: тождества интегрирования по частям и метод дифференциальных уравнений.

Полученные результаты могут быть использованы для проведения расчетов в физике высоких энергий и астрофизике.

1. Racah G. Sulla Nascita di Coppie per Urti di Particelle Elettrizzate // Il Nuovo Cimento (1924–1942). 1937. Vol. 14. P. 93–113.
2. Racah G. Sulla Nascita di Coppie per Urti di Particelle Elettrizzate // Il Nuovo Cimento (1924–1942). 1936. Vol. 13. P. 66–73.
3. Racah G. Sulla Nascita Degli Elettroni Positivi // Il Nuovo Cimento (1924–1942). 1934. Vol. 11. P. 477–481.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. Р. Н. Ли

УДК 539.12.01

Возможные проявления Новой физики в распадах тау-лептонов в экспериментах на Супер чарм-тау фабрике

И. В. Образцов

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В настоящее время в ИЯФ СО РАН активно обсуждается проект Супер чарм-тау фабрики, который имеет богатую физическую программу. Этот проект направлен на поиск Новой физики, т. е. поиск явлений, которые не описываются Стандартной моделью.

Существуют аргументы, которые говорят, что поиск Новой физики особенно удобно проводить вблизи порога рождения пары тау-лептонов. Так как сами тау-лептоны не наблюдаются, то интерес представляет изучение различных каналов их распадов. Проявление Новой физики предполагается искать в процессах $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \pi^+\pi^-\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to e^+e^-\nu_e\bar{\nu}_e\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \mu^+\mu^-\nu_\mu\bar{\nu}_\mu\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \rho^+\rho^-\nu_\tau\bar{\nu}_\tau \to \pi^+\pi^-\pi^0\pi^0\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to e^+\pi^-\nu_e\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \pi^+e^-\bar{\nu}_e\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \mu^+\pi^-\nu_\mu\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \pi^+\mu^-\bar{\nu}_\mu\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \rho^\pm\pi^\mp\nu_\tau\bar{\nu}_\tau \to \pi^\pm\pi^\mp\pi^0\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to e^+\mu^-\nu_e\bar{\nu}_\mu\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \mu^+e^-\nu_\mu\bar{\nu}_e\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \rho^+e^-\nu_\tau\bar{\nu}_\tau \to \pi^+\pi^0e^-\bar{\nu}_e\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to e^+\rho^-\nu_\tau\bar{\nu}_\tau \to \pi^-\pi^0e^+\nu_e\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \rho^+\mu^-\nu_\tau\bar{\nu}_\tau \to \pi^+\pi^0\mu^-\bar{\nu}_\mu\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$, $e^+e^- \to \tau^+\tau^- \to \mu^+\rho^-\nu_\tau\bar{\nu}_\tau \to \pi^-\pi^0\mu^+\nu_\mu\nu_\tau\bar{\nu}_\tau$.

Дифференциальное и интегральное сечения этих процессов для поляризованных электронов и позитронов предполагается изучать с помощью эффективного лагранжиана $\mathcal{L}_{eff} = \mathcal{L}_{CM} - \Delta\mu_\tau\bar{\psi}_\tau\sigma^{\mu\nu}\psi_\tau\partial_\mu A_\nu - id_\tau\bar{\psi}_\tau\sigma^{\mu\nu}\gamma_5\psi_\tau\partial_\mu A_\nu$, здесь $\mathcal{L}_{CM}$ — лагранжиан Стандартной модели; ψ_τ — поле тау-лептона; A_ν — четырехвектор фотона; $\Delta\mu_\tau$ — аномальный магнитный момент тау-лептона; d_τ — электрический дипольный момент тау-лептона. Интерес представляет зависимость сечений перечисленных выше процессов от поляризаций начальных электрон-позитронных пучков.

В данной работе для каждого из перечисленных выше процессов была найдена величина асимметрии $x = \dfrac{|M_{+-}|^2 - |M_{-+}|^2}{|M_{+-}|^2 + |M_{-+}|^2}$, здесь M_{+-} — матричный элемент с правополяризованным начальным электроном и левополяризованным начальным позитроном; M_{-+} — матричный элемент с левополяризованным начальным электроном и правополяризованным начальным позитроном. Таким образом, полученные результаты позволят выбрать оптимальный подход к проведению экспериментальных исследований.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. А. И. Мильштейн

УДК 539.1.05

Разработка калориметра гамма-квантов эксперимента по поиску темного фотона в обратном комптоновском рассеянии

К. М. Пузикова

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

На данный момент накопилось достаточно косвенных данных, указывающих на существование темной материи, однако из множества существующих моделей ни одна не получила экспериментального подтверждения. Некоторые из этих моделей постулируют существование темного фотона (ТФ), частицы-переносчика «темного» электромагнетизма. Предполагается, что вероятность рождения ТФ в реакциях с электромагнитным фотоном ненулевая и осуществляется посредством кинематического смешивания [1]. Данная работа посвящена моделированию калориметра гамма-квантов (КГК) в эксперименте по поиску темного фотона в обратном комптоновском рассеянии (ОКР) методом Монте-Карло в GEANT4. Поиск осуществляется в диапазоне масс ТФ порядка нескольких кэВ.

Предполагается искать признаки рождения массивного ТФ в спектре потерянных энергий электронов ОКР, который существенно отличается от случая рождения безмассового фотона. Ясно, что при этом обычное ОКР является фоном, к тому же очень большим, в силу малой вероятности рождения ТФ. Для подавления этого фона предполагается регистрировать фотоны с помощью КГК и анализировать спектры электронов, где отсутствуют сигналы КГК. Современные накопители электронов и мощные лазеры способны обеспечить очень высокую светимость реакции ОКР. Очевидны требования к КГК: предельно высокие эффективность регистрации и скорость счета гамма-квантов. Рабочие энергии КГК будут ограничиваться ~8 МэВ. При больших энергиях открываются интенсивные каналы с вылетом нуклонов (гигантские резонансы), что снижает эффективность регистрации КГК.

Нами рассмотрены два варианта: монолитный и гибридный калориметр. Первый целиком сделан из LYSO, его оптимальные размеры — 22 × 22 × 40 см^3. Гибридный вариант представляет собой небольшой объем LYSO в центре, окруженный NaI, размеры: LYSO — 4 × 4 × 15 см^3, NaI — 35 × 35 × 70 см^3. В обоих случаях эффективность калориметра выше 99,9 % при пороге регистрации 1 МэВ. Установлено, что путем гранулирования LYSO можно повысить скорость счета до уровня ~ 10 МГц.

1. Rizzo T. G. Kinetic Mixing, Dark Photons and an Extra Dimension: I // J. High Energ. Phys. 2018. Vol. 7.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. М. Николенко

УДК 539.12.01

Двухпетлевые поправки к дифференциальному сечению процесса ee → γγ

В. А. Стоцкий

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В квантовой электродинамике взаимодействие можно учитывать по теории возмущений. Вычисление старших порядков теории возмущений сводится к вычислению многопетлевых интегралов и имеет решающее значение для повышения точности теоретических предсказаний, что может быть важно в контексте Новой физики. В настоящее время методы вычисления многопетлевых интегралов достигли уровня, в котором можно вычислять двухпетлевые поправки к дифференциальным сечениям процессов.

В данной работе задача вычисления двухпетлевых поправок к дифференциальному сечению процесса рождения двух фотонов в электрон-позитронной аннигиляции решается с помощью современных методов многопетлевых вычислений. Амплитуда рассеяния вычисляется с использованием метода, применяющего тождества интегрирования по частям, метода дифференциальных уравнений и метода размерностных рекуррентных соотношений.

Полученное выражение будет записываться через классические полилогарифмы Li_n и $S_{m,n}$, зависящие от кинематических параметров.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. Р. Н. Ли

УДК 539.1.074

Измерение времени срабатывания и энерговыделения в счетчике калориметра Супер чарм-тау фабрики

Р. В. Урманов

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В настоящий момент в ИЯФ СО РАН ведется работа над прототипом электромагнитного калориметра, основанного на сцинтилляционных кристаллах чистого CsI. Счетчик состоит из одного сцинтилляционного кристалла, пластины из оргстекла со спектросмещающим люминофором, четырех лавинных фотодиодов, четырехканального зарядочувствительного предусилителя, пассивного фильтра высоких частот первого порядка и двух активных фильтров низких частот второго порядка. Такой калориметр планируется использовать в детекторе Супер чарм-тау фабрики, а также в усовершенствованном детекторе Belle II.

Проектная светимость Супер чарм-тау фабрики составляет 10^{35} см$^{-2}$с$^{-1}$, что на порядок превосходит все существующие на данный момент эксперименты. Высокая светимость коллайдера приводит к большому уровню пучкового фона в детекторе. В связи с этим для анализа данных с калориметра применяется метод анализа формы сигнала с каждого счетчика калориметра в оцифровывающей электронике, который позволяет уменьшить шумы наложения, точнее измерить время события, а также учесть эффекты наложения сигналов двух соседних событий.

В настоящей работе исследован спектрометрический тракт счетчика калориметра, получено аналитическое выражение формы сигнала на выходе спектрометрического тракта, предложены параметризация сигнала и алгоритм поиска параметров формы и ковариационной матрицы электронных шумов. Разработан алгоритм аппроксимации амплитуды и времени прибытия сигнала.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. А. Епифанов

УДК 539.1.05

Изучение процесса $e^+e^- \to \omega\pi^0\pi^0$ на детекторе СНД

Н. П. Ушакова

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

На электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-2000 в ИЯФ СО РАН ведутся эксперименты по изучению процессов аннигиляции электрон-позитронной пары в адроны и лептоны. Максимальная энергия частиц в системе центра масс, достижимая на коллайдере, равна 2 ГэВ, при этом максимальная светимость коллайдера 10^{32} $см^{-2}с^{-1}$. Основная задача экспериментов на данном коллайдере — измерение адронных сечений и анализ промежуточных состояний. Одним из изучаемых процессов является электрон-позитронная аннигиляция в $\omega\pi^0\pi^0$. В ходе анализа была разработана методика выделения событий данного процесса и вычислено его предварительное полное сечение.

Для вычисления необходимо было отобрать события изучаемого процесса в экспериментах разных лет на коллайдере, отписать параметры моделирования фоновых и искомого процессов, вычислить эффективность регистрации искомого процесса также на основе моделирования и найти интегральную светимость для соответствующих экспериментов. Анализ проводился с использованием программного обеспечения детектора СНД, а также пакета программ ROOT CERN. В анализе использовались данные детектора 2010–2021 гг. в диапазоне энергий 537–1000 МэВ для одного пучка. В результате было получено предварительное полное сечение процесса $e^+e^- \to \omega\pi^0\pi^0$.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. В. Бердюгин

УДК 539.1.05

Экспериментальное исследование процесса аннигиляции электрон-позитронной пары в нейтрон-антинейтронную пару в эксперименте на детекторе СНД коллайдера ВЭПП-2000

Г. С. Чижик

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Электромагнитное взаимодействие нейтрона с веществом зависит от двух функций $|G_e(q^2)|$ и $|G_m(q^2)|$ (где q — переданный четырехимпульс), электромагнитных форм-факторов, входящих в сечение рассеяния нейтрона с веществом или рождения пар нейтрон-антинейтрона и не предсказываемых в рамках КЭД. q^2 может принимать отрицательные (в случае рассеяния) или положительные (в случае рождения пар) значения.

В работе изучены данные вблизи порога рождения нейтрон-антинейтронных пар (энергия в системе центра масс от 1,89 до 1,98 ГэВ), набранные детектором СНД на коллайдере ВЭПП-2000, расположенном в ИЯФ СО РАН. Измерено полное борновское сечение процесса, для чего были подобраны правила выделения искомых событий, найдена светимость, набранная в эксперименте, а также эффективность регистрации событий при данных правилах отбора на основе моделирования, определены радиационные поправки к видимому сечению, выработана методика определения числа рождения нейтрон-антинейтронных пар по анализу времени регистрации событий. На основе полученного сечения определены соотношения $|G_e/G_m|$ в исследуемой области энергий.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук С. И. Середняков

УДК 539.128

Стартовый сцинтилляционный детектор эксперимента Дейтрон

А. В. Юрченко

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск

В ИЯФ СО РАН ведутся эксперименты по изучению реакции двухчастичного фоторасщепления тензорно-поляризованного дейтрона $\gamma + d = p + n$ на накопителе ВЭПП-3.

В данной работе был разработан сцинтилляционный детектор для создания стартового сигнала привязки по времени для времяпролетных измерений протонов/нейтронов (ToF). Детектор срабатывает от рассеянных электронов системы мечения квазиреальных фотонов. Для надежной идентификации протонов и нейтронов с энергией 200–400 МэВ необходимо достичь временного разрешения ToF не хуже ~150 пс.

В качестве радиатора детектора используется быстрый органический сцинтиллятор BC-422 толщиной 6,5 мм и размером 180 × 40 мм^2 с заявленным временем нарастания 350 пс. Сцинтилляционные вспышки регистрируются кремниевыми фотоумножителями (SiPM) с двух узких торцов счетчика. На каждом торце установлено по 4 фотоприемника SensL Micro- FC30035 (3 × 3 мм^2), соединенные последовательно. Сигнал с SiPMs поступает на двухкаскадный предусилитель на транзисторах MAR-6+ с применением схемы формирования сигнала (полюс-ноль), который был специально разработан для данного детектора. Для оцифровки сигналов используются ВЦП с квантом 50 пс.

Исследовались временные характеристики стартового счетчика. В ходе прототипирования детектора использовались разные SiPMs и конфигурации их включения, различные предусилители сигналов с целью достижения наилучшего временного разрешения. Произведено моделирование светосбора в программе Litrani. Для измерения временного разрешения использовался метод разности времен прихода сигналов при фиксированной координате ионизирующих частиц. Полученное на стенде с космическими частицами и на радиоактивном источнике Sr-90 разрешение детектора составило ~120 пс. Обсуждается, чем ограничено временное разрешение, и рассматриваются пути дальнейшего его улучшения.

Детектор был использован в сеансе набора данных 2021 г.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Д. К. Топорков

ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ

Научный руководитель секции — канд. техн. наук *Г. А. Фатькин*

Секретарь секции — канд. физ.-мат. наук *В. С. Воробьев*

Экспертный совет

д-р физ.-мат. наук *А. М. Батраков*
д-р физ.-мат. наук *И. Б. Логашенко*
канд. техн. наук *К. Ф. Лысаков*

INSTRUMENTATION IN EXPERIMENTAL PHYSICS

Section scientific supervisor — Cand. Tech. Sci. *G. A. Fatkin*

Section head — Cand. Phis.-Math. Sci. *V. S. Vorobiev*

Section scientific committee

Dr Phis.-Math. Sci. *A. M. Batrakov*
Dr Phis.-Math. Sci. *I. B. Logashenko*
Cand. Tech. Sci. *K. F. Lysakov*

АВТОМАТИЗАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА, МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОБРАБОТКА ДАННЫХ

УДК 681.518.3

Блок упаковки данных модуля LASP жидкоаргонового калориметра ATLAS для системы FEX

А. А. Андреев

Новосибирский государственный университет

ATLAS — это один из четырех основных экспериментов на Большом адронном коллайдере. Эксперимент проводится на одноименном детекторе, предназначенном для исследования протон-протонных столкновений и столкновений тяжелых ионов. Детектор охватывает приблизительно 99 % всего телесного угла вокруг точки столкновения и состоит из множества подсистем, в том числе калориметров. Система калориметров покрывает псевдобыстроту ν (функция полярного угла детектора, позволяющая обеспечить равномерную загрузку по регистрирующим каналам) в диапазоне до 4,9 и обеспечивает измерение энергии частиц.

В рамках второй фазы обновления жидкоаргонового калориметра детектора ATLAS будет произведена полная замена считывающей электроники из-за ограниченной радиационной стойкости некоторых установленных в данный момент компонентов, а также несовместимости с модернизированной триггерной системой. Важным компонентом новой считывающей системы будет являться модуль LASP (*Liquid Argon Signal Processors*), реализующий прием оцифрованных сигналов, цифровую фильтрацию и буферизацию данных до момента принятия решения триггерной системы. В основе данного модуля будет работать ПЛИС Intel Stratix 10.

Цель данной работы — разработка некоторых компонентов системы LASP, а именно блоков переупорядочивания входных сигналов в соответствии с геометрией детектора и упаковки данных для системы fFEX. Эти компоненты разрабатываются на языке описания аппаратуры интегральных схем VHDL с применением технологии UVVM для отладки. Попутно необходимо реализовать ПО для автоматической генерации конфигураций модуля переупорядочивания и составить протокол передачи данных в систему fFEX.

В результате данной работы будет реализован синтезируемый RTL код для обозначенных компонентов модуля LASP, проведено их функциональное тестирование, анализ временных ограничений и занимаемых логических ресурсов, после чего они будут встроены в общую систему.

Научный руководитель — канд. техн. наук В. В. Жуланов

УДК 539.1.072

Разработка интерфейса подключения генераторов событий в программном окружении на Супер чарм-тау фабрике

М. С. Белозерова

Новосибирский государственный университет
Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера, Новосибирск

Первичные генераторы событий являются важным элементом программного обеспечения для экспериментов по физике элементарных частиц. В рамках одного эксперимента могут быть использованы несколько генераторов. Однако они не имеют единого стандарта реализации, а следовательно, не могут быть подключены одинаковым образом. Поставлена цель: разработать интерфейс подключения генераторов в фреймворке Aurora [1], который является стандартом программного обеспечения в проекте Супер чарм-тау фабрики [2].

Для реализации единого метода подключения генераторов событий в программное окружение проекта было предложено использовать паттерн проектирования «абстрактная фабрика». В качестве фабрики используется класс *GenAlg*. Таким образом для подключения нового генератора необходимо реализовать интерфейс в архитектуре, предлагаемой фреймворком Aurora, с определением виртуального метода возвращающего событие в заданном формате.

Реализован интерфейс для генератора KKMC [3], разработанного на языке Fortran. Данный генератор возвращает события в формате HepEvt. Но в фреймворке Aurora используется HepMC3 [4], поэтому был реализован соответствующий конвертер. Кроме генератора KKMC в фреймворке Aurora подключены аналогичным образом EvtGen, Particle Gun.

1. Belozyorova M., Maksimov D., Razuvaev G. et al. Computing Environmental for the Super-Charm-Tau factory detector project // CEUR Workshop Proc. 2021.
2. Project of Super c-tau factory. URL: http://sct.inp.nsk.su (дата обращения: 05.02.2022).
3. Jadah S., Ward B. F. L., Was Z. The precision Monte Carlo event generator KK for two-fermion final states in e^+e^- collisions // Comput. Phys. Commun. 2000.
4. Bucklye A. et al. The HepMC3 event record library for Monte-Carlo event generators // Comput. Phys. Commun. 2020.

Научные руководители — канд. физ.-мат. наук В. С. Воробьев, Г. П. Разуваев

УДК 606:61

Увеличение динамического диапазона программно-аппаратного комплекса для сбора данных со сканирующего проточного цитометра

Н. Е. Бирючков

Новосибирский государственный университет

Анализ дисперсных сред всегда являлся крайне актуальной задачей в науке и технике. Особую важность имеет задача проведения поштучного анализа каждой частицы дисперсной среды. Так, анализ клеток крови, при котором определяется размер, форма и морфология каждой клетки, позволит своевременно диагностировать такие опасные заболевания, как ишемическая болезнь сердца, анемия и др. Для решения этой задачи используются такие методы, как микроскопия, кондуктометрия и цитометрия. В настоящее время все более популярным становится третий метод, цитометрия, а именно одно из ее направлений — сканирующая проточная цитометрия. Данный способ подразумевает использование эффектов рассеяния света частицами дисперсной среды, собирается информация о распределении интенсивности рассеянного света.

В настоящее время информация о распределении интенсивности светорассеяния анализируется при помощи фотоэлектронного умножителя и системы, состоящей из АЦП, ЦАП, трансимпедансного усилителя. Так как сканирующий проточный цитометр не является серийно производимым оборудованием, то на сегодняшний день каждая система сбора данных для сканирующего проточного цитометра абсолютно уникальна и разрабатывается под конкретный цитометр, и при этом возникают значительные проблемы с тем, чтобы перенести систему сбора данных с одного цитометра на другой. Система сбора данных, реализованная на данный момент, способна обрабатывать данные только от одного типа частиц, так как необходимо аппаратно задавать коэффициент усиления ФЭУ и настраивать его под определенный размер частиц. При этом размеры клеток крови могут варьироваться от 2 до 8 микрометров.

Таким образом, цель данной работы — создание программно-аппаратного комплекса для сбора данных со сканирующего проточного цитометра с динамическим диапазоном 6 декад.

В ходе исследования был проведен анализ электрических схем на основе трансимпедансного усилителя и созданы печатные платы с двумя выходными каналами, имеющими различные коэффициенты усиления. Разработана программа для обработки данных и собрана система сбора данных. Проведены эксперименты по сбору данных с двух каналов при помощи осциллографа. Система продемонстрировала свою эффективность в зависимости от количества света, попадающего на ФЭУ.

Научный руководитель — В. П. Мальцев

УДК 606:61

Разработка программно-аппаратного комплекса для автоматизации гидродинамической части сканирующего проточного цитометра

М. Р. Дударь

Новосибирский государственный университет

Анализ дисперсных сред, предполагающий измерение морфологических характеристик дисперсной фазы, используется для решения технологических и биологических задач. В частности, измерение характеристик клеток крови позволяет диагностировать различные заболевания. Одним из приборов, позволяющих решить данную задачу, является сканирующий проточный цитометр. Данный метод подразумевает измерение сигнала светорассеяния (индикатрисы) от частиц пробы в поштучном режиме. Определение характеристик измеряемых частиц осуществляется с помощью решения обратной задачи светорассеяния. Точность решения данной задачи зависит от точности измерения индикатрисы светорассеяния. Большое влияние на ошибку измерения оказывает стабильность подачи пробы. Большинство доступных на рынке насосов либо не подходят для использования в сканирующей проточной цитометрии, либо не обеспечивают необходимой стабильности потока.

Цель данной работы — исследование методов подачи частиц в сканирующем проточном цитометре и последующая стабилизация подачи частиц. В ходе работы был выбран перистальтический насос в качестве способа подачи пробы и обжимающей жидкости. Построена математическая модель и описана система уравнений, описывающая данную модель, решением которой являлась зависимость скорости насоса от времени. С учетом особенности устройства перистальтических насосов были проведены эксперименты с различными способами стабилизации скорости жидкости, собран предусилитель сигнала для датчика давления, написано программное обеспечение для микроконтроллера STM32F103C8T6 для измерения, анализа и визуализации давления. В результате данной работы разработана система автоматизации гидродинамической части сканирующего проточного цитометра и достигнута необходимая для корректного измерения стабильность подачи пробы.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук К. В. Гилев

УДК 53.082.531

Разработка системы измерения трехмерной геометрии наледи триангуляционными методами с использованием структурированного освещения

В. О. Зуев

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Актуальность исследований в области измерения трехмерной геометрии наледи обусловлена наличием широкого спектра научно-технических задач, направленных на борьбу с обледенением. Требования высокой точности измерения и учета отражающих свойств наледи накладывают ограничения на выбор метода измерения. Среди оптических методов измерения трехмерной геометрии объекта особенно перспективно использование триангуляционных методов с применением структурированного освещения, что обусловлено их высокой точностью и существенным развитием.

Цель работы — разработка оптической системы измерения трехмерной геометрии наледи триангуляционными методами с использованием структурированного освещения. В качестве измерительного объема выступает труба с прямоугольным сечением с характерными размерами 20 × 20 см, стенки которой изготовлены из оргстекла. В качестве метода измерения используется комбинация методов фазовой триангуляции и бинарных кодов Грея. Работа данных методов реализована с помощью проектора и камеры, благодаря чему появилась возможность гибкой настройки конфигурации измерительной установки. Для диагностики наледи на различных участках объекта созданы измерительные установки для проведения измерений в вертикальной и горизонтальной плоскостях. Для обеспечения максимальной точности измерений проведены исследования по подбору и настройке измерительной оптической системы. Проведено тестирование нескольких камер с различным разрешением фотоприемной матрицы и различной оптикой, формирующей изображение: ImagineSource DMK 33GX264 и Logitech HD Webcam C270.

В результате создана система измерения трехмерной геометрии наледи, реализующая методы фазовой триангуляции и бинарных кодов Грея. Разработаны конфигурации измерительной системы для диагностики наледи на различных участках объектах. Достигнута точность измерений 9 мкм. Проведены эксперименты по измерению трехмерной геометрии наледи и диагностике ее геометрических параметров. Полученные результаты демонстрируют широкий спектр применимости триангуляционных методов с использованием структурированного освещения.

Научный руководитель — д-р техн. наук С. В. Двойнишников

УДК 004.62+53.087

Разработка ПО для онлайн-монитора светимости детектора Belle II

К. О. Каня

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

В 2018 г. на ускорительном комплексе SuperKEKB начался эксперимент Belle II, проектная светимость которого $8 \cdot 10^{35}$ см$^{-1} \cdot$с$^{-1}$. При изучении редких распадов необходимо серьезно контролировать процесс набора данных, а также корректность работы ускорителя и детектора. Одним из способов контроля является измерение светимости, для этого в Институте ядерной физики был разработан онлайн-монитор светимости, который измеряет скорости счета событий e^-e^+ рассеяния с торцевых частей электромагнитного калориметра (ECL).

Цель данной работы — написание ПО для онлайн-монитора светимости, которое будет обеспечивать первичную проверку качества, отображение, архивирование и передачу данных. Для передачи данных в систему медленного контроля EPICS использовалась библиотека pythonIOC.

В ходе данной работы была улучшена программа ЦПУ онлайн-монитора светимости, что позволило обрабатывать множество одновременных подключений. Усовершенствован процесс энергетической калибровки: написан генератор тестовых импульсов, позволяющий установить тестовые импульсы по заданным наборам секторов торцевых частей ECL. Считывающее ПО реализует основную логику считывания данных с монитора светимости, а также расчет интегральных светимостей и последующую передачу данных в системы медленного контроля EPICS и NSM. Расширено API считывающего ПО, добавлен набор методов, позволяющих синхронизировать коэффициенты энергетической калибровки монитора светимости и пороговых значений секторов ECL. Также добавлена поддержка работы с float-значениями на уровне API. Реализован расчет и передача светимостей предыдущего дня. Улучшен расчет светимости с учетом энергии пучков, добавлена поправка на изменение эффективности регистрации от энергии. Усовершенствован процесс считывание данных и последующая работа с базой данных. В GUI добавлена синхронизация калибровочных коэффициентов и их использование для пересчета в энергетические единицы. Добавлена автоподстройка диапазона отображаемых значений по оси X для гистограмм.

В результате реализовано ПО для монитора светимости, которое позволяет контролировать процесс работы ускорителя и детектора, а также проверять, сохранять и отображать данные с монитора светимости.

Научный руководитель — М. А. Ремнев

УДК 53.07

Программное обеспечение блока синхронизации для станции «Быстропротекающие процессы» на СКИФ

П. О. Сайфудинова

Новосибирский государственный университет

Сейчас идет строительство СКИФ, и к его окончанию требуется подготовить многие модули, установки и эксперименты, которые сейчас разрабатываются. Одним из таких ключевых модулей является блок синхронизации, необходимый для проведения экспериментов на станции «Быстропротекающие процессы».

Назначение блока синхронизации — взаимодействие между ускорителем, модулями и установками эксперимента, выдача сигналов управления и анализ текущей ситуации на основе разработанных эвристик. Через данный блок можно будет частично настраивать эксперимент, т. е. задавать параметры управляющих сигналов, таймауты ожидания и т. д. Поэтому одной из задач данной работы является реализация кросс-платформенного клиент-серверного приложения с графическим и/или консольным интерфейсом с возможностью дальнейшего расширения функциональности (например, вводить новые сценарии эксперимента, конфигурировать его параметры). Сервером для этого приложения будет являться блок синхронизации.

Также через блок синхронизации можно выбирать различные сценарии проведения экспериментов на станции «Быстропротекающие процессы». На данный момент пользователи СИ дали заявку на два сценария: калибровка детекторов и «Эксперимент» (для детектора на основе ГЭУ и кремниевого детектора). Сценарий «Калибровка» необходим для проверки работы блока синхронизации и экспериментальной установки, набора пьедесталов, а также для настройки установки и дальнейшего проведения эксперимента. Сценарий «Эксперимент» необходим для набора экспериментальных данных.

В ходе работы проведен сбор требований, функциональных диаграмм и описания сигналов, осуществлен обзор теоретического материала по тематике исследования, изучен необходимый инструментарий, реализовано базовое клиент-серверное взаимодействие, написаны тесты для моделирования на основе собранных требований, описаны алгоритмы работы блока синхронизации для различных сценариев работы, реализован основной сценарий «Эксперимент» на языке SystemVerilog в среде Quartus и Modelsim.

Научный руководитель — В. Н. Кудрявцев

УДК 004.942+519.254

Моделирование восстановления вкладов фотонной и адронной компонент при обработке сигнала со счетчика CsI(Tl)

А. А. Тихонова

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Эксперимент Belle II проводится на коллайдере SuperKEKB с ассиметричными электрон-позитронными пучками с энергиями 7 и 4 ГэВ соответственно. Одной из основных подсистем детектора Belle II является электромагнитный калориметр, состоящий из сцинтилляционных кристаллов CsI(Tl). Световые импульсы с кристаллов преобразуются в электрические и поступают в считывающую электронику калориметра, представленную модулями ShaperDSP. Здесь происходит аналоговое формирование сигнала, его оцифровка 18-битным АЦП и восстановление амплитуды и времени появления сигнала.

Кроме измерения времени сигнала калориметр можно использовать для идентификации адронов, в частности разделения адронов и легких ливнеобразующих частиц: фотонов и электронов. Как было выяснено, форма вспышки сцинтилляционных кристаллов CsI(Tl) зависит от плотности ионизации. Адроны имеют большую долю ионизации с высокой плотностью, что дает возможность идентифицировать их. Для этого требуется измерять вклад адронной компоненты.

Сейчас вклад адронной компоненты измеряется офлайн с использованием класса TMinuit пакета ROOT. Для этого сохраняются формы импульсов с энергией более 50 МэВ. Однако при плановом увеличении светимости увеличится и объем данных, поэтому алгоритм подгонки необходимо перенести внутрь электроники.

Цель работы — разработка алгоритма, моделирующего восстановление фотонной и адронной компонент сигнала в считывающей электронике калориметра. В ходе работы был подготовлен пакет программ на языке C++ для генерирования сигнала с калориметра с учетом шума электроники и шумов наложения; написан пакет программ для подгонки данных суммой фотонной и адронной компонент, основанной на минимизации суммы хи-квадрат градиентным методом; с использованием сгенерированных сигналов была исследована зависимость разрешения по времени, амплитуде и вкладу адронной компоненты; проведено сравнение разработанного алгоритма с программой офлайн подгонки на экспериментальных данных; алгоритм был подготовлен для имплементации в ПЛИС.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доц. А. С. Кузьмин

УДК 681.2, 532.5

Автоматизированная система для исследования взаимодействия капель жидкости с функциональными поверхностями

А. С. Шмидт

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе, Новосибирск
Высший колледж информатики НГУ, Новосибирск

Взаимодействие жидкости с твердой поверхностью, которая имеет иерархическую микро- и наноструктуру, привлекает большое внимание исследователей по всему миру. Функционализация поверхностей позволяет управлять смачиваемостью, создавать самоочищающиеся и антикоррозийные покрытия, биочипы и биосенсоры, теплообменники на основе явления конденсации и т. д. Эта область быстро развивается, что отражается в заметном количестве публикаций, посвященных данной тематике. Одной из актуальных задач здесь является исследование процессов падения и растекания капель различных жидкостей на таких поверхностях.

В работе описан автоматизированный комплекс для анализа взаимодействия капель жидкости (вода, глицерин) с микро/нано-текстурированной поверхностью. В состав системы входят микроконтроллерный блок, дозатор одиночных капель, система нагрева структурированной подложки, высокоскоростная видеокамера Phantom VEO 710. Капельный дозатор представляет собой шприц, поршень которого перемещается шаговым двигателем по сигналу с блока управления. Скорость капли регулируется расстоянием от иглы капельного дозатора до исследуемой поверхности. Съемные наконечники позволяют подготавливать капли размером от 0,2 до 5 мм. Видеофиксация растекания капли может проводиться на частоте съемки до 20 кГц. Запись высокоскоростной съемки осуществляется по синхроимпульсу, генерируемому по сигналу с датчика срыва капли. Система нагрева обеспечивает равномерный прогрев поверхности до 400 °C. Комплекс полностью автоматизирован и управляется с компьютера. Применение разработанного комплекса показало его эффективность и позволило получить большой набор экспериментальных данных при проведении исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 21-52-53025 ГФЕН_а)

Научный руководитель — Н. Б. Миськив

РАДИОФИЗИКА И УСКОРИТЕЛИ

УДК 533.922

Эволюция равновесных пучков заряженных частиц под действием внешних кильватерных полей в плазме

М. А. Байструков

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Распространение узкосфокусированных коротких пучков высокоэнергичных заряженных частиц в плазме активно изучается в контексте новых методов ускорения. Такие пучки могут коллективно взаимодействовать с плазмой, либо создавая сильную кильватерную волну (тогда они называются драйверами), либо ускоряясь и фокусируясь в полях этой волны (соответственно, витнессы). В большинстве случаев плотность пучков много меньше или сравнима с плотностью плазмы. Такие режимы взаимодействия называются линейными и слабонелинейными соответственно. В этих режимах пучок частиц после входа в плазму быстро достигает радиального равновесия с собственным кильватерным полем (намного быстрее, чем происходит энергетический обмен с плазмой). При этом равновесное состояние довольно экзотично: плотность пучка сильно пикирована возле оси, распределение частиц по импульсу не гауссово.

В идеале равновесный пучок, распространяясь в невозмущенной плазме, сохраняет свою форму, и только энергия частиц уменьшается. Однако возможны условия, при которых какое-либо возмущение (другой пучок или лазерный импульс) появляется перед драйвером после того, как он достиг радиального равновесия. Кильватерное поле возмущения имеет фазовую скорость, равную скорости света, поэтому оно стационарно в системе отсчета равновесного пучка и может сильно изменять его форму, даже если амплитуда возмущающей волны мала. Такая ситуация может возникнуть, к примеру, если пучок состоит из нескольких сгустков (так называемый гребенчатый пучок) и первый сгусток имеет меньший заряд, чем остальные. Этот сгусток приходит в равновесие позже остальных, и его кильватерное поле действует на них как внешнее возмущение. Таким образом, важно знать устойчивость равновесных пучков к внешним возмущениям.

В данной работе численно изучено, какое возмущение может уничтожить одиночный короткий пучок или последовательность сгустков в диапазоне параметров, интересных для плазменного кильватерного ускорения в осесимметричной конфигурации, и как быстро. Найдено, что существуют особенно опасные фазы, в которых пучок может быть уничтожен возмущением очень маленькой амплитуды. Также найдено, что возмущение с амплитудой больше, чем кильватерное поле одного микросгустка из последовательности, всегда разрушительно.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. К. В. Лотов

УДК 539.1

Исследование возможности обнаружения эффектов несохранения четности в экспериментах на ускорительном комплексе NICA

Е. В. Бедарев

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Одной из целей экспериментов с ускорительным комплексом NICA является изучение спиновых эффектов в столкновениях поляризованных протонов и дейтронов в диапазонах энергий *pp* 12–27 ГэВ и *dd* 4–13,8 ГэВ в с.ц.м. соответственно [1]. В рамках данной физической программы предложен эксперимент по проверке нарушения *P*-четности в *pd*-рассеянии на внешней мишени, описываемого в рамках Стандартной модели [2]. Для осуществления эксперимента требуется изучение одного из важных его аспектов: возможности адиабатического поворота в горизонтальную плоскость кольца поляризации пучка нуклонов с помощью продольного или поперечного поля.

В данной работе произведено исследование возможности получения динамически устойчивой поперечной поляризации пучка протонов или дейтронов со схемой реализации эксперимента в кольце Nuclotron с учетом синхротронных колебаний и флуктуаций энергии в пучке. Исследование прецессии спина при наличии ВЧ-катушки с продольным полем для *d* и полоскового ВЧ-промежутка с поперечным полем в случае *p* производилось с помощью моделирования в программном пакете Wolfram Mathematica. По результатам моделирования были выработаны требования к параметрам устройств и предложена их схема.

1. Savin I. A., Efremov A. V., Peshekhonov D. V. et al. Spin Physics Experiments at NICA-SPD with polarized proton and deuteron beams // EPJ Web Conf.: 4th Int. Workshop Transverse Polarisation Phenom. Hard Processes (TRANSVERSITY 2014). 2015. Vol. 85.
2. Koop I. A., Milstein A. I., Nikolaev N. N. et al. Tests of Fundamental Discrete Symmetries at the NICA Facility: Addendum to the Spin Physics Programme // Phys. Part. Nuclei. 2021. Vol. 52. P. 549–554.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. И. А. Кооп

УДК 621.384.647:533.922

Изменение формы равновесного сгустка при вылете в вакуум из плазменного кильватерного ускорителя

М. С. Дорожкина

Новосибирский государственный технический университет
Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск

Пучок ультрарелятивистских заряженных частиц, который длительное время распространяется через плотную плазму, приходит в довольно экзотическое равновесное состояние [1]. В этом состоянии плотность пучка имеет сильно негауссовскую форму и ярко выраженную пикировку вблизи оси. Распределение частиц в пространстве импульсов тоже не гауссовское. Если пучок вылетает из плазмы в вакуум, он больше не фокусируется плазмой, и его радиальный профиль плотности изменяется. Данная ситуация будет иметь место в эксперименте по кильватерному ускорению AWAKE в CERN, когда вакуумный промежуток необходим для инжекции ускоряемого электронного пучка. При этом равновесный протонный пучок в вакуумном промежутке свободно расширяется.

Наша задача состояла в рассмотрении изменения пучка, когда он распространяется в вакууме. Оказывается, что форма его профиля плотности остается практически такой же, как и в плазме. Известно, что гауссовские пучки расширяются с сохранением своей формы. В результате нашей работы показано, что равновесные пучки, подобно гауссовским, приблизительно сохраняют свою форму при свободном расширении в вакууме.

1. Lotov K. V. Radial equilibrium of relativistic particle bunches in plasma wakefield accelerators // Phys. Plasmas. 2017. Vol. 24. P. 023119.

Научный руководитель — В. А. Минаков

УДК 004.94

Построение моделей мишеней переходного и черенковского излучений в CST Studio Suite

М. А. Лаппо, Д. А. Шкитов

Томский политехнический университет

В настоящее время численное моделирование [1] является одной из неотъемлемых и важных составляющих практически любого научного исследования. Для выполнения исследований по генерации поляризационного излучения электронным пучком на микротроне ТПУ необходимо проведение моделирования взаимодействия заряженных частиц с мишенями различной геометрии, как металлическими, так и диэлектрическими. Для этого был выбран пакет полного электромагнитного моделирования CST Studio Suite.

На данном этапе работы были созданы геометрические модели металлических и диэлектрических мишеней с заданными свойствами. Эти мишени являются источниками переходного и черенковского излучений в ГГц области частот для условий микротрона ТПУ. Модели мишеней были разработаны с учетом их параметризации: размеров, углов наклона мишени и расположения ее относительно траектории пучка. Иными словами, в модели есть возможность провести серию расчетов или оптимизацию по выбранному параметру. Это важно для учета в моделировании реальных экспериментальных условий. В пакете CST были построены следующие модели мишеней: идеально проводящий наклонный плоский прямоугольный экран; наклонная периодическая решетка, состоящая из медных стрипов с вакуумными промежутками; тефлоновые треугольные призмы разной геометрии с возможностью их поворота; тефлоновая пластина (случай нормального пролета пучка).

В дальнейшей работе планируется провести моделирование характеристик излучения в ГГц-ТГц области частот и оптическом диапазоне. Также будет проведено моделирование характеристик черенковского излучения для условий ускорителя ЛИНАК-200 (ОИЯИ).

Работа поддержана в ТПУ в рамках программы развития «Приоритет-2030» (НИП/ИЗ-005-0000-2022).

1. ГОСТ Р 57188-2016. Численное моделирование физических процессов. М.: Стандартинформ, 2018. 12 с.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук М. В. Шевелев

УДК 537.81

Настройка нелинейных корректоров для изохронной моды Collector Ring

М. А. Лялин

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Одним из целевых режимов работы строящегося в Дармштадте комплекса Collector Ring (CR) [1] является изохронная мода, в которой захваченные ионы циркулируют с равными периодами вне зависимости от их импульсов. Измерение орбитального периода обращения T времяпролетными датчиками позволит прецизионно определить отношение массы к заряду изучаемых ионов. Для этого относительная вариация периода обращения dT/T не должна превышать 10^{-6} во всем акцептансе по импульсам ± 0,62 %. Численное моделирование в Strategic Accelerator Design [2] показало, что без компенсации нелинейных эффектов вариация периода составит 10^{-5}.

В этой работе определены параметры нелинейных корректоров, которыми в CR являются секступоли и октуполи, необходимые для реализации изохронной моды.

1. Anashin V. et al. CR TDR Annex-1. 2016.
2. Hirata K. An introduction to SAD // 2nd Adv. ICFA Beam Dyn. Workshop. Lugano, Switzerland, 1988. P. 62–65.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. Б. Шварц

УДК 537.8

Коррекция магнитной оптической структуры ускорителя ВЭПП-4М на основе матриц отклика

Р. З. Мамутов

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Несоответствие параметров экспериментальной установки проектным значениям может существенно ограничивать эксперименты и ухудшать качество результатов. Ключевой характеристикой производительности коллайдера является светимость, которая зависит от многих параметров, в частности от качества магнитной структуры. Точная выставка элементов ускорителя и исправление магнитных полей в них — задача, эффективным методом решения которой является коррекция с помощью матриц откликов [1].

Построение матриц откликов заключалось в измерении смещения орбиты пучка в датчиках положения пучка при поочередном изменении полей корректирующих магнитов. Определение истинных значений параметров структуры ускорителя проводилось путем сравнения построенной экспериментальной матрицы с теоретической в линейном приближении. Расчет модельной матрицы осуществлялся с помощью программы Methodical Accelerator Design X (MAD-X) [2]. Кроме того, были проведены симуляции на модели и рассмотрены различные оптимизационные алгоритмы с целью выявления оптимального, позволяющего достичь достаточной точности коррекции при меньших временных затратах. Результатом работы является программа, автоматизирующая все процедуры по коррекции магнитной структуры коллайдера ВЭПП-4М.

1. Safranek J. Experimental determination of storage ring optics using orbit response measurements // Nucl. Instrum. Meth. 1997. A388. P. 27–36.
2. Grote H., Schmidt F. MAD-X: an upgrade from MAD8 // Conf. Proc. C. 2003. 030512:3497.

Научный руководитель — канд. техн. наук С. В. Синяткин

УДК 53.072.8

Разработка прототипов датчиков потерь пучка для ЦКП «СКИФ»

А. А. Морсина

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный технический университет

В настоящий момент в Новосибирске строится ЦКП «СКИФ» — источник синхротронного излучения поколения 4+ с энергией 3 ГэВ и эмиттансом 75 пм·рад. Он должен в непрерывном режиме обеспечивать пользователей, работающих на станциях, пучками синхротронного излучения, из-за чего к стабильности электронного пучка предъявляются повышенные требования. Для успешного ввода СКИФ в эксплуатацию и обеспечения его надежной работы необходима система диагностики потерь пучка. Выбраны два типа датчиков потерь: 5 оптоволоконных датчиков на основе черенковского излучения для линейного ускорителя и транспортных каналов и 128 локальных сцинтилляционных датчиков для накопительного кольца.

Цель данной работы — разработка прототипов выбранных датчиков потерь пучка для СКИФ. Такие датчики размещают с внешней стороны вакуумной камеры в тех местах, где потери наиболее вероятны. Оптоволоконный и сцинтилляционный датчики состоят из оптоволокна и сцинтиллятора соответственно, к торцам которых подсоединены фотоэлектронные умножители (ФЭУ). Сигнал с ФЭУ оцифровывается при помощи АЦП.

С помощью численного моделирования в программе FLUKA было определено оптимальное местоположение датчиков потерь на структуре ускорителя и выполнена калибровка сигналов. Экспериментально исследована работа датчиков на действующих ускорительных комплексах ИЯФ СО РАН с параметрами пучка, близкими к пучку СКИФ. Получено, что оптоволоконный датчик локализует места потерь пучка с точностью не хуже 1 м, сцинтилляционный датчик регистрирует пооборотные потери пучка разной величины с высоким динамическим диапазоном порядка 10^6. Экспериментальные данные согласуются с результатами численного моделирования. Полученные результаты будут использованы в дальнейшем при проектировании системы диагностики потерь пучка для СКИФ.

Научный руководитель — Ю. И. Мальцева

УДК 535.2

Исследование однородности ПИН-фотодиода при воздействии синхротронного излучения

А. В. Мурзина

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

С 70-х гг. 20 в. происходит развитие методов исследования вещества с использованием синхротронного излучения (СИ), во всем мире создаются новые специализированные источники. Например, в настоящее время в Новосибирске строится Центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» (ЦКП «СКИФ»).

На каждом источнике СИ планируется создание десятков междисциплинарных экспериментальных станций. На всех станциях предполагается использование систем диагностики и детектирования пучков излучения, с помощью которых определяется положение и интенсивность пучков СИ на станциях. Одним из элементов таких систем является ПИН-фотодиод.

В настоящей работе проводится исследование ПИН-фотодиода, изготовленного в ИФП им. А. В. Ржанова СО РАН. Предметом исследования являлось изучение однородности ПИН-фотодиода, а именно определение фототока в разных положениях полупроводникового прибора относительно падающего пучка синхротронного излучения. Исследование проводилось на специализированной Технологической станции ВЭПП-4 (руководитель — канд. техн. наук Б. Г. Гольденберг) при энергии пучка излучения 16,2 кэВ. Измерения проводились в окрестности максимума интенсивности пучка синхротронного излучения. Использовались две схемы измерений: а) вертикальное перемещение ПИН-фотодиода относительно фиксированной четырехножевой щели, задающей геометрические размеры падающего пучка синхротронного излучения, и б) перемещение вертикальных щелей относительно неподвижного ПИН-фотодиода и горизонтальных щелей. Изменение тока пучка электронов в накопителе в процессе измерений было учтено с помощью нормировки регистрируемого сигнала на ток. Определена рабочая область ПИН-фотодиода, установлена зависимость фототока от горизонтальной и вертикальной координаты положения фотодиода относительно пучка синхротронного излучения.

Эффективная однородная область ПИН-фотодиода составила 5,1 ± 0,1 мм, неоднородность выходного сигнала — 0,54 %, при этом был обнаружен дефект, в области которого неоднородность выходного сигнала ПИН-фотодиода составила 3,42 %. Результаты исследования показали возможность применения ПИН-фотодиодов изготовления ИФП им. А. В. Ржанова СО РАН в системах диагностики пучков синхротронного излучения.

Научный руководитель — канд. физ-мат. наук Я. В. Ракшун

УДК 537.3

Измерение плотности тока пучка электронов, генерируемого электронной пушкой с плазменным катодом

В. А. Непомнящих

Новосибирский государственный университет

Использование электронных пучков, получаемых при помощи электронных пушек, позволяет осуществлять изменение состава и морфологии тонких поверхностных и приповерхностных слоев различных материалов. В настоящее время широко используются электронные пушки с плазменным катодом, поскольку они имеют более высокую плотность тока по сравнению с электронными пушками с термокатодом [1]. Однако плотность тока в поперечном сечении пучка электронов имеет неравномерное распределение, что приводит к неравномерному воздействию электронного пучка на материал. Поэтому измерение плотности тока в поперечном сечении пучка электронов является актуальной задачей.

В данной работе предложена методика измерения плотности тока в пучке с помощью вольфрамового проволочного зонда с диаметром 1 мм и длиной 15 мм. Получены результаты по измерению плотности тока в пучке электронов при ускоряющем напряжении 1000 В и токе пучка 75 мА. Получены зависимости тока от поперечной координаты пучка, которая показала распределение, близкое к нормальному. Проведены измерения при разных скоростях зонда 1,67; 5; 10 мм/с и разных типах сканирования: непрерывное сканирование, в котором проявляется эффект термоэмиссии, и *sewing machine*. Суть метода *sewing machine* состоит в том, что зонд заезжает в определенную точку пучка с большой скоростью и измеряет в ней ток, после чего выезжает для последующего остывания. Это позволяет получать более точные данные.

Сравнение данных, полученных при разных режимах сканирования, позволило сделать оценку, согласно которой максимальная температура зонда составила 2100 °C.

1. Ремпе Н. Г. Промышленное применение электронных пушек с плазменным катодом // Докл. ТУСУРа. 2017. Т. 20, № 3.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Е. А. Баранов

УДК 577.34

Идея специализированной радиобиологической станции на источнике СИ 4-го поколения для исследования прецизионного воздействия на отдельные структурные компоненты единичной нативной клетки

А. А. Неустроева

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск

Создание источников синхротронного излучения (СИ) 4-го поколения, позволяющих получать пучки высокой когерентности и яркости с рекордно малым эммитансом, требует нового взгляда на физические методы исследования биологических объектов. Микроскопические, дифракционные и спектроскопические методы и их комбинации не исчерпывают собой спектр возможных применений СИ. В этих методах СИ используется в качестве физического зонда, позволяющего получить информацию о структуре образца. Тем не менее в биологических исследованиях эти методы являются *прямыми* для изучения *вещества*, но *косвенными* для изучения *жизни*.

Вместе с тем современная радиобиология испытывает смену парадигмы. Фокус исследований смещается на изучение механизмов воздействия неионизирующего излучения, малых доз ионизирующих излучений, немишенных эффектов, включая так называемый *bystander effect* или «эффект свидетеля» и пр. для построения полной теории механизмов взаимодействия излучения и живых систем.

Повреждающее радиационное воздействие пучков СИ на биологический образец является *прямым* и используется во многих актуальных радиобиологических исследованиях. Однако именно источники СИ 4-го поколения позволят сделать это воздействие прецизионным и не только усовершенствовать точность при исследовании конвенциального «эффекта свидетеля», рассматривающего немишенное воздействие на клетки вокруг облученной области, но и перейти к качественно иному уровню исследования, предполагающему изучение эффектов воздействия на отдельные органеллы и молекулярные комплексы в единичной клетке.

Таким образом, выдвинута идея о создании специализированной радиобиологической станции на источнике СИ 4-го поколения для прецизионного воздействия на отдельные структурные компоненты единичной нативной клетки и определения отклика с помощью системы окружения образца, контролирующей функционал клетки непосредственно во время синхротронного эксперимента.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Я. В. Ракшун

УДК 621.314.21

Расчет характеристик первичного контура трансформатора Тесла по измеренным характеристикам вторичного контура

А. Г. Параскун

Новосибирский государственный университет

Цель данной работы — проектирование и изготовление для МЛДКС НГУ большого демонстрационного классического трансформатора Тесла (на 106 В), состоящего из двух связанных настроенных в резонанс контуров с ударным возбуждением — на основе теоретических моделей и экспериментальных измерений в процессе изготовления. Достижение оптимальных параметров по передаче энергии. Конструктивная доработка устройства для повышения стабильности работы и увеличения КПД.

В процессе создания трансформатора Тесла наиболее сложной деталью является вторичный контур, состоящий в нашем случае из 784 м провода, намотанного на трубу диаметром 200 мм и высотой 1 м и покрытого слоем эпоксидной смолы. Поэтому вторичный контур изготавливался в первую очередь, а далее по измеренным параметрам рассчитывались параметры первичного контура. Измеренная частота вторичного контура составила для полуволнового резонанса 500 кГц, четвертьволнового с проводящей полуплоскостью 307 кГц, четвертьволнового с проводящей полуплоскостью и тороидом 221 кГц. Добротности составляли 200, 150 и 65 соответственно. Межвитковая емкость вторичного контура составляет 16,8 пФ, а индуктивность — 16,5 мГн. С тороидом емкость вторичного контура составляет 32 пф.

Для расчетов параметров первичного контура, в отличие от эмпирических формул и калькуляторов, распространенных в интернете, использовались фундаментальные физические законы и уравнения Кирхгофа для связанных контуров с начальными и граничными условиями.

В результате теоретических вычислений расчетная максимальная индуктивность первичного контура (без тора во вторичном) составила 5,5 мкГн, емкость — 0,05 мкФ. Из оценки энергии вторичного контура на напряжении 106 В напряжение зарядки первичного контура составило не менее 18 кВ. Изготовленная индуктивность первичного контура состоит из 9 витков медной трубы диаметром от 290 до 600 мм с возможностью подсоединения гибкого отвода в любом месте. С тороидом резонанс наблюдается на 5 витках, без тороида — на 7 витках.

В результате проведенных работ на собранном генераторе экспериментально измеренные осциллограммы биений в контурах показывают, что максимальная передача энергии с КПД не хуже 80 % наблюдается на 7-й полуволне колебаний. Коэффициент связи контуров k = 0,152. При достижении напряжения 106 В и блоке питания мощностью 1 кВт максимальная частота импульсов составляет 50 Гц. Энергия искры 16 Дж.

Научный руководитель — д-р техн. наук, проф. Е. И. Пальчиков

УДК 621.384.6

Изучение временных и спектральных характеристик новосибирского ЛСЭ

С. В. Рева

Новосибирский государственный университет

В ИЯФ СО РАН действует мощный источник узкополосного терагерцового и инфракрасного излучения — Новосибирский лазер на свободных электронах (НовоЛСЭ). В последние годы проводится активная работа по созданию новых диагностик параметров электронного пучка его 3-й очереди, генерирующей импульсы излучения пикосекундной длительности со средней мощностью в несколько десятков Ватт в среднем инфракрасном диапазоне 8–12 мкм.

Данная работа описывает эксперименты по измерению спектральных и временных характеристик лазерного и спонтанного ондуляторного излучения 3-й очереди НовоЛСЭ. Результаты измерений позволят произвести проверку корректности модельных расчетов установки и определить энергетический разброс пучка электронов. Для регистрации спектров излучения применяется дифракционный монохроматор, болометрическая матрица и полупроводниковые КРТ детекторы. Измерения длительности импульсов производится при помощи автокорреляционного метода, основанного на двухщелевой схеме Юнга. Основная сложность в проведении экспериментов связана с работой в инфракрасной области спектра.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доц. О. И. Мешков

УДК 621.395.66

Разработка платы контроля СВЧ-усилителя мощности 400 Вт

В. А. Смирнов

Новосибирский государственный университет

Ускорители заряженных частиц и ускорительная техника — мощный инструмент для изучения нашего мира на фундаментальном уровне. В настоящий момент уже работает большое число ускорительных установок и еще несколько находятся на стадии глубокой модернизации или строительства, в том числе Центр коллективного пользования «СКИФ» в Новосибирской области — мощный источник синхротронного излучения.

Для ускорения заряженных частиц используются ускоряющие секции, частью системы питания которых являются усилители СВЧ-мощности от сотен ватт до десятков мегаватт. Подобные дорогостоящие устройства требуют надежной эксплуатации, а значит, необходимо постоянно отслеживать их различные ключевые параметры, например: мощность сигнала на входе и выходе усилителя, КСВ, состояние питания, температурный режим — и при необходимости отключать устройство для предотвращения серьезных повреждений.

Цель данной работы — разработка платы контроля параметров СВЧ-усилителя мощности 400 Вт, работающего на частоте 2,856 ГГц. Использующая микроконтроллер TI MSP430FR5867 аналого-цифровая плата позволяет автоматически отслеживать основные параметры усилителя и при критических отклонениях осуществлять отключение устройства, а также автоматический или ручной перезапуск. Все измеренные характеристики выводятся на LCD-дисплей, расположенный на передней панели.

На данный момент разработана электрическая схема, выполнены разводка, создание и распайка платы, производится ее настройка.

Работа выполняется в рамках магистерской работы в НГУ на базе Института ядерной физики им. Г. И. Будкера.

Научные руководители — Д. П. Суханов, канд. техн. наук Г. В. Карпов

УДК 535.8

Расчет рентгенооптического тракта экспериментальной материаловедческой станции ЦКП «СКИФ»

Ю. В. Хомяков

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Материаловедение является одной из наиболее динамично развивающихся наук последних десятилетий, в том числе благодаря созданию и развитию источников синхротронного излучения.

Под Новосибирском создается ЦКП «СКИФ», низкий эмиттанс и высокая яркость которого позволяет реализовать на ондуляторном источнике излучения достаточно универсальную станцию, сочетающую различные методы как дифракционных, так и спектроскопических исследований. При этом ключевую роль для получения необходимых потоков излучения для *in situ* и *operando* исследований играет комплект рентгеновской оптики.

Предметом данной работы являлся выбор оптимального комплекта и поиск таких параметров рентгенооптических элементов, которые позволят станции реализовать экспериментальные методики в режиме микроскопии, т. е. получить в одной точке пространства параметры фокусов излучения от 100 нм до 1 мм.

С учетом специфики экспериментов, планируемых к проведению на станции, произведен оптимизационный расчет параметров вставного устройства — сверхпроводящего ондулятора. Предложена рентгенооптическая схема станции, рассчитан двухзеркальный многослойный монохроматор (DMM) с тремя полосами многослойных покрытий, охватывающих диапазон энергий 10–30 кэВ и обеспечивающих первичную монохроматизацию $dE/E \sim 10^{-2}$ и 5×10^{-2}. Подобраны наборы фильтров, обеспечивающие спектральную чистоту сигнала не хуже 0,5 % при сохранении высоких потоков излучения. Проведен расчет системы финальной монохроматизации — четырехкристального монохроматора (QCM) Si (111), обеспечивающего $dE/E \sim 1{,}3\times10^{-4}$. Рассчитаны параметры коллимирующей оптики (трансфокатор) и оптики финального фокуса (набор составных преломляющих линз — CRL и зеркал Киркпатрика — Баеза — КБ) в режимах коллимации излучения и фокусировки. Для системы КБ выбран материал покрытия, оптимизирована геометрия, учтены шероховатость и ошибка наклона. Для увеличения потока фотонов на образце предложены несколько вариантов совместного использования оптических элементов.

В результате были получены расчетные значения потоков излучения на образце в диапазоне 10^{13} — несколько единиц 10^{15} ф/с с плотностью мощности до 66 мкВт/нм^2 (при средних ошибках наклона 200 нрад).

Результаты расчетов легли в основу концептуального проекта станции.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Я. В. Ракшун

УКАЗАТЕЛЬ АВТОРОВ

Abyzova E. G. 171
Dogadina E. M. 171

Абрамов А. С..... 205
Агафонова Е. В. 172
Акинина М. Д..... 141
Александров А. А. 174
Алексеев В. А..... 175
Алехин С. А..... 107
Аликин Д. О. 205
Алимов Д. В. 224
Андреев А. А..... 269
Андреянов Н. М. 7
Андрикович А. А. 23
Апостол Ю. С..... 108
Асхадуллин И. Н. 24
Афанасьев М. Д. 176
Ахмадиева А. А..... 177, 178, 199
Баженов А. О..... 69
Байструков М. А. 278
Батуева М. А..... 109
Бедарев Е. В. 279
Безверхова О. С..... 143
Белов А. А. 219
Белозерова М. С..... 270
Беспалова А. С..... 144
Бирючков Н. Е..... 271
Богданов С. С. 72, 127, 204
Богословцева А. Л. 110
Бойко Е. В..... 94
Борискин А. А.....111
Бородулина А. В. 225
Бочкарев В. В. 49
Бочкарев Н. В..... 25
Бочко В. А..... 251
Бояркина В. Е..... 26
Буянов Д. А. 145
Валиуллин И. Р..... 8
Валихов В. Д. 178, 197, 206, 209
Васильев А. В..... 205
Васильев М. М. 112
Вергулес А. И..... 70
Вересов С. А. 72
Ветрова Е. С. 252
Возженникова Т. В..... 172
Воинцев В. А..... 50
Гаврисенко Д. Ю..... 51
Галактионов М. М. 253
Галузин И. Р..... 204
Гареев Т. И..... 179
Гензе И. Ю..... 71
Гисич А. В. 146
Гладышева А. А. 147
Гладышева А. В..... 147
Глухова С. А..... 180
Глуцкая А. А..... 27
Говоров Н. М..... 181
Гордиенко М. Р. 117, 118, 120, 122, 134
Горенков И. А..... 52
Горкуша А. С..... 182
Григорьев Р. Е..... 72
Гудько А. С. 113
Гумовская А. А. 73
Гусаченко Д. В. 9
Гуськова М. И. 183
Давыдов Н. В. 53
Данилин К. Д..... 74
Дашапилов Г. Р. 114
Дементьев С. А. 226
Демкин О. В. 148, 165
Деринг Е. Д. 10
Дмитриев Д. В..... 79, 188
Добрынина Е. А. 228
Долгирев В. О. 28, 29
Доровских К. Е. 150
Дорожкина М. С. 280
Дударь М. Р..... 272
Дураков Д. Е..... 75
Ефремов М. А. 184
Жерибор М. О. 115
Жермоленко Е. О. 30
Жуковская А. А. 151
Журенков Я. А..... 54
Забодаев С. В..... 145
Зайцев В. А..... 150, 168
Захожев К. Е. 76
Здорников С. А.....116
Зеликман М. В..... 239
Золотарев Н. А. 185
Зубанов К. С.....117
Зуев В. О..... 273
Ибраемов Н.....11
Иванов Р. С. 55
Иванченко В. Г. 28, 29
Какаулин С. В.....117, 118, 120, 122
Калинина А. В..... 229
Кан Н. 42
Канарская М. А. 152
Кандаракова И. Т..... 230
Каня К. О. 274
Капогузов К. Е. 77
Каргаполов И. Ю. 56
Касьянов Д. В.....118
Кахидзе Н. И. 177, 184, 186, 199, 209
Кинзин К. С.....119
Кирчанова Е. Е..... 12
Кичигин А. А. 187
Кладов В. А. 254
Ковзик В. М..... 78
Колесниченко К. С..... 57
Колоколов М. И..... 231
Колосовский Д. А..... 79, 188

Конев А. В. 153
Коновалова А. О. 31
Коновалова В. П. 189
Кононенко Е. С. 232
Константинов В. В. 154
Копцев Д. А. 80
Косарева Е. К. 190
Кравцов И. Д. 32
Краснова И. А. 81
Кривошеина Д. А. 33
Кудрявцев А. Л. 191
Кузьмина К. С. 120
Кузьмин Н. С. 82
Кундашкин А. Д. 121
Куршаков В. А. 58
Куценко Б. Д. 255
Кыштымов Д. А. 256
Лактионова А. В. 233
Лаппо М. А. 281
Лаптев В. А. 59
Ларичкин М. В. 60
Ледовский В. Е. 122
Литвинцева К. А. 192
Ли Р. В. 257
Локтюшин О. Ю. 13
Лузянин Д. А. 32
Лукьянов А. А. 123
Лукьянов Ан. А. 124
Лунев Н. А. 193
Любякин А. А. 258
Лялин М. А. 282
Майдэбура Я. Е. 83, 195
Мамаева М. П. 84
Мамутов Р. З. 283
Манина А. А. 34
Матрошилов Н. О. 61
Махмудиан М. М. 85
Мельник А. В. 125
Микаева А. С. 86
Милицина Т. С. 8
Милованов Н. А. 155
Миров М. 35
Миронова М. И. 196
Мирошкина В. Д. 197
Митинев Е. С. 204
Моисеев И. А. 198
Морсина А. А. 284
Мубараков Р. Г. 184, 186, 199
Муксунов Н. Я. 87
Мулляджанов И. И. 36
Мункуева Ж. Э. 37
Мурашко С. Н. 38
Насартдинова А. Р. 88
Непомнящих В. А. 286
Непша Н. И. 72
Нестерок Д. С. 14
Нетрусова А. С. 39
Неустроева А. А. 156, 287
Никитенко Н. С. 45
Новоселов К. В. 15
Нуриахметов З. Н. 200
Образцов И. В. 259
Одуд И. М. 234
Омельченко А. Н. 236
Осик Н. А. 237
Палактин Н. Ю. 40
Параскун А. Г. 288
Парий И. 221
Петрова А. В. 126
Петякин Н. В. 201
Плеханов М. С. 238
Пономарев С. А. 79, 188
Почтаренко Р. А. 202
Прядко А. С. 221
Пудова А. А. 239
Пузикова К. М. 260
Растрыгин Д. С. 28, 29
Рева С. В. 26, 289
Роговешко В. М. 240
Рыбак А. А. 41
Рыжков М. С. 89
Рыжук О. Т. 203
Савина К. Г. 72, 127, 204
Садыков А. Р. 241
Сайкина Т. А. 128
Сайфудинова П. О. 275
Самохвалов Ф. А. 129
Самсоненко А. А. 242
Сандомирский А. В. 62
Сараева К. П. 243
Сарыпов Д. И. 90
Сафина В. А. 205
Свяженин И. И. 130
Северин А. С. 131
Селиховкин М. А. 206, 209
Семенова И. Г. 157
Семерикова А. И. 207
Серебренникова П. С. 208
Синкина И. Л. 186, 209
Скворцов И. В. 91
Слабов В. 205
Сластная Д. А. 132
Смирнов В. А. 290
Смирнова К. А. 210
Снегирев А. В. 92
Соболев Г. А. 133
Соболь А. Г. 205
Соколов Б. А. 134
Соколов Н. А. 93
Сон А. Ю. 158
Сорокин Д. В. 94
Сорокин М. И. 135
Соснин Е. А. 245
Стоцкий В. А. 261
Строева П. С. 136
Сурменева М. А. 80, 161, 221
Суслов Д. А. 16
Суюндукова А. Т. 160
Тактаров А. А. 127
Таюпов М. М. 246
Тимофеев В. С. 211
Тихонова А. А. 276
Ткачев И. В. 42
Толмачев К. А. 95
Трусов Л. А. 205
Тульский Д. В. 96
Турсунов Ш. 43

Тюстин Р. Е. 17
У Цзяи 212
Уракова А. О. 161
Урманов Р. В. 262
Ушакова Н. П. 263
Федорец А. Н. 219
Федоров А. А. 97
Филатова Н. А. 163
Фоменко М. В. 164
Фролов Д. И. 213
Фролов М. В. 18
Халилов Р. Д. 44
Харченко Н. А. 214
Холкин А. Л. 80, 161, 205
Хомяков Ю. В. 291
Худайбердиев Д. А. 98
Цибулина А. О. 165
Цырульникова У. В. 167
Черепанова Н. Е. 216
Черепанов А. В. 247
Черепанова С. Л. 63
Чернозем Р. В. 80, 161, 221
Чжан Фань 99
Чжу Чжен 218
Чижик Г. С. 264
Чуй Н. Д. 219
Чэнь Юйцзин 220
Шаленов А. С. 168
Шамаева Д. В. 248
Шаповаленко Н. А. 172
Шарипов С. С. 252
Шастин Л. В. 45
Шатилов Д. А. 137
Шахов Н. В. 45
Шиленко А. В. 169
Шкитов Д. А. 281
Шлапакова Л. Е. 221
Шмигельский Е. А. 64
Шмидт А. С. 277
Шульженко П. Д. 19
Шумилов Н. А. 100
Шупик А. А. 223
Шур В. Я. 205
Щудро Т. А. 101
Эшкулов М. У. 102
Юрченко А. В. 265
Юшин И. И. 170
Юшков И. Д. 103
Ярков Л. В. 20
Ярыгова В. М. 65

СОДЕРЖАНИЕ

АЭРОФИЗИКА

Андреянов Н. М. Оптические и микрофизические характеристики облаков верхнего яруса по данным зенитно-ориентированных лидарно-пиранометрических измерений 7
Валиуллин И. Р., Милицина Т. С. Критерий подобия в задаче сверхзвукового обтекания пористого тела 8
Гусаченко Д. В. Численное моделирование взрывного обжатия цилиндрической кумулятивной облицовки 9
Деринг Е. Д. Исследование процесса рассеяния кластеров и мономеров молекулярного пучка на статичных фоновых частицах 10
Ибраемов Н. Исследование формы и динамики перемещения радиального анодного участка столба дуги в двухкамерном цилиндрическом электроде 11
Кирчанова Е. Е. Разработка алгоритмов расчета скорости движения и ускорения частиц на основе оптической триангуляции их траекторий 12
Локтюшин О. Ю. Интерпретация результатов лазерного поляризационного зондирования конденсационных следов самолетов с применением реанализа ERA5 13
Нестерок Д. С. Численное моделирование процесса обледенения в программном пакете FlowVision на примере крыла NACA0012 и цилиндра 14
Новоселов К. В. Определение параметров пылевого облака из вольфрама методами СИ и PDV 15
Суслов Д. А. Активное управление нестационарным закрученным потоком в модели гидротурбины Френсиса 16
Тюстин Р. Е. Экспериментальное исследование высокоскоростного взаимодействия метаемых микрочастиц с преградой 17
Фролов М. В. Исследование влияния температуры на коэффициент проницаемости материала стенки кремнеземных микросфер 18
Шульженко П. Д. Исследование ветрового комфорта в пешеходной зоне 19
Ярков Л. В. Численное моделирование газодинамики струй азота в сильно разреженном пространстве 20

ФОТОНИКА И КВАНТОВЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Андрикович А. А. Влияние формы оптических поверхностей линз и зеркал на распределение энергетических и поляризационных характеристик прошедшего пучка излучения по его сечению 23
Асхадуллин И. Н. Стандарт частоты на основе эффекта КПН в ячейке с парами Rb87 24
Бочкарев Н. В. Исследование методов структурирования импульсного лазерного излучения и его свойств 25

Бояркина В. Е., Рева С. В. Автокорреляционные измерения излучения
фемтосекундного титан-сапфирового лазера 26
Глуцкая А. А. Методика контроля ключевых характеристик электрооптического
модулятора лазерного излучения на основе высокоомного кристалла KTP 27
Долгирев В. О., Растрыгин Д. С., Иванченко В. Г. Аналитическая модель
дифракции света на многослойных неоднородных голографических
дифракционных структурах в фотополимерных материалах 28
Долгирев В. О., Иванченко В. Г., Растрыгин Д. С. Аналитическая модель
формирования наложенных многослойных неоднородных голографических
дифракционных структур в фотополимерных материалах 29
Жермоленко Е. О. Исследование фотоиндуцированной генерации
оксида азота (NO) 30
Коновалова А. О. Температурная карта активного элемента
мощного лазерного усилителя 31
Кравцов И. Д., Лузянин Д. А. К вопросу о чувствительности
демонстрационной модели маятника Цельнера 32
Кривошеина Д. А. Оптимизация характеристик когерентного оптического
частотного рефлектометра на основе волоконного лазера
с самосканированием частоты 33
Манина А. А. Использование взвешенной дискретизации
в методе дискретных диполей 34
Миров М. Регенерация лактонной формы Родамина С
в протоноакцепторных растворителях 35
Мулляджанов И. И. Бризеры в сильно возмущенном конденсате 36
Мункуева Ж. Э. Запись распределенных случайных отражателей в одномодовых
волоконных световодах с помощью фемтосекундных лазерных импульсов 37
Мурашко С. Н. Оценка эффективности лазерного возбуждения оксида фосфора 38
Нетрусова А. С. Влияние шумовых характеристик волоконного оптического
иттербиевого усилителя на эффективность параметрического усиления 39
Палактин Н. Ю. Моделирование светорассеяния частицами
вблизи многослойной подложки методом дискретных диполей 40
Рыбак А. А. Моделирование узкополосного фильтра на основе резонатора
Фабри — Перо для применения в импульсной терагерцовой спектроскопии 41
Ткачев И. В., Кан Н. Исследование оптических свойств частиц
на гексагональных атмосферных пластинках и столбиках,
а также частицах неправильной формы
для задач лазерного зондирования атмосферы 42
Турсунов Ш.Спектрально-люминесцентные характеристики гомодимеров
некоторых стирилцианиновых красителей в растворах 43
Халилов Р. Д. Коррекция фазовой ошибки сверхпроводящего ондулятора 44
Шахов Н. В., Никитенко Н. С., Шастин Л. В. Характеристики
фотоустойчивости планарно-волоконных люминофорных антенн
для атмосферных ультрафиолетовых телекоммуникаций 45

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

Бочкарев В. В. Калибровка относительной чувствительности каналов полихроматора в области линии H_α 49
Воинцев В. А. Разработка высокочастотного плазменного эмиттера с охлаждаемым фарадеевским экраном 50
Гаврисенко Д. Ю. Разработка высокочастотного плазменного эмиттера с увеличенным содержанием протонов....51
Горенков И. А. Разработка электростатических анализаторов на установках ГДЛ и КОТ: первые экспериментальные результаты 52
Давыдов Н. В. Исследование термической деформации пластин при импульсном нагреве....53
Журенков Я. А. К неустойчивости трехмерных состояний динамического равновесия плазмы Власова — Максвелла....54
Иванов Р. С. Магнитные измерения на установке КОТ....55
Каргаполов И. Ю. Создание инструмента численного моделирования плазменного кильватерного ускорения LCODE 3D....56
Колесниченко К. С. Оптимизация параметров мишенной плазмы в эксперименте на установке КОТ....57
Куршаков В. А. Численное 2D-моделирование формирования конфигурации с обращенным магнитным полем в плазме при атомарной инжекции 58
Лаптев В. А. Движение дугового разряда в магнитном поле между узкими электродами....59
Ларичкин М. В. Оптимизация положения плазменного шнура в транспортной секции установки СМОЛА 60
Матрошилов Н. О. Измерение аппаратной функции щелевого электростатического анализатора....61
Сандомирский А. В. Первые результаты измерения профилей температуры и плотности электронов в плазме ГДЛ томсоновским рассеянием....62
Черепанова С. Л. Развитие интерферометрической методики измерения плотности плазмы на установке ГОЛ-NB 63
Шмигельский Е. А. Неустойчивости быстрых ионов дейтерия в водородной мишенной плазме на установке ГДЛ....64
Ярыгова В. М. Оптимизация протонного кильватерного ускорителя с двойной плазменной секцией....65

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Баженов А. О. Структурные и транспортные свойства пленок топологического изолятора на основе халькогенидов висмута и сурьмы 69
Вергулес А. И. Морфологические изменения на поверхности Si(111) при формировании примесно-индуцированной реконструкции ($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)-Sn 70

Гензе И. Ю. Влияние отжига на температурные зависимости параметров контакта металл/InAlAs 71
Григорьев Р. Е., Богданов С. С., Савина К. Г., Непша Н. И., Вересов С. А. Закономерности избирательной коррозии в биметаллических наночастицах Ni-Al 72
Гумовская А. А. Получение высокоэнтропийного карбида Hf Ta Ti Nb Zr C_5 73
Данилин К. Д. Фотонные кристаллы на основе соединений GeSiSn 74
Дураков Д. Е. Изучение времени разрушения сверхизоляторного состояния 75
Захожев К. Е. Ван-дер-ваальсовый эпитаксиальный рост $SnSe_2$ на поверхности подложки Bi_2Se_3(0001) 76
Капогузов К. Е. Фазовый переход «полупроводник — металл» в нанокристаллах VO_2 77
Ковзик В. М. Первопринципное исследование электронной структуры оксида гафния, легированного лантаном 78
Колосовский Д. А., Пономарев С. А., Дмитриев Д. В. Определение потока фосфора, десорбирующего с подложки InP(001) в процессе отжига 79
Копцев Д. А., Чернозем Р. В., Сурменева М. А., Холкин А. Л. Влияние функционализации поверхности магнитных ядер $MnFe_2O_4$ на закономерности формирования магнитоэлектрических наночастиц «ядро — оболочка», полученных гидротермальным методом 80
Краснова И. А. Исследование влияния собственного окисла CdHgTe после травления на электрофизические свойства границы раздела CdHgTe–Al_2O_3 81
Кузьмин Н. С. СВЧ-фотокондактанс квантового точечного контакта в гетеропереходе GaAs/AlGaAs 82
Майдэбура Я. Е. Исследование формирования GaN квантовых точек на g-AlN и g-SiN 83
Мамаева М. П. Случайная лазерная генерация в монокристалле $CH_3NH_3PbI_3$ 84
Махмудиан М. М. Структура, колебания и вращение двумерного вигнеровского кластера 85
Микаева А. С. Изучение магнитосопротивления структур на основе PbSnTe с ферромагнитными контактами 86
Муксунов Н. Я. Расчет электронного спектра гетероструктуры MoS_2/WS_2 87
Насартдинова А. Р. Излучательные свойства пространственно упорядоченных GeSi квантовых точек, встроенных в фотонные кристаллы 88
Рыжков М. С. Транспортный отклик квантовой ямы на основе CdHgTe сверхкритической ширины 89
Сарыпов Д. И. Электронный транспорт в многоканальном квантовом точечном контакте 90
Скворцов И. В. Изменение структурных и оптических свойств множественных квантовых ям GeSiSn/Si и наноструктур GeSn, полученных на фасетированной поверхности 91
Снегирев А. В. Моделирование процессов рекомбинации зарядов в перовскитных пленках 92

Соколов Н. А. Спиновая аккумуляция в структуре
ферромагнетик/диэлектрик/полупроводник 93
Сорокин Д. В., Бойко Е. В. Электросопротивление графена
при взаимодействии с водой 94
Толмачев К. А. Сегнетоэлектрический гистерезис в тонкопленочных структурах
$HfZrO_2$ с металлическими и полупроводниковыми электродами 95
Тульский Д. В. Осцилляции Шубникова — де Гааза
в квантовой яме CdHgTe сверхкритической ширины 96
Федоров А. А. Электронный транспорт в композитах
на основе полибензимидазола с одностенными углеродными нанотрубками 97
Худайбердиев Д. А. Двумерный андерсоновский топологический изолятор 98
Чжан Фань. Формирование нанокристаллов и аморфных нанокластеров германия
в пленках $GeSiO_x$ с использованием электронно-пучкового отжига 99
Шумилов Н. А. Исследование органических полевых транзисторов
на основе фуран-фениленов 100
Щудро Т. А. Изучение циркулярно-поляризованной
фото- и катодолюминесценции в мультищелочном фотокатоде 101
Эшкулов М. У. Многопараметрическая оптимизация алгоритма обработки
экспериментальных данных транспортных измерений 102
Юшков И. Д. Светочувствительные мемристоры на основе пленок $GeSi_xO_y$
с нанокластерами германия 103

ТЕПЛОФИЗИКА

Алехин С. А. Горение фенола в водокислородном флюиде 107
Апостол Ю. С. Численное исследование турбулентного потока
над волнистой поверхностью 108
Батуева М. А. Моделирование процесса конденсации вблизи слоя Кнудсена
кинетическими методами 109
Богословцева А. Л. Влияние термического отжига фторполимерных покрытий
на их свойства и строение 110
Борискин А. А. Возбуждение цилиндрической детонации
за ослабевающими ударными волнами 111
Васильев М. М. Эволюция свойств смачивания текстурированных
медных поверхностей при наносекундной лазерной обработке 112
Гудько А. С. Прямое преобразование в уравнениях
Кортевега — де Фриза: аномальные ошибки 113
Дашапилов Г. Р. Сопоставление реологии наножидкостей
с одностенными и многостенными углеродными нанотрубками 114
Жерибор М. О. Моделирование процесса распыла струи
из центробежной форсунки методом жидких объемов 115
Здорников С. А. Развитие газожидкостных течений
в горизонтальных трубах 116

Зубанов К. С., Гордиенко М. Р., Какаулин С. В. Разработка схемы
и ультразвукового генератора для борьбы с обледенением....117
Касьянов Д. В., Гордиенко М. Р., Какаулин С. В.
Разработка микроволнового датчика для диагностики обледенения....118
Кинзин К. С. Численное моделирование закрученного течения жидкости
в цилиндрическом контейнере методом решеточных уравнений Больцмана 119
Кузьмина К. С., Гордиенко М. Р., Какаулин С. В. Измерение профилей
скорости капель аэрозоля, налетающих на лопатку ветрогенератора
с помощью метода ЛДА....120
Кундашкин А. Д. Численное моделирование процессов
газового турбулентного горения 121
Ледовский В. Е., Гордиенко М. Р., Какаулин С. В. Создание аэродинамического
стенда по борьбе с обледенением на лопастях ветрогенераторов 122
Лукьянов А. А. Экспериментальное исследование явления обратного
пристенного течения в дозвуковом конфузоре при малом числе Рейнольдса....123
Лукьянов Ан. А. Численное моделирование стационарного снаряда Тейлора....124
Мельник А. В. Влияние гидрофобных свойств мембраны
на процесс сепарации водонефтяной эмульсии 125
Петрова А. В. Структурирование поверхности металлов
обработкой тлеющим разрядом....126
Савина К. Г., Богданов С. С., Тактаров А. А. Зависимость структуры
биметаллических наночастиц, полученных при кристаллизации,
от состава компонент 127
Сайкина Т. А. Численный анализ особенностей разрушения имитатора твэла
быстрого реактора 128
Самохвалов Ф. А. Металл-индуцированная лазерная кристаллизация
композита золота и аморфного кремния 129
Свяженин И. И. Обоснование выбора варианта тепловой защиты
силовых гидромеханических передач
специального самоходного подвижного состава....130
Северин А. С. Распределение старших моментов и асимметрии
производной скорости в затопленной круглой струе....131
Сластная Д. А. Прямое численное моделирование ламинарного горения
осесимметричного течения метановоздушной смеси 132
Соболев Г. А. Теоретическое обоснование выбора способа защиты
пневматической системы от промерзания 133
Соколов Б. А., Гордиенко М. Р. Подготовка и использование
малоинерционных температурных датчиков
для диагностики вихревого эффекта 134
Сорокин М. И. Управление отрывом потока за цилиндром
с использованием пульсирующей струи 135
Строева П. С. Динамика потока импактной струи в условиях
внешнего возмущения двух гармоник....136

Шатилов Д. А. Датчик на основе графена для анализа скорости
динамического потока жидкой среды.....137

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

Акинина М. Д. Оптимизация передаточной функции вестибулярного импланта 141
Безверхова О. С. Влияние нейрональной активности на ольфакторный захват
и транспорт неорганических наночастиц 143
Беспалова А. С. Исследование свойств конъюгатов аптамеров с кластерами бора
как перспективных препаратов для БНЗТ.....144
Буянов Д. А., Забодаев С. В. Разработка аппаратно-программного комплекса
для контроля анаэробных возможностей организма
во время RAMP-протокола 145
Гисич А. В. Определение условного возраста эритроцитов
с учетом процесса везикуляризации.....146
Гладышева А. А., Гладышева А. В. Моделирование пространственных структур
белков и 5’-3’ нетранслируемых районов геномной РНК
многокомпонентного вируса *Kindia tick virus*.....147
Демкин О. В. Моделирование кинетики образования тромбина
на основе вязкоупругих свойств цельной крови 148
Доровских К. Е., Зайцев В. А. Обзор существующих моделей динамики
отолитовых органов 150
Жуковская А. А. Изучение влияния механизмов свертывания нативной крови
на систему гемостаза в условиях изменяющихся внешних возмущений.....151
Канарская М. А. Исследование структуры и термической стабильности
нового типа РНК.....152
Конев А. В. Безмаркерная классификация клеток при проточной цитометрии
на основе широкополосных измерений электрического импеданса 153
Константинов В. В. Локализация ЭЭГ-электродов
по анатомическому МРТ-изображению головы 154
Милованов Н. А. Исследование хиломикронов методом
ультрафиолетовой сканирующей проточной цитометрии.....155
Неустроева А. А. Создание системы контроля функционала живой клетки
при исследованиях с помощью рентгеновского излучения 156
Семенова И. Г. Исследование воздействия сальбутамола
на газотранспортную функцию организма человека 157
Сон А. Ю. Моделирование адаптации метаболизма
клеток скелетных мышц человека в ответ на физическую нагрузку
с учетом их утомляемости.....158

Суюндукова А. Т. Вязкость крови как детерминанта гемодинамики коронарного кровотока 160
Уракова А. О., Чернозем Р. В., Сурменева М. А., Холкин А. Л. Влияние параметров гидротермального синтеза на морфологию, структуру и свойства магнитных наночастиц $MnFe_2O_4$ для тераностики 161
Филатова Н. А. Разработка экспериментальной модели лучевого пневмонита при облучении здоровой ткани легких у крыс 163
Фоменко М. В. Термическая и ферментативная деградация метаболитов в биологических образцах при пробоподготовке....164
Цибулина А. О., Демкин О. В. Реологическая модель крови и оценка гемостатического потенциала на основе вязкоупругих свойств цельной крови....165
Цырульникова У. В. Измерение кинетики образования димеров тромбоцитов с использованием АДФ по индикатрисам светорассеяния на длине волны 660 нм....167
Шаленов А. С., Зайцев В. А. Сравнение скоростей глаз для различных конфигураций электродов электроокулографии во время горизонтального теста импульсных движений головы 168
Шиленко А. В. Сравнение результатов лечения метастазов в головном мозге при гипофракционировании и этапной радиохирургии 169
Юшин И. И. Расчет энергии формирования дуплексов ДНК/ДНК методами молекулярной динамики с использованием метода взвешенных диаграмм....170

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ

Abyzova E. G., Dogadina E. M. Development of biomedical electronic components based on graphene-based nanomaterials 171
Агафонова Е. В., Возженникова Т. В., Шаповаленко Н. А. Способы восстановления деталей сельскохозяйственной техники из полимерных композиционных материалов....172
Александров А. А. Выращивание монокристаллов твердого раствора на основе BaF_2, легированного Yb^{3+}/Tm^{3+} высокого оптического качества для фотоники 174
Алексеев В. А. Квантово-химическое исследование адсорбции лития на поверхности 2D-наноматериалов 175
Афанасьев М. Д. Изучение динамики изменения кристаллической решетки полупроводника InSb в диапазоне 90–450 K 176
Ахмадиева А. А., Кахидзе Н. И. Влияние ультразвуковой обработки на структуру и механические свойства сплава Mg-Ca-Zn....177
Валихов В. Д., Ахмадиева А. А. Исследование влияния базальтовых волокон на структуру и механические свойства технического алюминия....178

Гареев Т. И. Изучение процесса образования субмикронных покрытий при натекании высокоэнтальпийного плазменного потока на поверхность подложки 179
Глухова С. А. Моделирование рассеяния различных бесселевых пучков частицами вблизи плоской подложки 180
Говоров Н. М. Оптимизация параметров глубокой фотолитографии фоторезистов-аналогов SU-8 181
Горкуша А. С. Влияние метода синтеза на образование слоистого перовскитоподобного оксида Sr_2TiO_4 и его активность в реакции окислительной конденсации метана 182
Гуськова М. И. Исследование парамагнитных центров, образующихся в результате пластической деформации алмазов, и влияние на них отжига при высоких давлении и температуре 183
Ефремов М. А., Кахидзе Н. И., Мубараков Р. Г. Влияние детонационного наноалмаза на значение твердости заэвтектического силумина. Зависимость твердости от высоты отливки 184
Золотарев Н. А. Исследование аморфизованных форм углерода в наноразмерных углеродных материалах 185
Кахидзе Н. И., Мубараков Р. Г., Синкина И. Л. Синтез лигатуры Al-Er по гидридной технологии. Исследование влияния лигатуры Al-Er на прочностные свойства сплава АМг5 системы Al-Mg 186
Кичигин А. А. Моделирование спектроскопии потерь энергии электронами с учетом полубесконечной подложки под образцом 187
Колосовский Д. А., Пономарев С. А., Дмитриев Д. В. Удаление оксида с подложки InP(001) в потоке мышьяка 188
Коновалова В. П. *In situ* дифракционные исследования Mn-Zr оксидных катализаторов в реакциях окисления CO и пропана 189
Косарева Е. К. Сублимация тонких пленок пентаэритриттетранитрата: исследование методами атомно-силовой микроскопии 190
Кудрявцев А. Л. Концепция времяпролетного нейтронного дифрактометра 191
Литвинцева К. А. *In situ* исследование окисления метанола на катализаторе V_2O_5/CeO_2 методами ИК-Фурье-спектроскопии и РФЭС 192
Лунев Н. А. Золото-индуцированная кристаллизация тонких пленок нестехиометрического оксида кремния 193
Майдэбура Я. Е. Изменение поверхностной энергии и морфологии монослоев GaN на поверхности AlN в потоке аммиака 195
Миронова М. И. Исследование морфологии и структуры тонких пленок AlN методами зондовой и электронной микроскопии 196
Мирошкина В. Д., Валихов В. Д. Исследование влияния древесного угля на структуру и механические свойства сплава системы Al-Si 197
Моисеев И. А. Исследование процесса образования микротрещин в Ni-обогащенных слоистых катодных материалах с использованием методики Slice&View 198

Мубараков Р. Г., Ахмадиева А. А., Кахидзе Н. И. Влияние наночастиц вольфрама на механические свойства алюминиевого сплава АМг5 199
Нуриахметов З. Н. Исследование влияния отжига и покрытия графеном токопроводящей поверхности резонансной системы на ее электродинамические свойства 200
Петякин Н. В. Исследование электрических свойств и морфологии слоев частично фторированного графена в зависимости от условий их получения 201
Почтаренко Р. А. Физика отказов щебнеочистительных машин 202
Рыжук О. Т. Исследование влияния углеродных нанотрубок на теплопроводность композитных материалов 203
Савина К. Г., Богданов С. С., Митинев Е. С., Галузин И. Р. Размерная зависимость структурных превращений в биметаллических наночастицах в процессе кристаллизации 204
Сафина В. А., Абрамов А. С., Соболь А. Г., В. Слабов, Трусов Л. А., Васильев А. В., Шур В. Я., Холкин А. Л., Аликин Д. О. Создание тонких пленок $BiFeO_3$ методом осаждения из химического раствора с послойным контролем морфологии и фазового состава 205
Селиховкин М. А., Валихов В. Д. Исследование влияния наночастиц алмаза на структуру и механическое поведение сплава Mg-Ca-Zn 206
Семерикова А. И. Экспериментальное исследование стабильности метана в условиях недр планет — ледяных гигантов 207
Серебренникова П. С. Разработка подходов к повышению точности определения параметров элементарных ячеек монокристаллов 208
Синкина И. Л., Кахидзе Н. И., Валихов В. Д., Селиховкин М. А. Исследование структуры сплавов системы Al-Si. Апробация подходов электрохимического травления металлографических шлифов 209
Смирнова К. А. Магнитноструктурные корреляции в цепочечно-полимерных комплексах $Cu(hfac)_2$ с нитронилнитроксилами 210
Тимофеев В. С. Электронная структура и динамика решетки Be_2NF 211
У Цзяи. Изучение роста гетероэпитаксиальных наноструктур германия на рельефных поверхностях кремния 212
Фролов Д. И. Особенности электронного транспорта в $YBaCo_4O_{7+x}$ 213
Харченко Н. А. Структурная диагностика нанесенных никельсодержащих катализаторов $Ni\text{-}Ce_{1-x}Zr_xO_2$ для процесса метанирования оксидов углерода 214
Черепанова Н. Е. Строение силикоалюмофосфата SAPO-11 по данным твердотельной ^{27}Al, ^{29}Si, ^{31}P ЯМР-спектроскопии в сочетании с квантово-химическими расчетами 216
Чжу Чжен. Антиотражающие свойства покрытий из частиц германия, выращенных на оксидированной поверхности кремния 218
Чуй Н. Д., Белов А. А., Федорец А. Н. Микроструктура UO_2–Y_2O_3 керамики, полученной методом искрового плазменного спекания 219

Чэнь Юйцзин. Расчет потенциального рельефа непланарных поверхностей методом молекулярной динамики.....220
Шлапакова Л. Е., И. Парий, Прядко А. С., Сурменева М. А., Чернозем Р. В. Изучение структуры и физико-механических свойств скэффолдов на основе поли-3-оксибутирата и магнетита после биодеградации *in vitro* 221
Шупик А. А. Изучение электропроводности и теплопроводности наножидкостей с УНТ 223

ХИМИЧЕСКАЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Алимов Д. В. Исследование структурных перестроений ионных жидкостей при стекловании методами ЭПР и МД 224
Бородулина А. В. Определение энергии расщепления в нулевом поле высокоспиновых ионов кобальта(II) с помощью циркулярно-поляризованного излучения.....225
Дементьев С. А. Исследование комплексов порфиринов с человеческим сывороточным альбумином с помощью ЭПР-спектроскопии 226
Добрынина Е. А. Возможности спектроскопии рассеяния Мандельштама — Бриллюэна для исследования и характеризации мембран эритроцитов человека 228
Калинина А. В. Адаптация метаболома хрусталиков проходных и пресноводных рыб к осмотическим нагрузкам.....229
Кандаракова И. Т. Восстановление активной фазы никелевых катализаторов переноса водорода в среде сверхкритического изопропанола.....230
Колоколов М. И. Интегрирование импульсов заданной формы в ЭПР-спектрометр 231
Кононенко Е. С. Развитие методов МРТ-визуализации реакторов каталитического гидрирования с использованием параводорода 232
Лактионова А. В. Исследование свойств гидрогелей на основе желатина методом спектроскопии рассеяния Мандельштама — Бриллюэна.....233
Одуд И. М. Исследование электронной структуры диядерных комплексов монетных металлов (Cu(I), Ag(I), Au(I)) с тетрафосфановым мостиковым лигандом 234
Омельченко А. Н. Исследование накопления дейтерированной стеариновой кислоты в эмбрионах мышей методом комбинационного рассеяния 236
Осик Н. А. Восстановленный никотинамидадениндинуклеотид — естественный УФ-фильтр хрусталика птиц.....237
Плеханов М. С. Исследование структурной подвижности металлорганического каркаса UiO-66 (Zr) в присутствии гостевых молекул методом ^{2}H ЯМР-спектроскопии.....238
Пудова А. А., Зеликман М. В. Исследование самоассоциатов макромолекул полисахаридов в водных растворах методом динамического светорассеяния.....239

Роговешко В. М. Измерение энергии ван-дер-ваальсовых комплексов кислорода с ксеноном с использованием техники визуализации карт скоростей фотофрагментов 240
Садыков А. Р. Исследование термического разложения фуроксана и его производных с помощью квантово-химических расчетов....241
Самсоненко А. А. Кристаллизация парамагнитных соединений в градиентом магнитном поле сверхпроводящего магнита....242
Сараева К. П. Исследование диффузии фосфолипидных бислоев методом восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания 243
Соснин Е. А. Исследование влияния добавок антипиренов на горение и термическое разложение армированной стекловолокном эпоксидной смолы 245
Таюпов М. М. Каналы диссоциации при диссоциативном захвате электронов одорантами класса мальтолов 246
Черепанов А. В. Изучение химии образования катионов в пламени этилена: эксперимент и численное моделирование 247
Шамаева Д. В. Исследование влияния гидратации и температуры на фазовое разделение планарных структур DOPC/DPPC/Cholesterol методом микроспектроскопии КРС 248

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ, АСТРОФИЗИКА И КОСМОЛОГИЯ

Бочко В. А. Регистрация процесса электрон-позитронной аннигиляции в мюон и антимюон с детектором КМД-3 на коллайдере ВЭПП-2000 в интервале энергий от 1 до 2 ГэВ....251
Ветрова Е. С., Шарипов С. С. Численное моделирование поглощения линии Hα атмосферой горячего Юпитера Wasp-52b 252
Галактионов М. М. Радиационные поправки к фотон-фотонному рассеянию при низких энергиях 253
Кладов В. А. Измерение сечения процесса $e^+e^- \to K_s^0 K^\pm \pi^\mp$ на детекторе СНД 254
Куценко Б. Д. Изучение конверсионного распада омега мезона в π^0 мезон и электрон-позитронную пару 255
Кыштымов Д. А. Измерение пространственного разрешение для малого прототипа дрейфовой камеры Супер чарм-тау фабрики 256
Ли Р. В. Изучение рождения состояния X(3872) в распадах нейтральных B-мезонов в эксперименте LHCb 257
Любякин А. А. Вычисление полного борновского сечения процесса $e + Ze \to Ze + e^+e^-e$ 258
Образцов И. В. Возможные проявления Новой физики в распадах тау-лептонов в экспериментах на Супер чарм-тау фабрике....259
Пузикова К. М. Разработка калориметра гамма-квантов эксперимента по поиску темного фотона в обратном комптоновском рассеянии 260

Стоцкий В. А. Двухпетлевые поправки
к дифференциальному сечению процесса ее → γγ 261
Урманов Р. В. Измерение времени срабатывания и энерговыделения
в счетчике калориметра Супер чарм-тау фабрики 262
Ушакова Н. П. Изучение процесса $e^+e^- \to \omega\pi^0\pi^0$ на детекторе СНД 263
Чижик Г. С. Экспериментальное исследование процесса аннигиляции
электрон-позитронной пары в нейтрон-антинейтронную пару
в эксперименте на детекторе СНД коллайдера ВЭПП-2000 264
Юрченко А. В. Стартовый сцинтилляционный детектор эксперимента Дейтрон 265

ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ

АВТОМАТИЗАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА, МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОБРАБОТКА ДАННЫХ

Андреев А. А. Блок упаковки данных модуля LASP жидкоаргонового
калориметра ATLAS для системы FEX 269
Белозерова М. С. Разработка интерфейса подключения генераторов событий
в программном окружении на Супер чарм-тау фабрике 270
Бирючков Н. Е. Увеличение динамического диапазона программно-аппаратного
комплекса для сбора данных со сканирующего проточного цитометра 271
Дударь М. Р. Разработка программно-аппаратного комплекса
для автоматизации гидродинамической части сканирующего
проточного цитометра 272
Зуев В. О. Разработка системы измерения трехмерной геометрии наледи
триангуляционными методами с использованием
структурированного освещения 273
Каня К. О. Разработка ПО для онлайн-монитора светимости детектора Belle II 274
Сайфудинова П. О. Программное обеспечение блока синхронизации
для станции «Быстропротекающие процессы» на СКИФ 275
Тихонова А. А. Моделирование восстановления вкладов фотонной
и адронной компонент при обработке сигнала со счетчика CsI(Tl) 276
Шмидт А. С. Автоматизированная система для исследования взаимодействия
капель жидкости с функциональными поверхностями 277

РАДИОФИЗИКА И УСКОРИТЕЛИ

Байструков М. А. Эволюция равновесных пучков заряженных частиц
под действием внешних кильватерных полей в плазме 278
Бедарев Е. В. Исследование возможности обнаружения эффектов несохранения
четности в экспериментах на ускорительном комплексе NICA 279

Дорожкина М. С. Изменение формы равновесного сгустка при вылете в вакуум из плазменного кильватерного ускорителя 280
Лаппо М. А., Шкитов Д. А. Построение моделей мишеней переходного и черенковского излучений в CST Studio Suite 281
Лялин М. А. Настройка нелинейных корректоров для изохронной моды Collector Ring 282
Мамутов Р. З. Коррекция магнитной оптической структуры ускорителя ВЭПП-4М на основе матриц отклика....283
Морсина А. А. Разработка прототипов датчиков потерь пучка для ЦКП «СКИФ» 284
Мурзина А. В. Исследование однородности ПИН-фотодиода при воздействии синхротронного излучения 285
Непомнящих В. А. Измерение плотности тока пучка электронов, генерируемого электронной пушкой с плазменным катодом 286
Неустроева А. А. Идея специализированной радиобиологической станции на источнике СИ 4-го поколения для исследования прецизионного воздействия на отдельные структурные компоненты единичной нативной клетки....287
Параскун А. Г. Расчет характеристик первичного контура трансформатора Тесла по измеренным характеристикам вторичного контура 288
Рева С. В. Изучение временных и спектральных характеристик новосибирского ЛСЭ....289
Смирнов В. А. Разработка платы контроля СВЧ-усилителя мощности 400 Вт 290
Хомяков Ю. В. Расчет рентгенооптического тракта экспериментальной материаловедческой станции ЦКП «СКИФ»....291
Указатель авторов....292

Научное издание

МНСК-2022

АЭРОФИЗИКА
ФОТОНИКА И КВАНТОВЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ
ФИЗИКА ПЛАЗМЫ
ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА
ТЕПЛОФИЗИКА
ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ
ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ, АСТРОФИЗИКА И КОСМОЛОГИЯ
ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ

Материалы
60-й Международной научной студенческой конференции

10–20 апреля 2022 г.

Корректор *Д. И. Ковалёва*
Верстка *А. С. Терешкиной*
Обложка *Е. В. Неклюдовой*

Подписано в печать 02.06.2022 г.
Формат 60 × 84/8. Уч.-изд. л. 38,75. Усл. печ. л. 36.
Тираж 40 экз. Заказ № 82.
Издательско-полиграфический центр НГУ
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2.

Секция
ФИЗИКА

ISBN 978-5-4437-1296-3

Новосибирский государственный университет
*НАСТОЯЩАЯ НАУКА